

Magnetoelektronische Eigenschaften von Graphene-Monolagen mit Spin-Bahn-Kopplungen

Inaugural-Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

vorgelegt von

Artur Hütten

aus Mönchengladbach

Düsseldorf, Juni 2015

aus dem Institut für Theoretische Physik IV
der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Gedruckt mit der Genehmigung der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Referent: Herr Prof. Dr. Reinhold Egger

Korreferent: Herr Prof. Dr. Thomas Heinzel

Tag der mündlichen Prüfung: 10. Juli 2015

Publikationen:

[27] Alessandro de Martino, Artur Hütten, and Reinhold Egger:
„Landau levels, edge states, and strained magnetic waveguides
in graphene monolayers with enhanced spin-orbit interaction“,
Phys. Rev. B **84**, 155420 (2011)

[28] Alexander Zazunov, Arijit Kundu, Artur Hütten, and Reinhold Egger:
„Magnetic scattering of Dirac fermions in topological insulators and graphene“,
Phys. Rev. B **82**, 155431 (2010)

(Die in eckigen Klammern angegebenen Zahlen beziehen sich auf die Nummern des am Ende befindlichen Literaturverzeichnisses.)

In den Hauptkapiteln 3 und 4 der vorliegenden Arbeit werden vornehmlich Ergebnisse dargestellt, über die, wenigstens in ihren Grundzügen, durch die oben genannten Veröffentlichungen (Kapitel 3 in [27] und Kapitel 4 in [28]) bereits Mitteilung gemacht wurde. Keinen Niederschlag dabei fanden jedoch jene Teile der genannten Arbeiten, zu denen ein direkter Beitrag meinerseits nicht vorliegt; so ist insbesondere Section V in [28] meinen geschätzten Kollegen, den Drs. Zazunov et Kundu zuzurechnen und nicht meiner Feder, ähnlich wie die Berechnung der Energiedispersion für die Randzustände (siehe Fig. 3 in [27]) nicht von mir stammt, sondern von Dr. de Martino.

Hingegen erfuhr die Darstellung jener Passagen, an denen ich durch Aufstellung des Modells und dessen mathematische Ausrechnung meinen wenn auch bescheidenen Beitrag beizusteuern in der Lage war, noch eine gewisse Erweiterung: Es handelt sich dabei einerseits um Einzelheiten, die, obgleich sie zum Zeitpunkt der Veröffentlichung bereits vorlagen [Abschnitt 3.6.2 oder Beispiel 1) in 4.2 bzw. 4.3], dort aus Platzgründen keine Berücksichtigung mehr finden konnten; andererseits wurden hingegen die Abschnitte 3.3.2 in Verbindung mit 3.4.1 und 3.4.2 sowie 3.7 in Kapitel 3, desweiteren in Kapitel 4 der Abschnitt 4.6 und der größte Teil (zweites und letztes Drittel) von 4.7 neu erstellt.

*Groß sind die Werke des Herrn;
wer sie erforscht, der hat Freude daran.*

Ps. 111, 2

Abstract

Subsequent to an introduction (in Chapter 1) and presentation of the basic facts (in Chapter 2), this work – besides conclusion and appendix (Chapters 5 resp. 6) – consists of two major parts dealing with the magnetoelectronic properties of graphene, an allotrope of carbon in two dimensions: Whereas the main part (Chapter 3) considers monolayer graphene in the presence of strongly enhanced intrinsic and Rashba-type spin-orbit-couplings, including, besides real magnetic fields, the pseudo fields induced by strain, and concentrates on at least piecewise constant situations, the other, minor, part (Chapter 4) is devoted to magnetic impurities of low or none at all spatial extent, but disregarding, for simplicity, the spin and its interactions. For purpose of comparison, here, the two layer graphene is also considered.

The main findings are as follows: In Chapter 3, the Hamiltonian for the just-above mentioned situation has been set up, and the resulting fourth order differential equation could be solved. The energy levels for a homogeneous, i.e. infinitely extended graphene sheet are given in terms of a fourth order algebraic equation, and are then compared to various simpler and already known cases, e.g. the Rashba case and the pure Landau levels. Especially their deviation from the latter ones lifts their previously prevailing four-fold degeneracy and therefore gives rise for different transitions – transitions between states belonging to the same Landau level in rather high, but nonetheless experimentally unaccessible fields, as well as transitions in lower fields (well below one tesla) between states which belong to different Landau levels – both manifesting themselves, and therefore being measurable, in the resulting spin alignment. Upon that, a phase transition between two similar, yet different Quantum-Spin-Hall states (with opposing spin flow at their boundaries) is predicted for just the point where Zeeman and intrinsic coupling are equally strong.

In addition to that, cases of only piecewise constant situations are considered, and thereby the distributions of particle density, spin, and current are locally pinned and therefore being made accessible for measurements, e.g. by spin-polarized scanning tunneling microscopy. Finally, with a multi-region setup, an outlook is given to some sort of construction kit, which will enable further investigation on various of these waveguides.

Chapter 4, on the other hand, disregards the spin and its interactions (because of their very unimportance in that regard) and develops a scattering theory, and the various cross sections, for scatterers both with and without a net magnetic flux. In addition, the latter case is then compared to the Schrödinger and the case of two layer graphene. Whereas both of them, because of their parabolic dispersion, give the same results for magnetic impurities, as one layer graphene does for the corresponding electric disturbances, the calculated cross sections for the magnetic scatterers, e.g. dipoles, in monolayer graphene are unprecedented. Besides the dipoles, the homogeneous disc (with a net magnetic flux) should be of practical importance, too.

Zusammenfassung

Auf eine Einführung (Kapitel 1) und die Darstellung der entsprechenden Grundlagen (in Kapitel 2) folgend, enthält diese Arbeit neben Schlussfolgerung und Anhang (Kapitel 5 bzw. 6) zwei wesentliche Teile, die sich mit den magnetoelektronischen Eigenschaften des Graphen, einer zweidimensionalen Modifikation des Kohlenstoffs befassen: Während der Hauptteil (Kapitel 3), der sich auf wenigstens stückweise konstante Situationen konzentriert, einlagiges Graphen in Gegenwart stark erhöhter Spin-Bahn-Wechselwirkungen (intrinsischer Art und vom Rashba-Typ) unter Einschluss sowohl echter wie auch pseudomagnetischer Felder untersucht, die von Verzerrungen stammen, ist der zweite, kleinere, Teil (Kapitel 4) magnetischen Verunreinigungen gewidmet, die von geringer bis gar keiner räumlichen Erstreckung sind – der Einfachheit halber ohne Beachtung des Spins und seiner Wechselwirkungen. Zu Vergleichszwecken wird hier auch das zweilagige Graphen betrachtet.

Die Hauptergebnisse sind wie folgt: Im Kapitel 3 wurde der Hamilton-Operator für die soeben erwähnte Situation aufgestellt und die sich ergebende Differentialgleichung vierter Ordnung gelöst. Die Energieniveaus für eine homogene, d.h. unendlich ausgedehnte Graphenschicht werden in Form einer algebraischen Gleichung vierter Ordnung angegeben und mit diversen einfacheren sowie bereits bekannten Fällen verglichen, bspw. dem Rashba-Fall und den reinen Landau-Niveaus. Insbesondere ihre Abweichung von den Letzteren hebt die zuvor herrschende, vierfache Entartung auf und bietet somit Anlass für verschiedene Übergänge – sowohl Übergänge zwischen Zuständen, die demselben Landau-Niveau angehören, in recht hohen, jedoch keineswegs experimentell unzugänglichen Feldstärken als auch Übergänge in niedrigeren Feldern (deutlich unterhalb von 1 Tesla) zwischen Zuständen zu unterschiedlichen Niveaus – welche sich beide in der Spinausrichtung zeigen und dadurch messbar werden. Darüberhinaus wird ein Phasenübergang zwischen zwei einander ähnelnden und doch verschiedenen Quanten-Spin-Hall-Zuständen vorausgesagt (mit entgegengesetztem Spinfluss an den Probenrändern) gerade für jenen Punkt, an dem die intrinsische und die Zeeman-Koppelung von gleicher Stärke sind.

Zusätzlich wurden Fälle mit nur stückweise konstanten Gegebenheiten erfasst, wodurch die Verteilungen von Teilchendichte, -spin und -strom räumlich festgelegt und damit einer Messung etwa mittels spinpolarisierter Rastertunnelmikroskopie zugänglich gemacht werden. Abschließend wird über ein Szenario mit sehr vielen Bereichen ein Ausblick auf eine Art Baukasten dargetan, der eine weitere Untersuchung verschiedener dieser Wellenleiter möglich machen wird.

Kapitel 4 dagegen vernachlässigt den Spin und seine Wechselwirkungen (die in dieser Hinsicht gänzlich unerheblich sind) und entwickelt eine Streutheorie einschließlich der verschiedenen Streuquerschnitte für Streuer sowohl mit wie ohne magnetischen Nettofluss. Zusätzlich wird der letztgenannte Fall dann mit dem zweilagigen Graphen und dem Schrödinger-Fall verglichen. Während beide, ihrer quadratischen Dispersion wegen, für magnetische Verunreinigungen dieselben Resultate zeitigen wie das einlagige Graphen den entsprechenden elektrischen Störstellen gegenüber, besitzen die berechneten Querschnitte für magnetische Streuzentren, etwa Dipole, im Letztgenannten keine Präzedenz. Neben den Dipolen sollte auch die homogen magnetisierte Scheibe (mit Nettofluss) von praktischer Bedeutung sein.

Inhaltsverzeichnis

Abstract	1
Zusammenfassung	3
Kapitel 1. Einführung	7
Kapitel 2. Graphen – die Grundlagen	11
2.1. Allgemeines und Kristallstruktur	11
2.2. Dispersionsrelation und Hamilton-Operator	13
2.3. Chiralität und Klein-Tunneln	18
2.4. Die Wirkung magnetischer Felder	22
2.5. Die Spin-Bahn-Kopplung	26
2.6. Die Spin-Bahn-Kopplung im Graphen und ihre Erhöhung	30
2.7. Mechanische Verzerrungen und Pseudo-Vektorpotential	35
Kapitel 3. Gleichzeitiger Einfluss beider Spin-Bahn-Kopplungen, von Magnetfeldern und Verzerrungen	39
3.1. Zielstellung, allgemeiner Hamilton-Operator und Symmetrien	39
3.2. Der Modell-Hamiltonian und seine Lösungen	42
3.3. Homogener Bereich: die erlaubten Energien und Zustände	45
3.3.1. Vierfache Fallunterscheidung	49
3.3.2. Übergänge im Hoch- und Niedrigfeldbereich	51
3.4. Spinverteilung, Randzustände und Phasenübergang	59
3.4.1. Übergänge unter Beteiligung von Zuständen verschiedener Herkunft	65
3.4.2. Übergänge zwischen Zuständen zum ursprünglich gleichen Landau-Niveau	65
3.4.3. QSH-Phasenübergang	66
3.5. Hamilton-Operator ohne Magnetfeld	75
3.6. Lineare magnetische Strukturen: Wellenleiter	77
3.6.1. Konfiguration I: Antiparalleler Fall	79
3.6.2. Konfiguration II: Paralleler Fall	84
3.6.3. Konfiguration III: Symmetrischer Fall mit Gegenfeld	87
3.7. Transmission von Ladungsträgern über die Grenzen hinweg	92
Kapitel 4. Streuung an magnetischen Störstellen	101
4.1. Streuamplitude und -querschnitte in 1. Bornscher Näherung	101
4.2. Beispiele für Potentiale ohne $\frac{1}{r}$ -Anteil	106
4.3. Zweilagiges Graphen und der Schrödinger-Fall	112
4.4. Ein Potential ohne Feld? Das Flussschlauch-Problem	117
4.5. Potentiale mit einem $\frac{1}{r}$ -Anteil	122
4.6. Zwei Beispiele	125

4.7. Rückschauender Vergleich, Voraussetzungen und Folgerungen	128
Kapitel 5. Zusammenfassende Diskussion und Ausblick	135
Kapitel 6. Ergänzender Anhang	141
6.1. Ergänzungen zu Abschnitt 3.2	141
6.2. Ergänzungen zu Abschnitt 3.5	145
6.3. Ergänzungen zu Abschnitt 3.6	146
6.4. Ergänzungen zu Abschnitt 4.1	149
6.5. Ergänzungen zu Abschnitt 4.2	150
6.6. Ergänzungen zu Abschnitt 4.3	150
6.7. Ergänzungen zu Abschnitt 4.5	151
Literaturverzeichnis	155
Danksagung	161
Erklärung	163

KAPITEL 1

Einführung

Im Jahre 2004 [1] erfolgte die ebenso unverhoffte wie andererseits vielleicht auch längst überfällige Entdeckung – oder besser gesagt: Isolation – von Graphen, einatomaren Schichten des Kohlenstoffs in einem hexagonalen Gitter. Denn während auf der einen Seite theoretische Überlegungen [2, 3] gegen deren freie Existenz zu sprechen schienen, wurden sie doch seit der Mitte des 20. Jahrhunderts (beginnend mit [4]) ausgiebig von verschiedenen Theoretikern genutzt, um beispielsweise und insbesondere die Bandstruktur des Graphits zu ergründen, der sich aus derartigen Schichten zusammensetzt.

Im Folgejahr, also schon 2005, gelang es zwei getrennt voneinander arbeitenden Gruppen ([5] und [6]), an einzelnen dieser Schichten [1LG = einlagiges Graphen] einen besonderen (halbzahligen) Quanten-Hall-Effekt (QHE) nachzuweisen, worauf alsbald der Boom in der Graphenforschung begann.

Auch rund ein Jahrzehnt nach seiner Entdeckung ist die Faszination, die von diesem Material ausgeht, nach wie vor ungebrochen. Diese zeigte sich (auch für die Öffentlichkeit) an der recht bald darauf erfolgten Verleihung des Nobelpreises an Andre Geim und Konstantin Novoselov im Jahre 2010 und ist, so darf man füglich vermuten, bedingt durch das Zusammentreten einer Fülle [7] theoretischer Aspekte, die nur dem Graphen zueigen sind, mit einer ebensolchen Mannigfaltigkeit hier zu erwartender Anwendungsmöglichkeiten, wobei diese einander nicht bloß ergänzen, sondern teilweise auch wechselseitig bedingen. Anlässlich eines Vortrags [8] zählen die beiden Preisträger aus der Überfülle seiner besonderen Eigenschaften – neben einigen anderen und in umgekehrter Anordnung – die folgenden auf, bei denen das Graphen der eindeutige Rekordhalter ist, doch will ich mich dabei auf diejenigen Merkmale beschränken, die mit dem Thema dieser Arbeit in einem gewissen, noch erkennbaren Zusammenhange stehen. Graphen besitzt

- (1) die längste mittlere freie Weglänge im Bereich von Mikrometern,
- (2) in den praktisch masselosen Dirac-Weyl-Quasi-Teilchen die leichtesten überhaupt möglichen Ladungsträger,
- (3) eine minimale elektrische Leitfähigkeit sogar noch bei deren nomineller Abwesenheit,
- (4) die höchste intrinsische Trägerbeweglichkeit (etwa 100 mal höher als in Silizium),
- (5) die höchste Stromdichte bei Zimmertemperatur (etwa um den gleichen Faktor größer als bei Kupfer) und
- (6) eine Wärmeleitfähigkeit, die sogar die des Diamanten übertrifft, sowie
- (7) die für einen Kristall stärkste Dehnungsfähigkeit von bis zu 20 % im elastischen Bereich.

All diese Charakteristika prädestinieren das Graphen geradewegs dazu, Ausgangspunkt und Basismaterial einer neuen Halbleiterelektronik zu werden, da langfristig fortgesetzte Miniaturisierungstendenzen [9] die klassischen dreidimensionalen (3D) Materialien wie Silizium und Galliumarsenid notgedrungen bereits in absehbarer Zeit an ihre Grenzen werden stoßen lassen. Für das Graphen sprechen neben all den oben aufgeführten Punkten, die es im Hinblick auf Leistungsbedarf, Kühlung und Verarbeitungsgeschwindigkeit optimal erscheinen lassen, auch noch seine denkbar geringsten Abmessungen, handelt es sich doch um einatomare, also lediglich zweidimensionale (2D) Schichten, bestehend aus den (eventuell neben Bornitrid BN) kleinstmöglichen Atomen, die dafür überhaupt in Frage kommen. Der ihm fehlenden Energielücke wegen scheint aber dem Graphen der direkte Weg dorthin versperrt zu sein, bleibt ihm doch, da auch elektrostatische Barrieren durch das Klein-Tunneln [10, 11, 12] wirkungsvoll vereitelt werden, zunächst die Möglichkeit versagt, den Stromfluss *vom Element her* zu unterbrechen. Mehrere Aus-, vielleicht auch Umwege bieten sich an, werden diskutiert und ausgiebig untersucht:

- (1) Durch das Zurechtschneiden zu einem Streifen, einem sogenannten „nanoribbon“, tut sich, den Grundprinzipien der Quantenmechanik gemäß, eine zu seiner Breite näherungsweise umgekehrt proportionale [13] Energielücke auf.
- (2) Durch die gegenseitige Wechselwirkung der Schichten untereinander kommt es in mehrlagigem, insbesondere bereits in zweilagigem Graphen (2LG) zu einem ganz geringfügigen Bandüberlapp [14]. Dieser kann aber durch ein von außen angelegtes elektrisches Feld, welches auf die einzelnen Schichten unterschiedlich durchgreift und damit deren Symmetrie bricht, nicht bloß aufgehoben, sondern in eine sogar steuerbare Lücke umgewandelt werden [15, 16, 17].
- (3) Auch durch Adsorbate, insbesondere schwere Adatome, die jedoch im Gegensatz zu einer zweiten (durchgängigen) Graphenschicht lediglich Bedeckungsgrade im Prozentbereich bedeuten und außerdem noch lokale Differenzierungen vorzunehmen gestatten, wird über die mit ihnen einhergehenden und unter Umständen drastisch verstärkten [18] Spin-Bahn-Kopplungen (deren es zwei verschiedene gibt) ebenfalls eine Energielücke eröffnet.
- (4) Im Gegensatz zu elektrostatischen Potentialen erlauben Magnetfelder [19] einen wirksamen Einschluss der Ladungsträger im Graphen bzw. einem definiert begrenzten Teilbereich desselben.

Ob und, wenn ja, welcher dieser Ansätze sich als ein technisch gangbarer und dann auch ökonomisch sinnvoller Weg beschreiben lässt, oder ob es sich dagegen als notwendig erweisen wird, vom chemisch unveränderten Graphen als Grundmaterial abzugehen [20, 21] und weitere Elemente in dasselbe einzubauen, ist beim gegenwärtigen Stande des Forschungsgebietes noch überhaupt nicht abzusehen. Erst die Zukunft wird ermöglichen, die jeweiligen Vor- und Nachteile zu erkennen, um auf dieser Grundlage dann eine gezielte Entscheidung herbeiführen zu können.

Es mag nun einer persönlichen Präferenz geschuldet sein, wenn mir unter Vermeidung sowohl der Zerstückelung der Schicht als auch des Aufeinandertürens zweier (oder gar mehrerer) solcher Schichten – denn Letzteres opfert viele ihrer anderen schönen Eigenschaften, und vom Graphen bleibt nur Wenig mehr als bloß

dessen Chiralität erhalten – ein Vorgehen näher am Fundament des ursprünglich-einlagigen Graphen erscheint, das sich auf die beiden letztgenannten Punkte der obigen Liste stützt und sie gegebenenfalls sogar sinnreich miteinander kombiniert.

Auch dass es, wie gesagt, noch völlig unklar ist, ob dies der Weg der Zukunft sein wird, ist hier zunächst von minderer Bedeutung, tut es doch der intellektuellen Faszination und Herausforderung, die von dieser Thematik für den rein forschenden Wissenschaftler ausgeht, keinen Abbruch, da es trotzdem [oder auch gerade deswegen] von einem schier intellektuellen Standpunkt aus wissenswert erscheint, die aufgeführten Effekte in Kombination und darum ihrer Wechselbeziehung zueinander in Aktion zu sehen und zu untersuchen. Auch vom Aspekt der theoretischen Grundlagen her ist sie interessant, und zwar insofern, als die diesbezüglichen Gleichungen nichtlinear sind und ihre Kombination demzufolge nicht-trivial. Explizit gesagt handelt es sich dabei um die beiden Formen der Spin-Bahn-Wechselwirkung, nämlich die intrinsische und die Rashba-Kopplung (siehe dazu Abschnitt 2.5), sowie ein von außen anzulegendes Magnetfeld.

Neben der selbstverständlich vorliegenden Untersuchung all dieser Effekte im Einzelnen wurden zuweilen auch deren zwei in Kombination betrachtet, so beispielsweise das Zusammenwirken beider Spin-Bahn-Kopplungen in [22] und [23], jedoch *ohne* ein (die Transmission behinderndes) Magnetfeld. Andererseits wurde, so in [24] und [25], *beim Vorliegen* magnetischer Felder zwar die Rashba-Kopplung (aber eben nur diese und nicht auch gleichermaßen die intrinsische) mit in Rechnung gestellt.

Die Kombination aller drei Effekte sowie mechanischer Verzerrungen, die ein (pseudo)magnetisches Feld zu imitieren in der Lage sind, wird der Inhalt des Kapitels 3 sein.

Wie sich, als diese Arbeit begonnen wurde, herausstellte, gab es, was die Streuung an magnetischen Störstellen anbelangt, keine vergleichbare mir bekannte Arbeit, wie sie etwa Novikov beispielgebend mit [26] für das analoge Problem der elektrischen Störstellen im Graphen geleistet hat. Auch diese Unterlassung soll hier nachgeholt werden und bildet den Inhalt des Kapitels 4.

Die hier dargestellten Ergebnisse wurden bereits in verknappter Form und ihrem Wesen nach, wenngleich auch nicht in allen Grundaussagen, in den Veröffentlichungen [27] und [28] mitgeteilt. Die vorliegende Arbeit selbst gliedert sich wie folgt:

Nach einer Einführung in die dazu notwendigen Grundlagen (Kapitel 2) stellen die beiden dann folgenden Hauptkapitel (Kapitel 3 und 4) die neu hinzugewonnenen Erkenntnisse dar. Kapitel 5 bietet eine nicht nur rückblickende Zusammenfassung. Einige mathematische Einzelheiten wurden der leichteren Lesbarkeit halber in einen Anhang ausgelagert.

Graphen – die Grundlagen

2.1. Allgemeines und Kristallstruktur

Kohlenstoff (C), das leichteste Element der vierten Hauptgruppe, ist als solches natürlich vierwertig – und doch ist diese Aussage in Wahrheit weitaus weniger trivial, als sie auf den ersten Blick erscheinen mag. Bezeichnet man mit hochgestellten Ziffern die Besetzung der in der üblichen Nomenklatur (n und l als Haupt- und Nebenquantenzahl, letztere durch die Buchstaben s, p, d, f, etc. für $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ kodiert) angegebenen Atomorbitale, so gilt nämlich für die Elektronenstruktur des Kohlenstoffs, wenn dieser sich im Grundzustand befindet: $1s^2 2s^2 2p^2$. Somit ist das 2s-Niveau ebenso vollständig gefüllt („abgesättigt“) wie das 1s-Niveau, und es könnten sich – den beiden p-Zuständen entsprechend – nur zwei Bindungen ausbilden. Um aber das Vorliegen solcher Verbindungen wie Methan (CH_4) u.a. erklärbar werden zu lassen, ist der folgende Mechanismus heranzuziehen:

Eines der beiden 2s-Elektronen geht in das 2p-Niveau über, sodass Letzteres mit drei Elektronen genau halb gefüllt ist und gemäß der Hundschen Regel die Zustände p_x , p_y und p_z in je einfacher Besetzung enthält. Die dazu notwendige, nicht allzu hohe Promotionsenergie – im H-Atom sind die 2s- und 2p-Zustände energetisch entartet – wird letzten Endes durch die zusätzlichen Bindungen wieder hereingeholt (denn nicht alle Atome bilden ihre Bindungen zur gleichen Zeit aus). Allerdings muss zuvor noch eine Vermischung („Hybridisierung“) des einen s- und der drei p-Orbitale zu vier so genannten sp^3 -Hybridorbitalen stattgefunden haben, andernfalls die Tatsache unerklärlich bliebe, dass beim Methan alle vier Bindungen vollkommen gleichartig sind. Diese weisen in die Ecken eines regulären Tetraeders, schließen somit Winkel von jeweils $\arccos(-1/3) = 109^\circ 28'$ ein und ermöglichen folglich auch eine räumliche Vernetzung der Kohlenstoffatome untereinander. Wendet man dieses Konzept der sp^3 -Hybridisierung auf den Kohlenstoff als Element an, so gelangt man zur Diamantstruktur. Da dessen Bindungen nur sehr schwer aufzubrechen sind, handelt es sich beim Diamanten nicht bloß um eine der härtesten Substanzen überhaupt, sondern auch um einen äußerst guten Isolator.

Wenn an der Hybridisierung, was durchaus vorkommt, neben dem s-Elektron nur eines oder auch zwei der vorhandenen drei p-Elektronen beteiligt sind, spricht man entsprechend von sp - bzw. sp^2 -Hybridisierung, und die restlichen p-Elektronen bilden ihre Bindungen aus diesen, noch unveränderten Zuständen hervorgehend aus, und zwar je nach den gegebenen Möglichkeiten zu anderen Atomen (oft Wasserstoff) als auch zu den bereits miteinander verknüpften C-Atomen. Im letzteren Falle entstehen also Mehrfachbindungen, und man unterscheidet dabei – analog zur Nomenklatur der Atomorbitale – zwischen den aus den p-Zuständen durch Überlappung und Delokalisierung hervorgehenden π -Orbitalen einerseits und dem Grundgerüst

der σ -Orbitale andererseits, das aus den sp -, sp^2 - respektive sp^3 -Hybridzuständen entstanden ist.

So kommt es bei der sp -Hybridisierung als dem sozusagen anderen Extrem beim Azetylen-Molekül (Ethin) zu einer Dreifachbindung. Da auf diese Art jedoch lediglich gewissermaßen eindimensionale Gebilde (Kettenmoleküle) hervorgebracht werden können, sei dies lediglich der Vollständigkeit halber erwähnt und hier nicht weiter ausgeführt.

Von ungleich größerer Relevanz hingegen ist im vorliegenden Zusammenhange die sp^2 -Hybridisierung, bei der das Grundgerüst der σ -Bindungen in einer Ebene liegt, so dass der Bindungswinkel exakt 120° beträgt und sich ein hexagonales Gitter auszubilden vermag. Beim Kohlenstoff ist dieses Honigwabengitter in zweierlei Form verwirklicht, und zwar einmal als Einzelschicht, wenn die senkrecht zur Gitterebene ausgerichteten p_z -Orbitale mangels anderer Bindungspartner miteinander zu überlappen genötigt sind, wodurch diese letztlich eine Delokalisierung über das gesamte Gitter erfahren. Dies stellt das inzwischen recht berühmt gewordene Graphen dar, welches seinerseits – in verschiedener Weise übereinandergestapelt – dann ein klassisches Material aufbaut, nämlich das Mineral Graphit. Hierbei bleiben, da zwischen den Schichten lediglich die vergleichsweise schwachen van-der-Waals-Kräfte zur Wirkung gelangen, sowohl der Charakter der Schichten als auch die in ihnen herrschenden Bindungsverhältnisse im Wesentlichen erhalten.

Desweiteren denkbar ist noch die Möglichkeit, dass die p_z -Orbitale, anstatt sich gegenseitig zu überlappen, eine Bindung mit anderen, vorzugsweise einwertigen Atomen eingehen. Dieser Fall wird jedoch, soweit mir bekannt, nicht realisiert, und zwar deshalb nicht, weil dann wieder vier, wenn auch unterschiedliche Bindungspartner vorlägen, sodass die sp^3 -Hybridisierung die energetisch günstigere Alternative darstellt. Deren stark unsymmetrische Orbitale erlauben nämlich einen räumlich größeren Überlapp als die andernfalls noch verbleibenden p_z -Orbitale, die dazu nur mit jeweils ihrer Hälfte beizusteuern in der Lage wären. Die zuvor ebene Anordnung der Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindungen wird dadurch selbstredend vereitelt, und bei der vollständig mit Wasserstoff abgesättigten Variante des Graphen, dem, wie es scheint, tatsächlich existenten (siehe [20]) Graphan, liegt demgemäß eine gewinkelte Struktur vor. In [21] werden dafür zwei alternative Möglichkeiten genannt; [29] gibt neben weiteren für die wahrscheinlichste unter ihnen einen Winkel von $107^\circ 20'$ zwischen der C-H- und den C-C-Bindungen an.

Beim oben bereits erwähnten Graphen, auf das im Folgenden fokussiert werden soll, beträgt der Abstand benachbarter Kohlenstoffatome $a = \left| \vec{\delta}_j \right| = 142$ pm, sodass sich seine Gitterkonstante (siehe Abb. 2.1) auf $d = \left| \vec{a}_{1,2} \right| = \sqrt{3}a = 246$ pm beläuft. Einen Anhaltspunkt für die Dicke des Graphen liefert der Abstand der Schichten im Graphit von $c = 335$ pm, wobei der angegeben Wert in zweierlei Hinsicht mit Vorsicht zu genießen ist: Erstens kann eine gegenseitige Beeinflussung der Schichten, beispielsweise eine Kontraktion, keineswegs ausgeschlossen werden, und zweitens beinhaltet eine derartige Angabe eine grundsätzliche Problematik insofern, als die Schichtdicke durch die Ausdehnung der Atomorbitale gegeben ist, welche bekanntlich keinen scharfen Rand aufweisen (die um fast fünf Größenordnungen kleineren Kernradien sind demgegenüber völlig zu vernachlässigen).

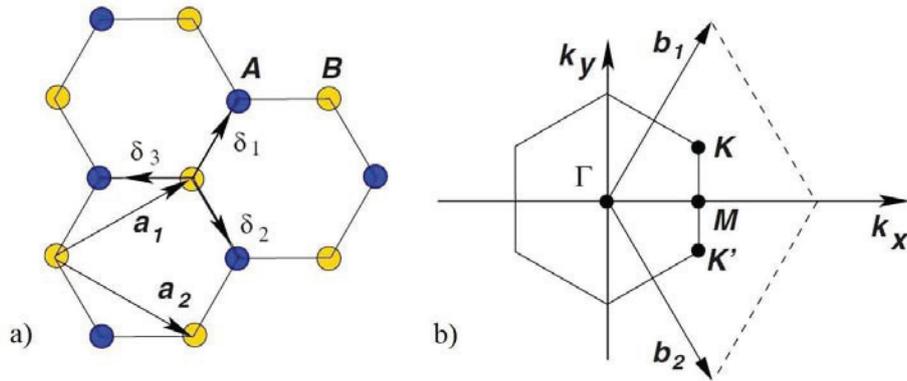


ABBILDUNG 2.1. Direktes und reziprokes Gitter des Graphen: a) Hexagonales Honigwabengitter aus Kohlenstoffatomen. $\vec{\delta}_j$ mit $j = 1, 2, 3$ bezeichnet die zu den nächsten Nachbarn weisenden Vektoren, \vec{a}_1 und \vec{a}_2 hingegen die Basisvektoren des Gitters. Man beachte die durch farbliche Kennzeichnung hervorgehobenen beiden Untergitter der A- und B-Atome. b) Ebenfalls hexagonale Brillouin-Zone mit den Basisvektoren des reziproken Gitters $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} \cdot (1, \sqrt{3})$ und $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} \cdot (1, -\sqrt{3})$. Die Dirac-Punkte liegen auf den Ecken des Sechsecks. Auch hier gibt es zwei nichtäquivalente Punkte, nämlich K und K' . Die restlichen Eckpunkte (Rotation um jeweils $\pm 120^\circ$) ergeben sich durch die angrenzenden Zonen und können durch (Linearkombinationen aus) \vec{b}_1 und \vec{b}_2 erreicht werden. Entnommen aus [7].

2.2. Dispersionsrelation und Hamilton-Operator

Da das Gerüst der σ -Elektronen im Graphen sehr stark ist – in [30] wird ein Elastizitätsmodul von 1 TPa angegeben –, sind diese für die elektronischen Eigenschaften von geringerer Bedeutung als die noch verbleibenden p_z -Elektronen. Diese untersuchte Philip Russell Wallace in seiner klassischen Arbeit [4] aus dem Jahre 1947, ausgehend von ihrer festen Bindung an das jeweilige C-Atom. Unter der bei diesem als Tight-Binding-Methode bezeichneten Verfahren üblichen Vernachlässigung sämtlicher Überlappungsintegrale sowie bei Berücksichtigung der Wechselwirkungsenergien lediglich zwischen nächsten (t) und übernächsten Nachbarn (t') kommt er dabei zu folgendem Ergebnis für die Dispersionsrelation der π -Elektronen in einer einzelnen Schicht:

$$(2.1) \quad E_{\pm}(\vec{k}) = \pm t \cdot \sqrt{3 + f(\vec{k})} - t' \cdot f(\vec{k})$$

mit

$$(2.2) \quad f(\vec{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{1}{2}\sqrt{3}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right)$$

(die Schreibweise wurde geringfügig angepasst und der Nullpunkt der Energiezählung in das Fermi-Niveau gelegt). Zu dieser Beziehung gelangt man, wenn man die Eigenwerte des Hamilton-Operators bestimmt, der, nach entsprechender Fouriertransformation in den Wellenzahlvektorraum und bezogen auf die Atomzustände der Gitterplätze A und B als Basis, wie folgt lautet:

$$(2.3) \quad H = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix}$$

Hierin sind die Nebendiagonalelemente

$$(2.4) \quad h_{12} = h_{21}^* = -\sum_{j=1}^3 t \cdot \exp\left(-i \vec{k} \cdot \vec{\delta}_j\right) = -t \cdot \left[\exp(ik_x a) + 2 \exp\left(-\frac{i}{2} k_x a\right) \cdot \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y a\right) \right]$$

den Wechselwirkungen benachbarter Atome zugeordnet, die durch die Vektoren

$$(2.5) \quad \vec{\delta}_{1,2} = \frac{a}{2} \cdot (1, \pm\sqrt{3})$$

$$(2.6) \quad \text{sowie } \vec{\delta}_3 = -a \cdot (1, 0)$$

erreicht werden, und beschreiben einen Übergang von A nach B oder umgekehrt; es gilt $|h_{12}| = t \cdot \sqrt{3 + f(\vec{k})}$. Die Hauptdiagonalelemente

$$(2.7) \quad h_{11} = h_{22} = -\sum_{j=1}^6 t' \cdot \exp\left(-i \vec{k} \cdot \vec{a}_j\right) = -t' \cdot \sum_{j=1}^3 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_j) = -t' \cdot f(\vec{k})$$

hingegen beziehen sich auf einen Wechsel des Elektrons von einem Atom zu einem seiner *übernächsten* Nachbarn, erreichbar durch einen der folgenden sechs Vektoren

$$(2.8) \quad \vec{a}_{1,2} = \vec{\delta}_{1,2} - \vec{\delta}_3 = \frac{a}{2} \cdot (3, \pm\sqrt{3})$$

$$(2.9) \quad \vec{a}_3 = \vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_1 = -\sqrt{3}a \cdot (0, 1)$$

$$(2.10) \quad \vec{a}_{4,5,6} = -\vec{a}_{1,2,3}$$

und beschreiben folglich Übergänge innerhalb ein- und desselben Gitters.

Die Formeln (2.1) und (2.2) geben also die Energie der Elektronen E in Abhängigkeit von ihrem 2D-Wellenzahlvektor $\vec{k} = (k_x, k_y)$ an, und zwar gilt das untere Vorzeichen für die Elektronen des Valenzbandes, das obere dagegen für die Elektronen im Leitungsband (ihrer höheren Energie wegen werden letztere zuweilen auch als π^* -Elektronen bezeichnet). Bei undotiertem Graphen treffen sich beide Bänder bei $E = 0$ in den Dirac-Punkten $\vec{K} = \frac{2\pi}{3a} \cdot \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$ und $\vec{K}' = \frac{2\pi}{3a} \cdot \left(1, \frac{-1}{\sqrt{3}}\right)$. Nur diese beiden sind zueinander nicht äquivalent, während alle anderen durch reziproke Gittervektoren erreichbar sind. Demzufolge wäre

$$(2.11) \quad \vec{K}' = -\vec{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \cdot (0, 1)$$

eine gleichwertige (alternative) Auswahl.

Da das p_z -Orbital mit nur einem Elektron lediglich halb gefüllt ist, gilt Entsprechendes auch für die aus ihm hervorgehenden beiden π -Bänder, was wegen deren Symmetrie dazu führt, dass das untere (Valenz-)Band vollständig gefüllt ist, während das obere (Leitungs-)Band vollkommen leer bleibt. Somit ist (undotiertes)

Graphen ein Halbleiter ohne Energielücke, bei welchem die Anregungen mit – auch infinitesimal – kleiner Energie in der Nähe der erwähnten K -Punkte liegen. Folglich bietet sich eine Entwicklung der Energiedispersion (2.1) in deren Nähe, also nach

$$(2.12) \quad \vec{k} = \vec{K} + \vec{q}$$

bzw.

$$(2.13) \quad \vec{k} = \vec{K}' - \vec{q}$$

mit

$$(2.14) \quad |\vec{q}| \ll |\vec{K}| = |\vec{K}'|$$

an. Das Ergebnis (bis zur zweiten Ordnung einschließlich) lautet

$$(2.15) \quad E_{\pm}(\vec{q}) = 3t' \pm \hbar v_F \cdot |\vec{q}| - \frac{3}{8} (6t' \pm t \cdot \sin(3\theta_{\vec{q}})) a^2 \cdot |\vec{q}|^2$$

mit dem Winkel

$$(2.16) \quad \theta_{\vec{q}} = \arctan \frac{q_y}{q_x}$$

der Bewegung im Impulsraum und der Fermi-Geschwindigkeit

$$(2.17) \quad v_F := \frac{3ta}{2\hbar} \simeq \frac{1}{300} \cdot c$$

(\hbar ist das durch 2π dividierte Planck'sche Wirkungsquantum und c die Lichtgeschwindigkeit).

In *erster* Näherung ergibt sich also eine lineare Energiebeziehung

$$(2.18) \quad E_{\pm}(\vec{q}) = \pm \hbar v_F \cdot |\vec{q}|,$$

an der auch das Hinzutreten der sechs übernächsten Nachbarn mit ihrer jeweiligen Wechselwirkungsenergie t' nichts Wesentliches mehr zu ändern vermag, da lediglich der beliebig wählbare Energienullpunkt (das Fermi-Niveau) um den Wert $3t'$ verschoben wird. Auch die Einbeziehung weiterer Nachbaratome, so kann füglich angenommen werden, mit ihren nochmals schwächeren Wechselwirkungen wird an (2.18) endlich keine Änderung zustandebringen. In diesem Bereich hängt also das Ergebnis der Bandstrukturberechnung weniger von der Anzahl einbezogener Parameter ab, ebensowenig wie vom aufgegebenen Grade an Genauigkeit – ja, wahrscheinlich nicht einmal von der Methode selbst – als vielmehr allein von der (hier gewissermaßen vorgegebenen) Geometrie des hexagonalen Gitters, und somit letztlich von der Fähigkeit des Kohlenstoffs zu einer sp^2 -Hybridisierung.

Folglich kann, zumal alle ausgeführten Experimente damit in Einklang stehen, konstatiert werden, dass die lineare Beziehung (2.18) im Bereiche kleiner Energien, denn die Bedingung (2.14) ist äquivalent zu

$$(2.19) \quad |E| \ll t,$$

den tatsächlichen Sachverhalt korrekt wiedergibt. Erst bei höheren Energien bzw. Quasiimpulsen \vec{q} geht, da der dritte (vorletzte) Term in (2.15) stets negativ ist, durch Wechselwirkung mit den übernächsten Nachbaratomen in zweiter Ordnung die Symmetrie bezüglich $\pm E$ verloren. Zugleich beginnt auch die Isotropie zu verschwinden, denn mit dem vierten Term, also bedingt durch die direkten Nachbarn, tritt auch eine Abhängigkeit von der Richtung (2.16) auf, welche als „trigonales Warping“ bezeichnet wird. Da der Energieparameter t in (2.19) mit rund 3 eV [31]

sehr groß ist – dieser Umstand ermöglicht unter anderem die Messung des Quanten-Hall-Effektes bei Raumtemperatur [32] –, können, falls entsprechend hohe Energien nicht zur Verfügung stehen, die zuletzt angesprochenen Effekte aus der Betrachtung ausgenommen werden, sodass die lineare bzw. linearisierte Dispersionsbeziehung (2.18) für das Folgende vollauf genügt.

Damit werden die Elektronen im Graphen zu masselosen Quasiteilchen, welche einem linearen Energie-Impuls-Zusammenhange folgen, wie er von ultrarelativistischen Partikeln, beispielsweise den Photonen $E(\vec{p}) = c \cdot |\vec{p}|$, her geläufig ist – nur dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit entsprechend (2.17) deutlich herunterskaliert worden ist. Ein solches Verhalten der Teilchen (und bei negativem Energie-Vorzeichen auch der Antiteilchen, also der Lochzustände im Valenzband) wird, wenn ihr Spin $\frac{1}{2}\hbar$ beträgt, in der relativistischen Quantenmechanik durch die Dirac-Gleichung beschrieben. Der zugehörige Hamilton-Operator lautet für ein freies Teilchen der Masse m mit der Lichtgeschwindigkeit c und dem Impulsoperator $\vec{p} = -i\hbar\nabla$ in der Schrödinger-Form

$$(2.20) \quad H_0^D = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta \cdot mc^2$$

und wirkt auf eine grundsätzlich vierkomponentige Wellenfunktion. Wählt man die Dirac-Matrizen beispielsweise in Standarddarstellung $\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$ und $\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$, wobei I die 2D-Einheitsmatrix und $\vec{\sigma}$ die formal als Vektor zusammengefassten Pauli-Matrizen bezeichnet, so ergibt sich, dass für den Fall $m = 0$ die beiden unteren Komponenten der Wellenfunktion als identisch mit den beiden oberen gewählt werden können und es somit letztlich nur einer lediglich zweikomponentigen Wellenfunktion bedarf. Diese beiden Komponenten beziehen sich allerdings im Falle des Graphen nicht, wie sonst üblich, auf den (physikalischen) Spin des Teilchens als seine beiden Zustandsmöglichkeiten, sondern vielmehr auf die beiden Untergitter der nichtäquivalenten [siehe Abb. 2.1a] Atome A und B, denen es im ursprünglichen Orbitale zuzuordnen war. Da der reale Spin des Elektrons bzw. des aus ihm hervorgehenden Quasiteilchens – er kommt erst später auf mehr indirekte Art wieder ins Spiel – von wesentlich geringerer Relevanz ist als diese Zuordnung zu den Untergittern, führt man analog zur Kernphysik das Konzept des Pseudospins zur Unterscheidung der Untergitter A und B ein. Von nun an bezeichne $\vec{\sigma}$ stets den Pseudospin, und mit der herunterskalierten Geschwindigkeit (2.17) lautet der Hamilton-Operator für ein Teilchen in der Nähe des K -Punktes – wegen seiner Masselosigkeit wird es auch als Dirac-Weyl-Teilchen bezeichnet – mithin

$$(2.21) \quad H_0^K = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p} = -i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \nabla = -i\hbar v_F (\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y).$$

(Bei einer Beschränkung auf die Ebene des Graphen entfällt natürlich die z -Komponente des Impulsoperators und damit auch die zugehörige Spinmatrix.)

Der Hamilton-Operator (2.21) bezieht sich, das deutet der obere Index an, nur auf den einen der beiden K -Punkte. Was kann über den anderen Punkt, also K' , ausgesagt werden? Da die linearisierte Energiedispersion (2.18) nur vom Betrage des Wellenzahlvektors \vec{q} abhängt, erscheint die Wahl des mit ihm verbundenen Vorzeichens in (2.13) zunächst müßig, wenn auch im Sinne einer Definition statthaft. Unter Zugrundelegung der K -Punkte in der alternativen Darstellung (2.11) erkennt man aber bei Betrachtung der aus lauter Kosinus-Termen bestehenden und daher geraden Funktion (2.2), dass die Wahl der Vorzeichen in (2.12) und (2.13)

gegensätzlich zu treffen ist, damit \vec{q} als Abweichung sowohl von K als auch von K' in beiden Fällen zum selben Ergebnis führt und damit den gleichen Sachverhalt beschreibt. Die Tatsache, dass \vec{q} einen Vorzeichenwechsel erleidet, wenn man von K nach K' geht, bedeutet mithin, dass beide durch eine Inversion verbunden sind: Jedoch handelt es sich, da in diesem Falle auch die Untergitter A und B gegeneinander vertauscht würden, um keine Raumspiegelung, sondern um eine Umkehrung der Zeit, die in den K' -Punkten sozusagen rückwärts läuft. Bekanntlich wird die Zeitumkehr durch eine komplexe Konjugation bewerkstelligt; da σ_x reell, σ_y hingegen rein imaginär ist, ergibt sich für K'

$$(2.22) \quad H_0^{K'} = +i\hbar v_F (\sigma_x \partial_x - \sigma_y \partial_y).$$

Bei niedrigen Energien kann man beide K -Punkte und die sie umschließenden Dirac-Kegel – diese ergeben sich anschaulich, wenn man die Dispersion (2.18) mit der Energie als dritter Achse über \vec{q} aus (2.12) bzw. (2.13) aufträgt – getrennt betrachten, denn obwohl beide zur selben Energie $E = 0$ gehören, sind sie doch durch eine beträchtliche Barriere (der Größenordnung t) getrennt. Eine Streuung von K nach K' (oder umgekehrt) findet somit mangels ausreichender Energie im Allgemeinen nicht statt. Um diese Sichtweise mit Bezug auf die beiden K -Punkte, die ja im reziproken Raume definiert sind, zu ergänzen, sei gesagt, dass im Vergleich zur Gitterkonstanten hinreichend glatte Potentiale in der Fourier-Transformierten keine Komponenten bei genügend großen Wellenzahlvektoren besitzen, um eine solche Streuung zu ermöglichen. Als Bedingung mag

$$(2.23) \quad \lambda_F \gg l_V \gg a$$

angegeben werden, wobei die Länge, auf der das Potential sich ändert, wie folgt definiert sei: $l_V := \left| \frac{V(r)}{\nabla V(r)} \right|$ (die später der rechnerischen Vereinfachung halber oft angenommenen Rechteckpotentiale lassen sich in dieser Form nicht wirklich realisieren). $\lambda_F = \frac{2\pi}{q_F}$ bezeichnet die Fermiwellenlänge. Diese ist um so größer, je kleiner der Fermi-Wellenzahlvektor q_F , also je geringer die Abweichung vom Neutralitätspunkt ist, denn letztlich stellt q_F die Grenze der Auffüllung des Leitungsbandes mit Teilchen (bzw. des Valenzbandes mit Löchern) dar. Damit wird auch eine Vielteilchen-Wechselwirkung immer weniger wahrscheinlich, und gleichzeitig steigt mit abnehmendem q_F obendrein noch die Exaktheit der Linearisierung (2.18) weiter an, womit die Symmetrie zwischen Leitungs- und Valenzband eine gewissermaßen eingebaute ist. Ohne die Berücksichtigung subtilerer Effekte wie der Spin-Bahn-Kopplung (siehe dazu Abschnitt 2.5) ist auch die fehlende Energielücke, die mit $m = 0$ korrespondiert, keine zufällige, wie dies bei Halbleitern, insbesondere ternären und quaternären Verbindungshalbleitern genau eingestellter Zusammensetzung gelegentlich vorkommen kann, sondern zwangsläufig und damit exakt Null.

Insgesamt lässt sich also zusammenfassend festhalten, dass bei nicht allzu hohen Energien lediglich die Bereiche in der Nähe der beiden K -Punkte, also die Dirac-Kegel (2.18) relevant sind, und diese werden durch zwei entkoppelte, relativistische Dirac-Weyl-Hamilton-Operatoren masseloser Quasiteilchen mit Pauli-Matrizen im 2D-Pseudospin-Raum $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ beschrieben, bei denen es sich um gleichwertige, wenn auch nicht identische Kopien [(2.21) bzw. (2.22)] handelt. Wegen der sie verbindenden Zeitumkehrsymmetrie ist es, wenn diese sonst nicht gebrochen wird, in der Regel ausreichend, nur einen dieser Kegel – vom Leitungsband aus gesehen

handelt es sich um Täler („valleys“) – zu betrachten und den anderen durch eine Symmetriebeziehung zu erledigen.

Neben diese so bezeichnete Valley-Entartung tritt oft noch jene durch den (echten) Spin hinzu – wenigstens solange, wie Spin-Bahn-Kopplung und Zeeman-Effekt nicht in Betracht gezogen werden –, und durch die jeweils doppelte Besetzung der Zustände ergibt sich ein Gesamt-Entartungsfaktor 4, wie er für den QHE im Graphen charakteristisch ist ([5] und [6]). In diesem Falle spielen in der Wellenfunktion lediglich die beiden Untergitter noch eine Rolle, und statt der eigentlich benötigten acht Komponenten genügt ein 2er-Spinor. So lautet beispielsweise die (normierte) Lösung zum Operator (2.21) für freie Quasiteilchen in der Impulsdarstellung

$$(2.24) \quad \Psi_{\pm}^K(\vec{q}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} \exp\left[-\frac{i}{2}\theta_{\vec{q}}\right] \\ \pm \exp\left[\frac{i}{2}\theta_{\vec{q}}\right] \end{pmatrix},$$

wobei das obere Vorzeichen (plus) für die Teilchen (im engeren Sinne) und das untere (minus) für die Lochzustände gilt und damit als Energie-, aber auch als Ladungsvorzeichen etikettiert werden kann. Dessen formale Umpolung wird ersichtlich durch die Matrix σ_z bewirkt, die in Anwendung auf (2.24) zu

$$(2.25) \quad \sigma_z \Psi_{\pm} = -\Psi_{\mp}$$

führt und für beide K -Punkte gleichermaßen gilt. Gleichzeitiges Anwenden auf den Hamilton-Operator (2.21) [bzw. (2.22)] führt zu

$$(2.26) \quad \sigma_z H_0 \sigma_z = -H_0,$$

was sich kurz als Antikommutator-Relation $[H_0, \sigma_z]_{\pm} = 0$ schreiben lässt. Die als Ladungskonjugation bezeichnete Transformation [(2.25) und (2.26)] ist als mathematischer Ausdruck einer perfekten Symmetrie zwischen Elektronen- und Lochzuständen anzusehen, wie er bei üblichen Halbleitern nicht vorhanden ist: Während im Graphen der Vorfaktor in (2.18) für beide Bänder vom selben Betrage ist, der Anstieg der Energie mit dem Wellenzahlvektor also in stets gleicher Weise erfolgt, ist bei den anderen Halbleitermaterialien die Bandkrümmung in den Kanten des Valenz- und des Leitungsbandes und damit die sie beschreibende effektive Masse in den beiden Bändern nicht bloß voneinander verschieden, sondern gemeinhin auch noch anisotrop. Im Graphen treten also nicht nur – wie sonst üblich – Elektronen- und Lochzustände als voneinander getrennte Realisationen auf, sondern durch die in den Hamilton-Operator gleichsam implementierte Symmetrie sind diese einander völlig äquivalent und über die unitäre Transformation (2.25) im Dirac-Spinor (2.24) sogar miteinander verschränkt.

Es soll noch angemerkt werden, dass, wie aus (2.24) leicht entnehmbar ist, eine volle Drehung um 360° einen Vorzeichenwechsel der gesamten Wellenfunktion zur Folge hat, was einer zusätzlichen Phase π (auch als $\frac{1}{2}$ bezeichnet) entspricht. In [6] wird dieser Wert der sogenannten Berry-Phase als (ein) Indiz für die in der Nähe des Dirac-Punktes verschwindende Masse der Quasiteilchen gewertet.

2.3. Chiralität und Klein-Tunneln

Ergänzend zu den bereits dargelegten Symmetriebetrachtungen soll noch eine weitere Symmetrieoperation geschildert werden, die zwar zunächst weniger offensichtlich als die bisher betrachteten erscheinen mag, dafür jedoch ein Verständnis eröffnet für das auch im Zusammenhang mit dem Graphen, und zwar dort in besonderer Schärfe auftretende Klein-Tunneln. In Analogie zum Fall

masseloser Teilchen mit dem Spin $\frac{1}{2}$, als deren Verkörperung in wenigstens erster Näherung die Neutrinos angesehen werden können (vgl. [33]), werde, nahegelegt durch die Form des Hamilton-Operators (2.21), der folgende Operator für die Helizität als Projektion des Pseudospins auf die Impulsrichtung definiert:

$$(2.27) \quad \hat{h}_{\vec{q}} := \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{q}}{|\vec{q}|} = \sigma_x \cos \theta_{\vec{q}} + \sigma_y \sin \theta_{\vec{q}} = \begin{pmatrix} 0 & \exp[-i\theta_{\vec{q}}] \\ \exp[i\theta_{\vec{q}}] & 0 \end{pmatrix}$$

Bei dessen Anwendung auf den Spinor (2.24) ergeben sich zufolge $\hat{h}_{\vec{q}} \Psi_{\pm}^K(\vec{q}) = \pm \Psi_{\pm}^K(\vec{q})$ die beiden Eigenwerte ± 1 für Elektronen- bzw. Lochzustände; im anderen K -Punkt ist die Zuordnung aufgrund der Zeitumkehr ($-\vec{q}$ statt \vec{q}) genau umgekehrt. Dies bedeutet, dass die Helizität nur in der Nähe jeweils eines K -Punktes, also für kleine Energien, eine gute Quantenzahl darstellt.

In Analogie zum (realen) Spin eines Teilchens und seiner anschaulichen Deutung als dessen Rotation, durch die sich bei gleichzeitigem Fortschreiten in Bewegungsrichtung eine Links- oder Rechtsschraube ergibt, spricht man auch von der Spiralität bzw. Chiralität, und zwar sowohl für die Erscheinung selbst als auch in Bezug auf deren Eigenwerte. (Zuweilen wird, den Werten der Spinprojektion entsprechend, auch ein zusätzlicher Faktor $\frac{1}{2}$ in die Definition miteingefügt.)

Unter Zugrundelegung der linearisierten Dispersion (2.18), die einen Wechsel von K nach K' ausschließt, ist die Helizität auch eine recht streng verwirklichte Erhaltungsgröße, denn ein Umklappen des Pseudospins bedeutet letzten Endes einen Übergang zwischen den beiden Untergittern A und B, den ein Störpotential jedoch nur dann auszulösen vermag, wenn es in der Lage ist, auf beide in unterschiedlicher Weise einzuwirken. Dazu aber müsste die Längenskala, auf der sich dieses Potential veränderte, von der gleichen Größenordnung sein wie der Abstand der Atome a im Gitter, und die Bedingung (2.23) wäre dann verletzt.

Um den eingangs erwähnten Zusammenhang der Helizität mit dem Klein-Tunneln zu erhellen, soll Letzteres zunächst eine etwas ausführlichere Darlegung erfahren.

Vom Standpunkte der klassischen Mechanik aus betrachtet erscheint bereits der gewöhnliche Tunneleffekt insofern unverständlich, als dass sich hierbei ein Teilchen, zumindest vorübergehend, in einem Raumbereiche aufzuhalten und diesen zu durchqueren vermag, in welchem seine Gesamtenergie die rein potentielle unterschreitet. Durch die Betrachtungsweise aus dem Blickwinkel der Quantenmechanik mit ihren zahlreichen, auch praktisch nutz- oder beobachtbaren Anwendungsbeispielen wie Feldemission oder Alphazerfall – und nicht zuletzt auch dauernde Gewöhnung – erscheint dieser gängige Tunneleffekt als mittlerweile vertraut. Ein Paradoxon, das heißt ein scheinbarer Widerspruch, tritt nur dann auf, wenn man sich einengend auf die klassische Mechanik als Verständnisgrundlage beschränkt und Aspekte der Wellenmechanik außer Acht lässt. Durch Gewöhnung ebenfalls vertraut erscheint auch der Aspekt, dass die Wahrscheinlichkeit für einen derartigen Vorgang im Allgemeinen doch recht klein ist und mit zunehmender Höhe und / oder Breite des zu durchtunnelnden Potentialwalles exponentiell noch weiter abnimmt.

Unter dieser Prämisse müssen die Ergebnisse einer von Oskar Klein im Jahre 1929 veröffentlichten und anschließend viel und zum Teil kontrovers diskutierten Arbeit [10] in der Tat paradox erscheinen, behauptet doch Klein nichts weniger, als dass Elektronen einen Potentialsprung gerade dann besonders gut, im Extremfall sogar mit am Sicherheit grenzender Wahrscheinlichkeit, zu überwinden

vermögen, wenn dieser besonders hoch ist. Trotz zahlreicher Verfeinerungen und ergänzender Betrachtungen durch die im Laufe nachfolgender Jahrzehnte erweiterten Standpunkte hat sich an der Grundaussage, dass nämlich der Potentialsprung $eU > 2m_e c^2 \sim 1 \text{ MeV}$ eine gewisse Mindesthöhe (der angegebene Wert bezieht sich auf Elektronen, deren Ladung und Ruhmasse mit $-e$ bzw. m_e bezeichnet werde) aufweisen muss, um ein effektives Tunneln zu veranlassen, ebensowenig etwas geändert wie an ihrer Deutung: Bei der angenommenen Höhe der Barriere wird sich das Teilchen unterhalb derselben im Energiekontinuum negativer Zustände befinden, welche als „erlaubte“ Zustände seine Ausbreitung ebenso gestatten wie die Zustände mit positiver Energie. Trotzdem handelt es sich aus Gründen der Stetigkeit (vgl. [34]) nicht um Lochzustände, sondern immer noch um die eines Teilchens, wenn auch mit einer „negativen Frequenz“ (Zeitabhängigkeit). Hier kündigt sich – bei geeignetem Potentialverlauf – die Möglichkeit der Paarerzeugung an, und eine Einteilchenbeschreibung wird dann mehr und mehr inadäquat. Paradox erscheint dieser Sachverhalt auch hier wiederum nur dann, wenn die Realität mit einer reduzierten Beschreibung erfasst werden soll, welche künstlich einen Teil der Wirklichkeit ausblendet. In der klassischen Mechanik waren das die Welleneigenschaften gemäß der Quantenmechanik, und im Zusammenhang mit der Einteilchenbeschreibung sind es hier die durch die Relativitätstheorie geforderten Zustände negativer Energie; in beiden Fällen wird also ein bestimmter Dualismus ignoriert.

Bezüglich des Potentialverlaufs ersetzte Fritz Sauter [35] den abrupten Anstieg durch einen linearen (Rampe statt Stufe) und gelangt durch eine Grenzbetrachtung wieder zu dem Ergebnis $eU > 2m_e c^2$, aber auch zu der Schlussfolgerung, dass der Potentialanstieg auf einer vergleichsweise kurzen Längenskala von der Größenordnung der reduzierten Compton-Wellenlänge $\frac{\hbar}{m_e c}$ zu erfolgen hat, damit die Tunnelwahrscheinlichkeit eben *nicht* exponentiell absinkt, wie es mit der sonstigen Erfahrung (und dem anderen Grenzfall) konform ginge. Die sich hierbei ergebende kritische Feldstärke ist allerdings enorm hoch und liegt bei etwa $\frac{m_e^2 c^3}{e\hbar} \sim 10^{18} \text{ V/m}$, was experimentelle Realisierungen jedenfalls vorläufig vereiteln dürfte. Superschwere Kerne mit Kernladungszahlen $Z > 137$ bieten sich allerdings als hypothetischer Ausweg an.

Beim (idealen) Graphen ist nun die Situation durch zwei Umstände besonders interessant: Zum einen ist die Energielücke genau Null, so dass, um den Wechsel eines Teilchens in das negative Energiekontinuum zu bewerkstelligen, ein nahezu beliebig niedriges (positives) Potential dazu ausreicht – es genügt vollauf, dass Letzteres die kinetische Energie übersteigt; ein höheres Potential ist aber dem Tunneleffekt keineswegs abträglich. Zum anderen kommt noch der chirale Charakter der Dirac-Weyl-Teilchen, der sich im Vorhandensein der $\vec{\sigma}$ -Matrix in (2.21) niederschlägt, und die damit verbundene Erhaltung der Helizität nicht bloß unterstreichend (im Sinne einer besseren theoretischen Verständlichkeit) sondern sogar zwingend hinzu. Um diese letzte Behauptung zu illustrieren, sei auf die Untersuchung einer rechteckigen Barriere der Höhe V_0 verwiesen, die in [11] angestellt wird. Unter der Voraussetzung $|V_0| \gg |E|$ ergibt sich für die Tunnelwahrscheinlichkeit T in Abhängigkeit vom Einfallswinkel ϕ , der Barrierenbreite D und der Komponente des Wellenzahlvektors q_x (alles auf die x-Richtung bezogen; quer dazu sei die Barriere ohne Begrenzung)

$$(2.28) \quad T = \frac{\cos^2 \phi}{1 - \cos^2(q_x D) \cdot \sin^2 \phi}$$

Hieraus lassen sich zwei Schlussfolgerungen ziehen, die ihre Gültigkeit auch ohne die oben gemachte, vereinfachende Näherung hoher Potentiale beibehalten, nämlich über diejenigen Möglichkeiten, wann die Barriere mit $T = 1$ vollkommen durchlässig wird: Es sind dies erstens eine Art Resonanzbedingung

$$(2.29) \quad q_x D = \pi N$$

mit einer ganzen Zahl N halber Wellenlängen, die auf die (Breite der) Barriere passen müssen – wegen der darin implizit enthaltenen Richtungsabhängigkeit geht das allerdings nur bei ganz bestimmten Winkeln, die auch von den konkreten Werten der übrigen Parameter abhängen. Die zweite Möglichkeit besteht dagegen immer in gleicher Weise, nämlich für $\phi = 0$, d.h. senkrechten Einfall, und zeigt die Verbindung zur Helizitätserhaltung besonders deutlich auf. In diesem Falle nämlich gibt es keine Impulskomponente entlang der Grenze, die erhalten bleiben könnte, und eine Reflexion würde eine vollständige Richtungsumkehr und damit einen Wechsel der Helizität bedeuten. Da dieser mangels geeigneter Streuzentren aber nicht stattzufinden vermag, muss sich das Teilchen weiter in seiner ursprünglichen Richtung fortbewegen.

Besonders interessant in dieser Hinsicht ist der ebenfalls in [11] angestellte Vergleich zu einem üblichen Halbleiter, der keine Bandlücke, aber eben auch keine chiralen Ladungsträger aufweist: Letztere durchtunneln die Barriere auch bei senkrechtem Einfall nur dann mit Sicherheit, wenn *zusätzlich* die Resonanzbedingung (2.29) erfüllt ist. Durch diese Gegenüberstellung wird offenbar, dass für das ungehinderte Tunneln der Teilchen als ausreichendes Kriterium nicht allein die fehlende Energielücke genügt, sondern zusätzlich ihre *Chiralität* in der Rolle einer Erhaltungsgröße die unabdingbare Voraussetzung ist.

Die Tatsache, dass die Dirac-Weyl-Teilchen im Graphen sowohl beliebig hohe als auch beliebig ausgedehnte Potentialbarrieren zu durchtunneln in der Lage sind, eröffnet einerseits einen interessanten Zugang zum experimentellen Nachweis des Klein-Paradoxons – siehe zum Beispiel [12] –, gibt aber andererseits auch Anlass zur Besorgnis, was seine Verwendung als Material in zukünftigen Bauelementen der Halbleiterelektronik anbelangt. Diese wären nämlich, wenn sich keine andere Abhilfe finden ließe, um eine unerwünschte Bewegung der Ladungsträger abzuschneiden, stets mit einem entsprechenden Leckstrom behaftet. Von seiner Größenordnung her durch den Quantenwiderstand R_Q bestimmt (selbst im Dirac-Punkt mit seiner minimalen Leitfähigkeit ergibt sich für den aus vielen Proben [5] ermittelten Wert des spezifischen Widerstandes $\rho_{max} = \frac{1}{4}R_Q = 6,45 \text{ k}\Omega$) würde die damit verbundene Stromwärme, falls sie dem Element denn überhaupt zuträglich wäre, doch für erhebliche thermische und ökonomische Probleme Anlass bieten.

Es soll deshalb in den nachfolgenden Abschnitten dieses Kapitels versucht werden, diejenigen Methoden zu betrachten, die, ohne die im einführenden Kapitel aufgestellten Limitierungen zu umgehen, geeignet erscheinen, die Bewegung der Ladungsträger auf die jeweils dafür vorgesehenen Bereiche zu begrenzen. Während im unmittelbar folgenden Abschnitt 2.4 der Einfluss eines echten Magnetfeldes studiert wird, beziehen sich die Untersuchungen des das Kapitel abschließenden Abschnittes 2.7 auf den Einfluss sogenannter Pseudo-Magnetfelder, die, in ihrer Wirkung den echten Magnetfeldern nicht unähnlich, aber im Gegensatz zu diesen nicht aus elektrischen Strömen, sondern aus mechanischen Verzerrungen resultieren. Die dazwischenliegenden Abschnitte 2.5 und 2.6 sind hingegen den Erscheinungen und Möglichkeiten der Spin-Bahn-Kopplung gewidmet.

2.4. Die Wirkung magnetischer Felder

Die Idee, einen Einschluss geladener Teilchen mittels magnetischer Felder zu versuchen, die diese über die Lorentz-Kraft gemäß den klassischen Vorstellungen auf eine Kreisbahn zwingt, ist naheliegend, erscheint jedoch im Lichte der beim Klein-Paradoxon mit den elektrischen Feldern gemachten Erfahrungen nicht als unbedingt zwangsläufig. Auch die beim QHE vorliegenden diskreten Energieniveaus als Ausdruck gebundener Zustände wirken hier lediglich auf den ersten Blick überzeugend, wird doch gerade ihr Auftreten in einer häufig gebrauchten Veranschaulichung [36] mittels Randkanälen erklärt, die, von Kontakt zu Kontakt fortschreitend, letztlich die ganze Probe umschließen.

Um hier Klarheit zu gewinnen, sei zunächst die Wirkung eines durch sein Vektorpotential \vec{A} beschriebenen Magnetfeldes $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ untersucht, das an der Ladung $-e$ des Teilchens angreift; bekanntlich berücksichtigt man dies durch eine auch als minimale Kopplung bezeichnete Substitution des Teilchenimpulses \vec{p} durch

$$(2.30) \quad \vec{p} \rightarrow \vec{p} + \frac{e}{c} \cdot \vec{A}$$

Noch bevor diese in den Hamilton-Operator implementiert wird, soll mit einer einfachen Überlegung gezeigt werden, wie sich bereits hieraus die Möglichkeit einer wirksamen magnetischen Barriere herausschält. Betrachten wir also mit [19] einen Bereich der Breite D , wieder wie zuvor in x -Richtung gemessen und in y -Richtung unendlich ausgedehnt, diesmal aber mit einem Magnetfeld der Stärke B behaftet, das in z -Richtung zeigt, also senkrecht zur Schicht steht. Im Sinne der Substitution (2.30) ergeben sich die y -Komponenten – die anderen werden hier nicht benötigt – des verallgemeinerten Impulses unmittelbar vor (ungestrichene) und nach der Barriere (gestrichene Größen) zu

$$(2.31) \quad \begin{aligned} P_y &\equiv \hbar k \sin \phi = p_y - eBD/2c \\ P'_y &\equiv \hbar k \sin \phi' = p'_y + eBD/2c. \end{aligned}$$

Hierin bezeichnen ϕ und ϕ' die jeweilige Ausbreitungsrichtung des Teilchens; und über k , den (invarianten) Betrag des Wellenzahlvektors, ist die vom Magnetfeld unbeeinflusste Energie $E = v_F \hbar k$ festgelegt¹. Dies ist insbesondere die Fermi-Energie, für eingeschossene Teilchen kann sie aber auch höher sein. Die symmetrische Aufteilung des vom Vektorpotential stammenden Beitrags ist naheliegend, auf das Ergebnis jedoch ebenso ohne Auswirkung wie die Bezeichnung der Koordinaten für die Grenzen der Barriere. Hingegen wäre es nicht zweckmäßig, die Eichung des Vektorpotentials so vorzunehmen, dass seine Ortsabhängigkeit ganz oder teilweise auf die y -Koordinate umgewälzt wird. Abgesehen davon, dass sich durch ein $A_x(y) \neq 0$ (bzw. $\neq \text{const.}$) unlösbare Stetigkeitsprobleme ergäben, würde eine derartige Wahl auch nicht dem Sachverhalt gerecht, dass sich in der y -Richtung nichts tut. Eben dieser Umstand bedeutet aber, dass p_y eine zyklische Koordinate ist und demzufolge erhalten bleibt: $p_y = p'_y$.

¹In dieser Arbeit erfahren die Buchstaben p , k und q eine im Grunde genommen wesensgleiche Verwendung. Lediglich subtilere Bedeutungsunterschiede sollen durch sie eine gewisse Differenzierung erfahren. So wird zum Beispiel q an Stelle von k benutzt, wenn die Verschiebung zu den Fermi-Punkten [in Abschnitt 2.2 und dann wieder in Abschnitt 2.7] oder sonst ein komplizierterer Zusammenhang [wie in Formel (3.71)] hervorgehoben werden sollen. Dagegen wird durch p stärker der Impulsaspekt in den Vordergrund gerückt. Letztere Unterscheidung zu k wird aber durch die spätere Setzung $\hbar := 1$ auch bereits wieder verwischt.

Ungeachtet dessen, wie die Wellenfunktion innerhalb der Barriere selbst aussieht (diese findet sich in [19] als dortige Gleichung 10), folgt daraus die Bedingung für die Durchlässigkeit der Barriere zu

$$(2.32) \quad 0 < \frac{eBD}{c\hbar k} = \sin \phi' - \sin \phi < 2.$$

Die rechte Begrenzung wurde dabei als die größtmögliche Differenz zweier vorzeichenbehafteter Sinuswerte angefügt; die linke (statt -2) hingegen ergibt sich bei der gewählten Geometrie und Polarität des Magnetfeldes aus der für Elektronen zuständigen Linken-Hand-Regel, derzufolge die Ablenkung derselben nur in einer Linkskurve geschehen und somit der Winkel lediglich größer werden kann. In einem klassischen Bilde gesprochen wirft also die Barriere all diejenigen Teilchen zurück, deren Energie $E < \frac{v_F eBD}{2c}$ bezogen auf die Breite der Barriere und das dort herrschende Magnetfeld nicht groß genug ist, sie zu überwinden. Um aber weitere Einzelheiten, im obigen Beispiel etwa die Tunnelwahrscheinlichkeiten für die „erlaubten“ Richtungen zu bestimmen, bedarf es eines quantenmechanischen Ansatzes, und dieser beruht darauf, dass die Substitution (2.30) im chiralen Dirac-Hamilton-Operator (2.21) ausgeführt wird, womit sich dann der Operator

$$(2.33) \quad H_{\vec{B}} = v_F \vec{\sigma} \cdot \left(-i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \cdot \vec{A} \right)$$

ergibt, der, wie ausdrücklich betont sei, immer noch auf eine zweikomponentige Wellenfunktion

$$(2.34) \quad \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix}$$

anzuwenden ist. Außer im Sonderfall $E = 0$ sind in der Eigenwertgleichung

$$(2.35) \quad H_{\vec{B}} \Psi = E \cdot \Psi$$

beide Komponenten miteinander verkoppelt, was sich aber durch nochmalige Anwendung von (2.33) auf Letztere beiseite schieben lässt.

Schreibt man nämlich $H_{\vec{B}}^2 \Psi = E^2 \cdot \Psi$ wie folgt aus:

$$(2.36) \quad v_F^2 \cdot \left[\left(-i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \cdot \vec{A} \right)^2 + \frac{e\hbar}{c} \cdot \sigma_z \cdot B_z \right] \Psi = E^2 \cdot \Psi,$$

so erkennt man, dass beide Komponenten aus (2.34) einer Schrödinger-ähnlichen Differentialgleichung unterliegen und sich dabei nur durch das Vorzeichen des letzten, Zeeman-artigen Termes auf der linken Seite unterscheiden, der als Potential gedeutet werden kann. Die Bezeichnung „Zeeman-artig“ wurde gewählt, um darauf hinzuweisen, dass sein Ursprung nicht wie gewohnt im echten Spin der Teilchen zu suchen ist, sondern den Funktionen Ψ_A und Ψ_B gemäß im Pseudospin der Untergitter liegt. Der (echte) Spin hingegen wurde bis jetzt gänzlich vernachlässigt, und dass dies, energetisch gesehen, wenigstens in erster Näherung auch vertretbar erscheint, erhellt sich aus der numerischen Abschätzung am Ende dieses Abschnitts.

In diesem Zusammenhang erklärt sich auch die Bezeichnung orbitales Magnetfeld für die Komponente B_z in besagtem Term der Gl. (2.36), da damit eine andere Wirkung des Feldes auf die Elektronen, als sie (formal *auch* über dessen Vektorpotential) in ihrer Bahnbewegung zu beeinflussen, nicht mehr gegeben ist. Da sich diese zwangsläufig auf die x-y-Ebene des Graphen beschränkt, bleiben weitere Komponenten des Magnetfeldes, sollte dieses nicht senkrecht zu jenem orientiert sein,

folglich ohne Einfluss; mathematisch korrespondiert dies damit, dass in der $\vec{\sigma}$ -Matrix – und demzufolge auch im Nabla-Operator sowie im Vektorpotential \vec{A} – der Gleichung (2.33) lediglich die Komponenten für x und y verstanden sind.

Als der Schrödinger-Gleichung *ähnlich* wurde die Gl.(2.36) deshalb bezeichnet, weil sie zwar in ihrer Struktur an diese gemahnt, jedoch das *Quadrat* der Energie E enthält statt dieser selbst. Damit geht einher, dass ihre Lösungen – ganz im Sinne der Relativitätstheorie – symmetrisch zu $E = 0$ mit beiderlei Vorzeichen auftreten.

Sowohl zur Veranschaulichung des soeben Gesagten als auch vor allem ihrer grundlegenden Wichtigkeit selbst wegen seien hier die relativistischen Landau-Niveaus behandelt, die beim QHE im Graphen [5, 6] von ausschlaggebender Bedeutung sind. Betrachtet werde also die Situation, dass ein nunmehr räumlich (und zeitlich) konstantes Magnetfeld der Stärke B auf eine im Prinzip unbegrenzte Graphenschicht einwirkt. Da somit eine das Phänomen beherrschende Längenskala durch rein äußerlich-geometrische Vorgaben nun nicht mehr in Erscheinung tritt, kann hier und im Folgenden allein die sich aus Dimensionsbetrachtungen ergebende magnetische Länge

$$(2.37) \quad l_B := \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$$

noch von Bedeutung sein. Zusammen mit der Fermi-Geschwindigkeit (2.17) ergeben sich auch eine Skala für die Frequenz

$$(2.38) \quad \omega_0 = \frac{v_F}{l_B} = v_F \cdot \sqrt{\frac{eB}{\hbar c}},$$

die an die Stelle der Zyklotronfrequenz

$$(2.39) \quad \omega_c = \frac{eB}{m_e c}$$

massiver Ladungsträger tritt, und, was noch wichtiger ist, eine Skala für die Energie $\hbar\omega_0 = v_F \cdot \sqrt{\frac{\hbar e B}{c}}$. Mit der (in gewisser Weise willkürlichen) Landau-Eichung $\vec{A}(x, y) = B \cdot (-y, 0)$ für das Vektorpotential, die natürlich so gewählt ist, dass sie $\nabla \times \vec{A} = B \cdot \vec{e}_z$ erfüllt, verschwindet – wie beabsichtigt – aus der Aufgabenstellung jegliche Abhängigkeit von x , sodass eben dieses x als zyklische Koordinate zu betrachten ist, deren konjugierter Impuls $\hbar k_x$ mithin eine Konstante der Bewegung darstellt. Derselben wird im Ansatz

$$(2.40) \quad \Psi(x, y) = \exp(ik_x x) \cdot \Phi(y)$$

durch den üblichen Exponentialfaktor Rechnung getragen, sodass sich (2.36) in eine gewöhnliche Differentialgleichung transformiert, die nur noch von y abhängt und an den (eindimensionalen) harmonischen Oszillator erinnert. Hält man hingegen an der Art der Darstellung nach Gl.(2.35) mit dem Operator (2.33) fest, so ergibt sich zunächst

$$(2.41) \quad \hbar\omega_0 \cdot \begin{pmatrix} 0 & l_B \cdot (k_x - \partial_y) - y/l_B \\ l_B \cdot (k_x + \partial_y) - y/l_B & 0 \end{pmatrix} \Phi(y) = E \cdot \Phi(y).$$

Mittels einer Variablentransformation auf die dimensionslose Koordinate $\xi := y/l_B - k_x l_B$ (sodass $\partial_\xi = l_B \cdot \partial_y$ ist) lässt sich dies auf

$$(2.42) \quad -\hbar\omega_0 \cdot \begin{pmatrix} 0 & \xi + \partial_\xi \\ \xi - \partial_\xi & 0 \end{pmatrix} \Phi(\xi) = E \cdot \Phi(\xi)$$

verkürzen und schließlich, indem man bosonische Leiteroperatoren

$$(2.43) \quad b = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi + \partial_\xi)$$

$$(2.44) \quad b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi - \partial_\xi)$$

einführt, die die Kommutatorrelation $[b, b^+] = 1$ erfüllen, in die kompakte Form

$$(2.45) \quad -\sqrt{2}\hbar\omega_0 \cdot \begin{pmatrix} 0 & b \\ b^+ & 0 \end{pmatrix} \Phi(\xi) = E \cdot \Phi(\xi)$$

bringen, deren Lösung die bekannten Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators $\Psi_N(\xi)$ mit $N = 0, 1, 2, 3, \dots$ und l_B als der maßgeblichen Längenskala sind:

$$(2.46) \quad \Phi(\xi) = \begin{pmatrix} \Psi_{N-1}(\xi) \\ \mp \Psi_N(\xi) \end{pmatrix}$$

Hierbei ist $\Psi_{-1} \equiv 0$ zu verstehen, sodass das Vorzeichen bei Ψ_0 in der unteren Zeile von (2.46) als willkürlicher Faktor bedeutungslos wird und die Energie $E = 0$ (mit $N = 0$) keine höhere Entartung erfährt als die anderen Zustände, die mit „minus“ Teilchen ($E > 0$), mit „plus“ hingegen Löchern ($E < 0$) zuzuordnen sind. Die Energien selbst ergeben sich zu

$$(2.47) \quad E = \pm\sqrt{2N} \cdot \hbar\omega_0 \equiv \pm v_F \cdot \sqrt{\frac{2\hbar e B \cdot N}{c}}.$$

Aufgrund der in ihm enthaltenen Wurzel könnte dies Ergebnis auf den ersten Blick dazu verleiten, zu meinen, dass der Einfluss eines Magnetfeldes im Vergleich zum nichtrelativistischen Schrödinger-Fall [vergleiche dazu (2.39) mit (2.38)] nur „gebremst“ wirksam würde. Neben der Größenordnung erreichbarer Magnetfelder sind dabei aber auch die Werte der an dem Effekt beteiligten Vorfaktoren in Rechnung stellen. Für $B = 8$ T (und $N = 1$) ergibt sich aus (2.47) eine Energie von 0,1 eV, was rund 1200 K entspricht und nebenbei bemerkt sogar erlaubt, den QHE bei Zimmertemperatur nachzuweisen (in [32] wurden dazu allerdings Felder um die 30 Tesla angewandt). Hingegen liefert der Schrödinger-Fall $\hbar\omega_c = \frac{\hbar e B}{m_e c}$ nur 0,9 meV entsprechend 11 K. Mit dem Landé-Faktor des Elektrons $g_e \simeq 2$ und dem Bohrschen Magneton $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$ liefert die Aufspaltung durch den Zeeman-Effekt $g_e \mu_B B \simeq \frac{\hbar e B}{m_e c}$ übrigens genau das gleiche Ergebnis. Der prozentuale Fehler, den man bei Vernachlässigung des Letzteren begeht, wird dabei mit abnehmender Feldstärke sogar noch geringer.

Diesen Abschnitt beschließend sei noch darauf hingewiesen, dass die weiter oben dargestellten Überlegungen, die Zahl der Komponenten in der Wellenfunktion betreffend, durch die Peierls-Substitution (2.30) ihre Gültigkeit keineswegs verlieren. Im Gegenteil behalten sie diese auch dann noch bei, wenn man ihr die ergänzende Substitution $E \rightarrow E + eU$ an die Seite stellt, die elektrostatische oder sonstige, nicht unbedingt an die Ladung $-e$ des Teilchens koppelnde Skalarpotentiale mit einbezieht. Dies ergibt sich augenfällig aus der Form des als Vorbild dienenden Dirac-Operators (2.20), in dem lediglich die Masse m über die Matrix β ein anderes Verhalten der unteren Komponenten gegenüber den oberen zu bewirken in der Lage wäre. Somit können alle Erscheinungen, die sich lediglich auf den Pseudospin

beziehen, auch bei Vorhandensein elektromagnetischer Felder durch zweikomponentige Wellenfunktionen erfasst werden. Anders wird dies erst, wenn, wie im nächsten Abschnitt, weitere Freiheitsgrade mit ins Spiel gelangen.

2.5. Die Spin-Bahn-Kopplung

Bekanntlich – siehe Lehrbücher der Quantenmechanik, zum Beispiel [33] oder [34] – ergeben sich aus der relativistischen Dirac-Gleichung im Grenzfall kleiner Geschwindigkeiten v (im Vergleich zur Lichtgeschwindigkeit c) gewisse Korrekturen gegenüber der nichtrelativistischen Schrödinger-Gleichung, nämlich in erster Näherung die Energie $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ eines magnetischen Dipols $\vec{\mu}$ im äußeren Magnetfeld \vec{B} (Pauli-Gleichung) sowie in zweiter Näherung $(v/c)^2$ auch *ohne* äußeres Magnetfeld drei weitere Terme, und zwar sind dies die Folgenden:

- (1) Die nur für s-Elektronen relevante Kontaktwechselwirkung nach Darwin:

$$W_1 = \frac{Ze^2 \cdot \pi \hbar^2}{2m_e^2 c^2} \cdot \delta(r)$$

- (2) Der zweite Term $W_2 = -\frac{(E-V)^2}{2m_e c^2} = -\frac{p^4}{8m_e^3 c^2}$ berücksichtigt die relativistische Massenveränderung, die schon Sommerfeld in Betracht zog, als er das Bohrsche Atommodell auf elliptische Bahnen verallgemeinerte.

- (3) Der dritte Zusatzterm, die hier vor allem interessierende Spin-Bahn-Wechselwirkung

$$(2.48) \quad W_3 = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \cdot [(\nabla V) \times \vec{p}] \cdot \vec{S}$$

$$(2.49) \quad = \frac{e\hbar}{4m_e^2 c^2} \cdot [\vec{E} \times \vec{p}] \cdot \vec{s}$$

$$(2.50) \quad = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \right) \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}$$

soll an dieser Stelle etwas genauer betrachtet werden. Bei beliebigem elektrostatischem Potential $V = V(\vec{r})$ ergibt sich zunächst die allgemeine Form (2.48) mit dem Operator für den Gesamtspin $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \cdot \vec{s}$, wobei \vec{s} die bekannten Pauli-Spin-Matrizen umfasst; mit der elektrischen Feldstärke $\vec{E} = +\frac{1}{e} \cdot \nabla V$ weiters die Form (2.49), auf die im Verlaufe dieses Abschnittes noch zurückgegriffen wird, und schließlich bei Zentralkräften (also kugelsymmetrischen, insbesondere Coulomb-Feldern) wegen des dabei gültigen Zusammenhanges $\nabla V(r) = \frac{\vec{r}}{r} \cdot \frac{\partial V}{\partial r}$ die spezielle Form (2.50), die nunmehr beide Drehimpulsarten, nämlich den Spin als Eigendrehimpuls \vec{S} sowie den Bahndrehimpuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ miteinander verquickt.

Die Notwendigkeit einer solchen Spin-Bahn-Kopplung in Form eines Skalarproduktes

$$(2.51) \quad W_3 = \Delta \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}$$

ergibt sich – bis auf den Vorfaktor – auch formal aus einer Symmetrieüberlegung (Paritätsbetrachtung), lässt doch eine Raumspiegelung das Vorzeichen desselben unverändert. Denn, um es anders auszudrücken: das zu diesem äquivalente Spatprodukt aus dem axialen Vektor \vec{S} und den beiden polaren Vektoren \vec{r} und \vec{p} ist bei einer Raumspiegelung invariant und *kann* damit ungleich Null sein. Über den Wert des Vorfaktors Δ und ob dieser im konkreten Falle überhaupt von Null

Pauli-Matrix	Bedeutung	dritte Komponente	+1	-1
\vec{s}	Spin	s_z	\uparrow	\downarrow
$\vec{\sigma}$	Untergitter	σ_z	A	B
$\vec{\tau}$	Valley	τ_z	K	K'

TABELLE 2.1. Die verschiedenen Pauli-Matrizen und ihr jeweiliger Bezug

verschieden ist, vermag die bloße Symmetriebetrachtung naturgemäß ebensowenig auszusagen wie über eine eventuell vorliegende, möglicherweise auch komplizierte Ortsabhängigkeit desselben. Nach entsprechender räumlicher Mittelung kann diese aber gegebenenfalls unbeachtet bleiben und somit Δ als Konstante angesehen werden. Im Sinne rechen technischer Vereinfachung kann diese Haltung auch dadurch eine zusätzliche Legitimation erfahren, dass es sich bei W_3 um einen Korrekturterm handelt, der nur einen vergleichsweise kleinen Beitrag liefert.

Die hier vom theoretischen Standpunkt aus dargelegte Spin-Bahn-Kopplung hat durchaus Auswirkungen auf die Bändermodelle, genauer gesagt das jeweilige Valenzband der konventionellen Elementhalbleiter Silizium und insbesondere Germanium, was bereits seit Längerem bekannt ist und demgemäß seinen Niederschlag auch in den Lehrbüchern der Festkörperphysik fand, siehe zum Beispiel [37] und [38]. Letzteres gibt folgende Werte an: $\Delta_{Si} = 0,044$ eV und $\Delta_{Ge} = 0,29$ eV. Hingegen werden für Kohlenstoff mit seiner geringeren Kernladungszahl $Z = 6$ und einem dementsprechend deutlich schwächeren Kernpotential nur wesentlich kleinere Aufspaltungen erwartet, die, setzt man die Tendenz fort, in der Größenordnung von $\Delta_C = 10$ meV liegen sollten. Tatsächlich gibt [39] sogar 13 meV an, wobei es – auch im Sinne angemessener Vergleichbarkeit – zu beachten gilt, dass dieser Wert ebenso wie die zuvor zitierten Zahlen für dreidimensionale Materialien (hier also: Diamant) maßgebend ist.

Wie dieser Wert auf das 2D-Material skaliert und wie er unter geeigneten Umständen auch recht drastisch erhöht werden kann, soll im nächsten Abschnitt dargelegt werden. Denn um die Auswirkungen der Spin-Bahn-Kopplung zu verstehen, und warum ihre eventuelle Erhöhung von wissenschaftlichem Interesse und gegebenenfalls sogar vom praktischen Standpunkte aus recht wünschenswert sein könnte, ist es zunächst zweckmäßig, zuvor eine Klassifikation in Bezug darauf vorzunehmen, unter welchen Bedingungen und in welcher Form sie aufzutreten vermag. Aus Symmetrieüberlegungen, wie sie von Kane und Mele in [40] durchgeführt wurden, ergibt sich nämlich, dass für eine derartige Wechselwirkung genau zwei Möglichkeiten bestehen. Um diese darzulegen, sei zuvörderst die Nomenklatur vorangestellt, die im Folgenden Verwendung findet: es beziehe sich \vec{s} weiterhin auf den (echten) Spin des Elektrons, $\vec{\sigma}$ wie zuvor auf den sogenannten Pseudospin, der die Untergitter voneinander unterscheidet, und $\vec{\tau}$ grenzt endlich die beiden K -Punkte gegeneinander ab. Da die dritte Komponente all' dieser Vektoren, die Matrix $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, die Eigenwerte +1 und -1 besitzt, ergibt sich die in der Tabelle 2.1 aufgeführte Zuordnung.

Unter Berücksichtigung beider K -Punkte lautet der Hamilton-Operator für die freie Graphenschicht, also ohne Ankopplung äußerer Felder und auch noch ohne die

Einbeziehung der Spin-Bahn-Wechselwirkung wie folgt:

$$(2.52) \quad H_0 = -i\hbar v_F (\sigma_x \tau_z \partial_x + \sigma_y \partial_y)$$

Dieser unterscheidet sich vom Operator für einen einzelnen K -Punkt (2.21) durch ein zusätzlich eingefügtes τ_z , welches im Falle des anderen Punktes K' einen Vorzeichenwechsel des ersten Termes [vergleiche dazu (2.22) mit (2.21)] bewirkt, welcher genau der bereits erwähnten Zeitumkehrsymmetrie entspricht, die zwischen K und K' herrscht.

Welche Möglichkeiten bestehen nun im Hinblick auf die einzuhaltenden Symmetrien für eine eventuelle Spin-Bahn-Kopplung?

Bei vorhandener Spiegelsymmetrie bezüglich der Graphenebene (also ohne etwaiges Substrat und natürlich auch ohne ein von außen angelegtes elektrisches Feld) kann ein Zusatzterm, der die Spin-Bahn-Wechselwirkung beschreiben soll und imstande ist, die ohne Spin bei $\vec{q} = 0$ vorliegende Entartung aufzuheben, laut [40] nur die folgende Form aufweisen:

$$(2.53) \quad H_{SO} = \Delta \cdot \sigma_z \tau_z s_z$$

Dieser wird, da er ohne äußeren Einfluss vorhanden, also sozusagen dem Material zugeigen ist, als intrinsischer Effekt bezeichnet und führt auf eine Lücke der Größe 2Δ im Energiespektrum mit der Dispersion

$$(2.54) \quad E(\vec{q}) = \pm \sqrt{(\hbar v_F \vec{q})^2 + \Delta^2}$$

(anstatt 2.18). Indem diese an die relativistische Beziehung

$$(2.55) \quad E(\vec{p}) = \pm \sqrt{(c \vec{p})^2 + (mc^2)^2}$$

gemahnt, die aus der Dirac-Theorie folgt, kann man formal sagen, dass die Spin-Bahn-Wechselwirkung den zuvor masselosen Quasiteilchen, als welche die Elektronen im (idealen) Graphen anzusehen sind, wieder so etwas wie eine wenn auch nur geringe Masse verleiht. Dies ist aber eher als eine etwas saloppe Ausdrucksweise dafür zu verstehen, dass sich formal ähnliche Dispersionsrelationen ergeben, als dass die für diesen Umstand verantwortlichen Ursachen die gleichen wären. Denn anders als im Hamilton-Operator (2.20), der der Dispersion (2.55) zugrunde liegt, koppelt die hier in Rede stehende Masse $m_* = \Delta/v_F^2$ nicht an die Matrix β an, und auch der Umrechnungsfaktor ist nicht das Quadrat der Lichtgeschwindigkeit c , sondern jenes der in (2.17) definierten Fermi-Geschwindigkeit v_F .

Dass in (2.53) alle drei Vorzeichen-Faktoren zusammentreten müssen, erhellt sich wie folgt: Ohne auch nur einen einzigen der genannten Faktoren ergibt sich ein stets gleiches Vorzeichen für Δ , also eine konstante (und damit triviale) Verschiebung um diesen Wert. Der Spin als solcher hat ohne Magnetfeld [über dessen Wirkung siehe Ende des vorigen Abschnitts] zunächst keinen Einfluss auf die Energieniveaus und trägt über die Statistik (Entartungsgrad zwei) lediglich zu ihrer verdoppelten Zählung bei. Die beiden anderen Faktoren brechen jeweils mindestens eine, wenn nicht gar mehrere der zu beachtenden Symmetrien, und zwar σ_z die Parität der Untergitter (s.o.), τ_z hingegen diese *und* zusätzlich noch die Zeitumkehrsymmetrie. Kombiniert man beide zu $\sigma_z \tau_z$, so verbleibt lediglich die Brechung der Letzteren, die vermittels rückwärts laufender Spins (Faktor s_z) schließlich auch noch ausgehebelt werden kann.

Fehlt die Spiegelsymmetrie bezüglich der Graphenebene, z.B. durch ein senkrecht zu dieser (also in z-Richtung) angelegtes Feld $\vec{E} = \vec{e}_z \cdot E$ [dessen Stärke nicht mit der in gleicher Weise bezeichneten Energie zu verwechseln ist], so kann aus analogen Überlegungen die Form des in diesem Falle noch hinzutretenden Termes (2.56) erschlossen werden. Durch Umgruppierung des Spatproduktes aus (2.49) in der folgenden Weise $[\vec{E} \times \vec{p}] \cdot \vec{s} = [\vec{p} \times \vec{s}] \cdot \vec{e}_z \cdot E = [p_x s_y - p_y s_x] E$ ergibt sich nämlich die prinzipielle Form des nach Emmanuel Rashba benannten Effektes als proportional zum Ausdruck in der eckigen Klammer; vergleiche dazu auch dessen Veröffentlichungen, beispielsweise [41] oder [24]. Wieder sollen analog zu (2.53) lediglich die diversen Spinmatrizen explizit aufgeführt und alle anderen Einflüsse – zum Beispiel die elektrische Feldstärke E , welchen Ursprunges sie auch immer sein möge – summarisch in einer Konstanten zusammengefasst werden, weshalb an Stelle des Impulsoperators lediglich die dessen Komponenten begleitenden Spinmatrizen $\sigma_x \tau_z$ bzw. σ_y wie in (2.52) aufscheinen; folglich ist

$$(2.56) \quad H_R = \frac{1}{2} \lambda \cdot (\sigma_x \tau_z s_y - \sigma_y s_x).$$

Die Differentialoperatoren ∂_x und ∂_y selbst, die die räumliche Variation abtasten, und zwar handelt es sich hierbei um die mikroskopische Variation der Wellenfunktion, erscheinen hingegen nicht, da hier wieder eine entsprechende Mittelung vorgenommen werden kann, wie sie oben im Zusammenhang mit (2.51) bereits geschildert wurde. Eine räumlich langsamere Veränderung, beispielsweise durch bewusst veränderliche Dotierung auf mesoskopischer Längenskala kann hingegen durch entsprechend wechselnde Werte für λ (zum Beispiel Stufenfunktion) erfasst werden. Übrigens wird der Vorfaktor $\frac{1}{2}$ bei λ nicht von allen Autoren geteilt, er erweist sich jedoch hier als zweckmäßig; siehe Gleichung (3.16).

Wie aus (2.56) ersichtlich ist, folgt aus dem Rashba-Term die Möglichkeit eines Spin-Umklapps auf Kosten des Untergitter-Pseudospins, wodurch sich die Zustände in gewisser Weise vermischen und die Energielücke vermindert oder sogar gänzlich aufgehoben wird. Für $\lambda < 2\Delta$ bleibt sie als solche zunächst noch bestehen und wird lediglich in ihrer Größe auf $2\Delta - \lambda$ reduziert. Offensichtlich schließt sie sich für $\lambda = 2\Delta$ zur Gänze, sodass ein Phasenübergang auftritt. Solche Phasenübergänge sind deswegen besonders interessant, da hier nicht einfach ein Übergang von einem Halbleiter mit vorhandener zu einem solchen mit verschwindender Bandlücke stattfindet, bei genügend tiefer Temperatur also von einem Isolator zu einem (schlechten) Leiter, sondern zwischen Phasen, die als topologische bezeichnet werden, da hier weniger die konkrete geometrische Gestalt ihrer in zwei Dimensionen zu sehenden „Oberfläche“ von Bedeutung ist als vielmehr deren innerer Zusammenhang. In Analogie zum QHE wird der topologische Isolator auch als im Quanten-Spin-Hall-Zustand (QSH-Zustand) befindlich bezeichnet, denn wie bei diesem erfolgt ein Transport durch Randkanäle chiraler bzw. helikaler Natur. Im Unterschied zum QHE liegt jedoch kein äußeres Magnetfeld und somit auch keine Brechung der Zeitumkehrinvarianz vor, und es findet auch kein Ladungstransport statt. Zur Erfüllung der Zeitumkehrsymmetrie müssen nämlich zwei Ströme, und zwar von genau gleicher Stärke, in den beiden entgegengesetzten Richtungen gewährleistet sein, sodass sich die von ihnen transportierten Ladungen exakt kompensieren. Für den ebenfalls von Elektronen getragenen Spin gilt dies indessen nicht, da seine Drehrichtung bei entgegengesetzter Laufrichtung des Elektrons ebenfalls umzukehren ist, um deren

einheitliche Chiralität zu verbürgen. Auf diese Weise kommt es zu einem Spintransport ohne gleichzeitigen Transport von Ladung, und dieser ist sogar robust in dem Sinne, dass ihm etwaige Störungen nichts anzuhaben vermögen. Besser gesagt, können solche gar nicht vorkommen, da die entsprechenden Streuzustände schlichtweg fehlen; die bereits besetzten Zustände sind also durch die vorhandene Symmetrie geschützt. Jedoch wird durch den Rashba-Term die Zeitumkehrsymmetrie ähnlich wie beim QHE gebrochen, und es kommt, seine genügende Stärke vorausgesetzt, zu einem entsprechenden Übergang aus der QSH-Phase heraus.

Da die Manipulation (das Umklappen) eines Spins mit weitaus geringerem Energieaufwande durchgeführt zu werden vermag als das Auslöchen (also die Kompensation) einer Ladung, ergeben sich hier zukunftssträchtige Weiterentwicklungsmöglichkeiten elektronischer Bauelemente in Richtung Spintronik. Aus den gemachten Darlegungen ergibt sich, dass es nicht bloß wissenschaftlich interessant, sondern höchstwahrscheinlich auch technologisch äußerst wünschenswert wäre, die beiden Parameter Δ und λ – wenn möglich, jeden für sich – drastisch zu erhöhen. Welche Methoden sich dazu anbieten, soll in dem nun folgenden Abschnitt geschildert werden.

2.6. Die Spin-Bahn-Kopplung im Graphen und ihre Erhöhung

Wie bereits erwähnt, kann der Kohlenstoff selbst, seiner Kernladungszahl von $Z = 6$ geschuldet, über eine lediglich ziemlich geringe Spin-Bahn-Kopplung verfügen; so werden etwa in [42] für das Einzelatom $32,35 \text{ cm}^{-1}$, also $\Delta_{at} = 4,0 \text{ meV}$ genannt. Die in der Literatur für (unbehandeltes) Graphen angeführten Daten liegen demgemäß – wenngleich sie auch mit gewissen, zum Teil sogar recht deutlichen Streuungen behaftet sind – absolut gesehen allesamt sehr niedrig.

Werte für Graphit, wie sie zum Beispiel aus der Anpassung der berechneten Bandstruktur [43] an Messungen der diamagnetischen Suszeptibilität gewonnen wurden, sind hier nicht unmittelbar zielführend, da sie auf der Wechselwirkung (vieler) aufeinander liegender Schichten basieren, zeigen jedoch andererseits auch die Größenordnung auf, die, wenigstens bei vollständiger Bedeckung, bereits mit Atomen geringer Kernladungszahl erreichbar ist. Der von McClure in [43] genannte Wert $\Delta = 25 \text{ meV}$ kann somit auch als Richtschnur für die Möglichkeiten angesehen werden, die bei Bedeckungsgraden um 10 % durch Atome genügend hoher Kernladungszahlen zu realisieren wären. Um den Mechanismus ihrer Wirkung zu erfassen und damit auch die Größe der mit ihrer Hilfe erzielten Effekte würdigen zu können, muss zunächst einmal verstanden werden, warum die im (idealen) Graphen vorhandene Spin-Bahn-Kopplung eine solch geringe ist, dass ihre Messbarkeit keineswegs als eine selbstverständliche vorauszusetzen ist.

Die in der Literatur für Graphen genannten Daten zerfallen in zwei Gruppen: Einerseits werden für Δ Werte in der Größenordnung weniger μeV angegeben, so zum Beispiel $6,5 \mu\text{eV}$ in [44] oder sogar nur $0,57 \mu\text{eV}$ in [45]. Letzteres würde bedeuten, dass sich die Spin-Bahn-Kopplung erst bei Temperaturen im Milli-Kelvin-Bereich auszuwirken begännen. Auch Yugui Yao et al. [46] sowie Daniel Huertas-Hernando et al. [47] gelangen in ihren jeweiligen Arbeiten auf ziemlich genau $1 \mu\text{eV}$. Andererseits finden sich aber auch im Vergleich dazu deutlich höhere Angaben um $0,1 \text{ meV}$. Eben diese Größenordnung erhalten Kane und Mele [40], indem sie, ausgehend von (2.50), die Konstante Δ in (2.51) recht grob zu $\Delta = \frac{2\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2}{3m^2 c^2 d^3} \approx 95 \mu\text{eV} \triangleq 1,1 \text{ K}$ abschätzen. Selbst bei Zutreffen dieses lediglich als Anhaltspunkt

anzusehenden Wertes (was seinem experimentellen Nachweise sicherlich sehr förderlich wäre) ist er doch für praktische Anwendungen immer noch um rund zwei Größenordnungen zu niedrig.

Gmitra et al. [48] scheint mit $\Delta = 12 \mu\text{eV}$ (ohne Gitterverzerrung) eine Mittelstellung einzunehmen und sich damit wieder an [44] anzunähern. Als Grund für die Diskrepanz zu den Arbeiten [45], [46] und [47] wird angegeben (und durch numerischen Vergleich erhärtet), dass dort die zwar schwache, ihres Ausschlag gebenden Effektes wegen aber nicht zu vernachlässigende Besetzung der höheren, insbesondere der d-Zustände des Graphen keine Berücksichtigung fand.

Alles in allem bleibt festzuhalten, dass sämtliche von den verschiedenen Autoren angegebenen Werte für Δ deutlich niedriger liegen als die obige Angabe Δ_{at} für das Einzelatom, die sich auf die *offene* Schale der p-Elektronen bezog. Deren Drehimpulse werden aber durch die im Gitter des Graphen ausgebildeten Bindungen gewissermaßen ausgelöscht, sodass Δ_{at} in Letzterem keine (direkte) Gültigkeit mehr zu beanspruchen berechtigt ist. Zwar hat das abgesehen von seinem Überlapp zu den Nachbaratomen unveränderte p_z -Orbital noch immer den Drehimpuls $l = 1$, jedoch ist dessen *in* der Ebene des Graphen allein maßgebliche Projektion auf die dazu senkrechte Achse, nämlich die magnetische Quantenzahl $m_l = 0$, und damit ist es – für sich allein betrachtet – in Bezug auf die Spin-Bahn-Kopplung ebenso wirkungslos wie die an den σ -Bindungen ($l = 0$) beteiligten sp^2 -Elektronen. Eine solche kann sich nur durch die Wechselwirkung der π - und σ -Elektronen ergeben, welche ihrer Kleinheit wegen mit der Störungstheorie erfassbar ist. Da sich aber die von den nächsten Nachbarn ausgehenden Effekte erster Ordnung aufgrund der (vom Einzelatom aus gesehen) trigonalen Symmetrie gegenseitig kompensieren, kommt besagte Störung erst in zweiter Ordnung Störungstheorie zum Tragen, wodurch die geringe Größe der bereits oben zitierten Ergebnisse verständlich wird. So ergab beispielsweise die Berechnung in [46] für Δ die folgende Formel:

$$(2.57) \quad \Delta = \frac{2|E_{2s}|}{9t_{sp\sigma}^2} \cdot \Delta_{at}^2$$

Darin steht $E_{2s} = -8,868 \text{ eV}$ für die auf $E_{2p} = 0$ bezogene Energie des 2s-Zustandes und $t_{sp\sigma}$ für die Wechselwirkung der durch den Index bezeichneten Bindungen, hier also $t_{sp\sigma} = +5,580 \text{ eV}$. Die Werte sind aus [31] entnommen und ergeben $\Delta \sim 1 \mu\text{eV}$. [45] liefert prinzipiell (bis auf einen zusätzlichen Faktor $\frac{1}{4}$) dasselbe Ergebnis, benutzt dabei aber 6 meV für Δ_{at} . Ebenfalls ausgehend vom Modell der festen Bindung (und unter scheinbar selbstverständlicher Beschränkung auf die π - und σ -Bänder) gewinnt [47] unter Einbeziehung weiterer Parameter ($t_{ss\sigma}$ und $t_{pp\sigma}$) sowie einem gegenüber [46] etwas veränderten Datensatz ein numerisch fast identisches Ergebnis $\Delta \sim 10 \text{ mK}$ ($1 \mu\text{eV}$).

Zwei Ausnahmen von der obigen Argumentation, die einen Effekt gleichwohl bereits in erster störungstheoretischer Ordnung bezüglich Δ_{at} wirksam werden lassen können, sollen nicht verschwiegen werden: Zum Einen können d- und gegebenenfalls auch f- sowie höhere Orbitale, letztere allerdings mit geringerer Konsequenz, Drehimpulsprojektionen $m_l \neq 0$ besitzen. Wenn nun die p_z -Elektronen anstatt mit den σ -Bindungen mit den d_{xz} - und d_{yz} -Zuständen überlappen, – bei den anderen d-Zuständen ist entweder $m_l = 0$ (bei d_{z^2}) oder aber der Überlapp verschwindet aus Symmetriegründen (bei d_{xy} und $d_{x^2-y^2}$) – so stellt sich ein Effekt erster Ordnung proportional zu Δ_{at} ein, von dem [48] konstatiert, dass dieser dominierend und für „mehr als 96 %“ des dort für Δ gefundenen Gesamtergebnisses verantwortlich

sei. Zum Anderen wurde, um den Effekt in erster Ordnung zum Verschwinden zu bringen, vorausgesetzt, dass jedes Atom von seinen (nächsten) Nachbarn in einer perfekt symmetrischen Weise umgeben sein sollte; diese Symmetrie bricht jedoch bei geeigneter Verzerrung, insbesondere bei einer Krümmung der Graphenschicht zusammen. Mutatis mutandis gilt Entsprechendes auch für das Anlegen eines elektrischen Feldes senkrecht zur Schicht, weshalb beides zum Rashba-Effekt (2.56) Anlass gibt, welcher bezüglich Δ_{at} von erster Ordnung ist und dem ich mich als Nächstes zuzuwenden gedenke.

Einige der bereits genannten Arbeiten berechnen neben dem intrinsischen auch diesen Effekt und bestätigen damit die beiden in [40] aufgrund bloßer Symmetrieüberlegungen aufgezeigten Möglichkeiten (2.53) und (2.56); außerdem wird mit der Bestimmung der Konstanten auch die Stärke der jeweiligen Kopplung fixiert. [45] berechnet den auf das elektrische Feld E zurückgehenden Anteil der Rashba-Konstanten zu

$$(2.58) \quad \frac{1}{2}\lambda^{(E)} = \frac{z_0 \cdot eE}{3t_{sp\sigma}} \cdot \Delta_{at} .$$

Dabei entstammt z_0 dem Matricelement des Stark-Effektes, den das Feld auf das jeweilige Kohlenstoff-Atom ausübt; es ist seiner Ausdehnung in z-Richtung proportional und wird mit 186 pm angegeben. Mit einer Feldstärke $E = 50\text{V} / 300\text{nm}$, welche der Oxidschicht des Substrates gerade noch zuträglich ist, vgl. [49], ergibt sich ein Effekt von 7,4 μeV , laut [47] mit seiner etwas verfeinerten, jedoch prinzipiell gleichartigen Berechnungsmethode 6,0 μeV . Da der Rashba-Effekt nicht nur der Größe Δ_{at} sondern ebenso einer „äußeren“ Ursache – hier der aus technologischen Gründen begrenzten Feldstärke, gleich anschließend hingegen der Krümmung – direkt proportional ist, ergibt sich insgesamt gesehen wieder ein Effekt zweiter Ordnung, der, wenn er auftritt, von vergleichbarer Größenordnung sein wird wie der intrinsische. Wie nämlich in [47] ausgeführt wird, bestehen für den Rashba-Effekt gemäß der Art, wie die Symmetriebrechung bezüglich der Graphen-Ebene bewerkstelligt wird, und den jeweils damit einhergehend veränderten Kopplungsschemata der beteiligten Atom- bzw. Molekülorbitale zwei Möglichkeiten, die sich in (2.56) in gleicher Weise auswirken, sodass dort $\lambda = \lambda^{(E)} + \lambda^{(K)}$ zu setzen ist. Zu dem bereits erwähnten Effekt (2.58) des elektrischen Feldes tritt also gegebenenfalls noch jener einer Krümmung der Graphen-Schicht hinzu, der sich laut [47] zu

$$(2.59) \quad \frac{1}{2}\lambda^{(K)} \approx 0,35 \cdot \frac{t_{pp\sigma} - t_{pp\pi}}{|E_{2s}|} \cdot \left(\frac{a}{R_1} + \frac{a}{R_2} \right) \cdot \Delta_{at}$$

ergibt. Dabei sind R_1 und R_2 die Krümmungsradien in zwei zueinander senkrechten Richtungen (beispielsweise der x- und der y-Richtung) und die Proportionalität zu $t_{pp\sigma} - t_{pp\pi}$ weist auf die sich durch eine zunehmende Krümmung allmählich ändernden Bindungsverhältnisse hin. Da jedwede Graphen-Schicht niemals vollkommen glatt ist, sondern in Abhängigkeit von Substrat und Herstellungsmethode eine stets mehr oder minder starke, als „Crumpling“ bezeichnete Welligkeit aufweist, siehe [50], wird in der vorstehend angeführten Arbeit [47] die Schlussfolgerung gezogen, dass durch die stets vorhandene Kräuselung im Graphen – sogenannte „ripples“ – auch ohne äußeren (und gewollten) Einfluss ein Rashba-Effekt von rund 20 μeV vorliegen müsse. Tendenziell ähnliche Aussagen (dort über „miniripples“) macht auch [48].

Fast ausnahmslos liegen sämtliche genannten Werte im Sub-Kelvin-Bereich. Auf die Frage, wie denn die Spin-Bahn-Kopplungen im Graphen eine beträchtliche Erhöhung ihrer Stärke zu erfahren in der Lage sind, liefern die Formeln (2.57) bis (2.59) bereits die entscheidenden Fingerzeige. Wenn aus Gründen praktischer Handhabbarkeit von einer äußerlich induzierten Krümmung des Graphen im Weiteren abgesehen werden soll, so stehen noch zwei Wege offen: Zum Einen kann über die Erhöhung der elektrischen Feldstärke der Rashba-Effekt (und nur dieser) gesteigert werden; in diesem Zusammenhang ist darauf hinzuweisen, dass das dazu dienende elektrische Feld nicht unbedingt ein durch metallisch-leitfähige Elektroden von außen angelegtes (und damit über relativ große Raumbereiche homogenes) sein muss, sondern auch durch Atome auf oder unter der Graphen-Schicht erzeugt werden kann. Diese bewirken, bedingt durch ihre vom Kohlenstoff abweichende Elektronegativität, eine Ladungsverschiebung und damit einhergehend ein elektrisches Feld, durch das es im Graphen, lokal begrenzt, zu einem interatomaren Stark-Effekt kommt. Betreffs der Größenordnung der beteiligten Felder kann konstatiert werden, dass die atomar bedingten Felder jene, die von außen angelegt werden können, nicht nur örtlich, sondern auch in ihrer summarischen Wirkung zu erreichen, ja unter geeigneten Umständen sogar noch zu übertreffen in der Lage sind. Dies erhellt sich daraus, dass, um die Wirkung des Substrates oder von (insbesondere unfreiwilligen) Adsorbaten zu kompensieren, im Allgemeinen eine Gegenspannung angelegt werden muss, die aber in bestimmten, vom praktischen [49] Standpunkte dann als ungünstig einzustufenden Fällen die Durchschlagsfestigkeit des Substrates, besser gesagt der dieses abschließenden Oxidschicht, übersteigt. [48] sieht Felder von 1 V/nm als typisch für Graphen auf Substrat und dadurch bewirkte Rashba-Auspaltungen von $10 \text{ } \mu\text{eV}$ als realistisch an. Zum Anderen wäre eine Erhöhung von Δ_{at} wünschenswert, da sich eine solche auf beide Effekte, den intrinsischen und den Rashba-Effekt auswirke. Bezogen auf den zuerst genannten ist dies sogar die alleinige Möglichkeit – durch die quadratische Abhängigkeit in (2.57) allerdings auch eine besonders wirksame. Diesem Zwecke dienend werden Atome höherer Kernladungszahl ins Spiel gebracht, durch die dann ein gewisser Nachbarschaftseffekt zum Tragen kommt: Ein Elektron aus dem Graphen tunnelt in das schwere Atom hinein, erfährt dort eine deutlich erhöhte Spin-Bahn-Wechselwirkung, gegebenenfalls auch einen Spinumklapp, und kehrt danach wieder in die Graphenschicht zurück [18]. Da die ansonsten perfekten Eigenschaften des Graphen, insbesondere seine hohe Trägerbeweglichkeit – [51] gibt $20 \text{ m}^2/\text{Vsec}$ an – nicht geopfert werden sollen, scheidet ein direkter Einbau der Fremdatome, falls ein solcher chemisch überhaupt möglich sein sollte, in die Graphenschicht natürlich aus. Somit ergeben sich zwei Möglichkeiten, die Zusatzatome, die auch ein elektrisches Feld erzeugen können, unterzubringen, nämlich auf der Graphenschicht und darunter. Letzteres meint von der Substratseite her und kann sich entweder auf die Wirkung des Substrates selbst beziehen oder aber auf zwischen dieses und die Graphen-Schicht eingeschobene, sogenannte interkalierte Substanzen. All diese Möglichkeiten wurden theoretisch wie auch experimentell untersucht.

Um mit der Wirkung des Substrates zu beginnen, sei die Arbeit von Li et al. [52] genannt, die ihre Untersuchungen mittels der Dichtefunktionaltheorie (DFT) gestalten und im Wesentlichen zu folgenden Ergebnissen gelangen: Obschon eine

(geringfügige) Gitterverzerrung unter Umständen einer Erhöhung der Spin-Bahn-Wechselwirkung durchaus dienlich sein kann, muss das Graphen doch auf das metallische Substrat „passen“, da sich ansonsten kein stabiles System auszubilden vermag. Neben dieser bloß geometrischen Anpassung muss auch noch eine energetische erfüllt sein, und zwar eine solche zwischen den d-Bändern des Metalls und den $2p_z$ -Niveaus des Kohlenstoffs, durch deren wechselseitige Hybridisierung der Spin-Bahn-Effekt Gelegenheit erhält, ins Graphen gewissermaßen einzusickern. Im Zusammenwirken beider Faktoren ergibt sich, dass trotz der unbestreitbaren Rolle der Kernladungszahl *nicht* der Grundsatz ausgesprochen werden kann, dass je höher diese sei, auch die Effekte der Spin-Bahn-Kopplung um so höher ausfallen müssten. Im Einzelnen wird in [52] festgestellt, dass der Rashba-Effekt auf Gold als Substrat sehr stark ausgeprägt ist, während er sich für Silber und Nickel mit stabiler Geometrie der darauf befindlichen Graphenschicht doch recht bescheiden ausnimmt. Im Falle des Goldsubstrates werden im Dirac-Punkte 5 meV für die Aufspaltung durch den intrinsischen Effekt genannt; für andere Punkte (und beide Effekte) Werte bis zu etwa 100 meV. In einer experimentellen Arbeit untersuchen Varykhalov et al. [53] Graphen auf einer Nickel-111-Oberfläche mit einer interkalierten einatomaren Goldschicht, also das System: Graphen/Au/Ni(111), von dem sie behaupten, es käme einer freistehenden (idealen) Graphenschicht durch Selbstorganisationseffekte näher, als dies bei jeder anderen zuvor angewandten substratbasierten Präparationsmethode je der Fall gewesen sei. Mittels spin- und winkelaufgelöster Photoelektronenspektroskopie gelangen sie zu dem Ergebnis einer großen und von k unabhängigen Aufspaltung vom Rashba-Typ, die sich auf 13 ± 3 meV beläuft.

Was die Wirkung schwerer Adatome auf der Oberseite der Graphenschicht anbelangt, so unternimmt neben einigen anderen, in die gleiche Richtung weisenden Arbeiten [54, 55] wohl Weeks et al. [18] die diesbezüglich tiefgreifendste Untersuchung, der es insbesondere darum zu tun ist, die Herbeiführung eines QSH-Zustandes zu ermöglichen. Aus diesem Grunde werden Adatome, die ein magnetisches Moment besitzen, gemieden, und auch der Rashba-Effekt soll möglichst wenig zum Tragen kommen. Der favorisierten hohen Kernladungszahl entsprechend werden ausschließlich (stabile) Elemente der fünften und sechsten Zeile des Periodensystems durchmustert, und zwar in Zeile 5: Indium, Zinn, Antimon, Tellur und Jod ($Z = 49 \dots 53$) sowie in Zeile 6: Lanthan ($Z = 57$), Hafnium ($Z = 72$), Platin, Gold, Quecksilber, Thallium, Blei und Wismut ($Z = 78 \dots 83$). Dabei werden drei verschiedene mögliche Positionen der Adatome in Betracht gezogen, nämlich unmittelbar über einem Kohlenstoffatom, oberhalb einer C-C-Bindung und in einer Mulde, die sich aus sechs C-Atomen bildet. Letztere erlaubt auch eine Wechselwirkung übernächster Nachbarn, die besonders dem intrinsischen Effekt zugutekommt. Da die Zusatzatome ihrer Größe wegen jedoch nicht bis in das Zentrum eines solchen Sechsecks vorzurücken vermögen, sondern über diesem zu liegen kommen, ist die Symmetrie in Bezug auf die Graphen-Ebene gebrochen, und es tritt zusätzlich auch ein Rashba-Effekt auf. Für jene beiden Elemente, die am Ende den Sieg davontragen, wird dieser jedoch als „unschädlich“ im Sinne der Fragestellung bekundet. Sich auf Symmetrieargumente stützend werden die Berechnungen für die oben aufgelisteten Elemente mittels DFT durchgeführt, und im Endergebnis ergibt sich für ein 4×4 -Übergitter, also bei einer 6,25%igen Bedeckung des Graphen eine Energielücke 2Δ von 7 meV für Indium; für Thallium sind es sogar 21 meV. Zur

Kontrolle wurden beide Werte mit einer Tight-Binding-Simulation verifiziert. Was die experimentell eher schwierig zu erreichende periodische Bedeckung anbelangt, so ist diese laut [18] nicht unbedingt erforderlich, sondern prinzipiell kann auch eine zufällige Verteilung der Adatome Verwendung finden.

Der Ausschluss bestimmter Elemente als Adatome, insbesondere jener, die ein magnetisches Moment tragen, könnte Skepsis hervorrufen bezüglich der Frage, ob nicht diese eventuell einen noch stärkeren Effekt hervorzurufen in der Lage sind, doch wird in [55] zumindest für Eisen (mit $Z = 26$; wiederum im 4×4 -Übergitter) ein Wert $2\Delta = 5,5$ meV gefolgert.

Im Lichte der vorhergehenden Ausführungen mag zunächst unerwartet erscheinen, dass eine markante Erhöhung der Spin-Bahn-Wechselwirkung im Graphen auch mit Wasserstoff als dem leichtesten aller Elemente zu erzielen ist. Hierbei ist freilich zu beachten, dass nun nicht mehr, wie in den zuvor geschilderten Fällen, Physisorption vorliegt, sondern eine Chemisorption mit deutlich vernehmbaren Änderungen der Bindungsverhältnisse eintritt. Da eine vierte Bindung geschaffen werden muss, genügt nun nicht mehr die sp^2 -Hybridisierung, sondern an ihre Stelle tritt – verbunden mit einer starken, aber lokalen Gitterverzerrung – eine sp^3 -Hybridisierung wie beim Diamanten, dessen Spin-Bahn-Kopplung nunmehr maßstabsetzend wirksam wird. [56] berechnet Δ in Abhängigkeit vom Wasserstoffbedeckungsgrad; für vollständige Bedeckung – hierbei liegt mithin Graphen vor – ergibt sich als Maximum das einer anschaulichen Deutung zugängliche Ergebnis $\Delta = \frac{3}{4} \cdot \Delta_C \approx 7,5$ meV: Nur drei von vier Bindungen führen zu Kohlenstoffatomen. Bei sehr schwacher, lediglich im Promillebereich liegender Bedeckung wurde laut [57] jedoch bereits $\Delta = 2,5 \pm 0,2$ meV gemessen.

Im letzten Abschnitt dieses Kapitels sollen nunmehr jene Verzerrungen betrachtet werden, die zwar von an sich geringerer Stärke, dafür aber auf ein größeres Gebiet verteilt sind.

2.7. Mechanische Verzerrungen und Pseudo-Vektorpotential

Bereits mehrfach wurde in mehr oder minder direkter Weise die Tatsache angesprochen, dass zur Beschreibung der Quasiteilchen im Graphen von der Quantenmechanik in ihrer relativistischen Form Gebrauch zu machen ist. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung ist ein genuin relativistischer Effekt, und Δ gibt den Teilchen formal eine Masse; eine Raumkrümmung wird durch sie jedoch nicht hervorgerufen. Allerdings gilt es zu beachten, dass die Dirac-Weyl-Teilchen des Graphen nicht im „freien“ Raume existieren, sondern gewissermaßen auf einem materiellen und noch dazu zweidimensionalen Substrate leben. Das Wort „Substrat“ soll hier ausnahmsweise nicht die zur mechanischen Stabilisierung dienende Unterlage des Graphen, sondern dieses selbst bezeichnen; freistehendes Graphen ist hiermit selbstverständlich eingeschlossen. Und dieses Substrat kann Veränderungen erfahren über eine von außen initiierte Verzerrung oder Krümmung, wobei letzteres Untersuchungen zur Elektrodynamik in (zweidimensional) gekrümmten Räumen möglich macht.

So wie der Nabla-Operator, der den Impuls bestimmt, die Wellenfunktion abtastet, besser gesagt deren räumliche Veränderung, so tut er das auch in Bezug auf das Substrat und die dort obwaltenden Lage- und insbesondere Abstandsänderungen zwischen den Kohlenstoffatomen, da diese sich, wenigstens indirekt, auf die zugehörige Wellenfunktion auszuwirken geeignet sind. Bedingt durch die damit

einhergehenden Veränderungen der Energieniveaus und Überlappungsintegrale ergeben sich im Hamilton-Operator Zusatzterme, welche in ihrer Form exakt an jene Substitution gemahnen, die bei Einbeziehung eines elektromagnetischen Feldes dort vorzunehmen ist.

Die folgende Herleitung kleidet diese mehr heuristische Sichtweise in eine mathematisch-exakte Form: In Folge der mechanischen Verzerrungen erfahren die Wechselwirkungsparameter t und t' geringfügige, jedoch *ortsabhängige* Veränderungen, welche durch die Ersetzungen $t \mapsto t + \delta t(\vec{r})$ und analog für t' erfasst werden, die man in (2.4) und (2.7) vorzunehmen hat. Dadurch ergibt sich im Hamilton-Operator (2.3) ein Zusatzterm δH mit einer zu diesem analogen Struktur. Da hier nur die K -Punkte (einschl. K') und deren Umgebungen interessieren, wird in den Nebendiagonalelementen

$$(2.60) \quad \delta h_{12} = \delta h_{21}^* = -\sum_{j=1}^3 \delta t_j \cdot \exp\left(-i \vec{k} \cdot \vec{\delta}_j\right)$$

sogleich $\vec{k} = \vec{K}$ gesetzt. Eigentlich müsste es $\vec{k} = \vec{K} + \vec{q}$ sein, siehe (2.12), aber wegen $q_{x,y}a \ll 1$ [vergleiche (2.14)] ergäben sich zusammen mit den bereits kleinen δt_j (zusätzlich) bloß Terme, die klein von insgesamt zweiter Ordnung und deshalb wegzulassen sind. Der Index in δt_j stimmt hier mit jenem in $\vec{\delta}_j$ überein und bezeichnet auf diese Weise dasjenige Nachbaratom, zu dem hin sich der Parameter t um das entsprechende δt_j geändert hat. Der Stern steht wie üblich für die komplexe Konjugation; eine solche ist auch dann (zusätzlich) auszuführen, wenn man zu dem anderen K -Punkt übergeht [siehe (2.13) mit $\vec{q} = 0$ und (2.11)]. Es ergibt sich

$$(2.61) \quad \delta h_{12} = \delta h_{21}^* = \frac{e}{c} \cdot (A_x^{ps} - i \cdot A_y^{ps}).$$

Das soeben eingeführte Vektorpotential ist dabei durch

$$(2.62) \quad \frac{e}{c} \cdot \vec{A}^{ps} \equiv \frac{e}{c} \cdot \begin{pmatrix} A_x^{ps} \\ A_y^{ps} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \cdot (\delta t_1 + \delta t_2) - \delta t_3 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot (\delta t_1 - \delta t_2) \end{pmatrix}$$

gegeben und verschwindet, wie man unschwer erkennt, identisch, sofern der Wechselwirkungsparameter t lediglich eine konstante Verminderung (oder Erhöhung) erfährt, ansonsten aber keine Ortsabhängigkeit enthält. (Ein entsprechend globaler Effekt spielt natürlich für $q \neq 0$ über die Fermi-Geschwindigkeit (2.17) hinein; insgesamt ist dieser aber, da q klein ist, wieder von zweiter Ordnung.) Der an sich willkürliche Faktor $\frac{e}{c}$ wurde in (2.61) und (2.62) lediglich eingefügt, um die Analogie zur Peierls-Substitution hervorzuheben. Im Gegensatz zum sonst üblichen Anlass handelt es sich aber bei dem Feld, das durch das Vektorpotential (2.62) beschrieben wird, nicht um ein echtes Magnetfeld und ist als solches auch nicht experimentell – etwa durch Neutronenbeugung – nachweisbar; als sogenanntes Pseudomagnetfeld wirkt es sich nämlich nicht auf den echten, sondern allein auf den Pseudospin aus. Anders als beim echten Magnetfeld, bei dem äußere Ströme umzupolen wären, liegt hier auch keine Verletzung der Zeitumkehrinvarianz vor. Wie es einer statischen Situation zu entsprechen hat, sind hier beide Zeitrichtungen in ihrer Bedeutung völlig deckungsgleich, was allerdings erst dann zum Vorschein tritt, wenn beide K -Punkte als miteinander verbundene Entität betrachtet werden.

Eine entsprechende Rechnung für die Hauptdiagonalelemente ergibt

$$(2.63) \quad \delta h_{11} = \frac{1}{2} \cdot \sum_{j=1}^6 \delta t'_j + i \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \sum_{j=1}^6 (-1)^j \delta t'_j,$$

wobei der Imaginärteil verschwindet, da die in ihm enthaltenen Summanden $\delta t'_{1\dots 6}$ paarweise auf der gleichen Linie liegen; siehe (2.10). Bei einer als kontinuierlich angenommenen und im Vergleich zur Gitterkonstanten d langsam dahinschreitenden Variation $\delta t'_j$ sind diese im Rahmen einer bei der vorliegenden Näherung ausreichenden Genauigkeit als identisch anzusehen, also $\delta t'_{4,5,6} = \delta t'_{1,2,3}$. Aus gleichem Grunde vereinfacht sich auch der Realteil, und (2.63) wird zu

$$(2.64) \quad \delta h_{11} = \delta h_{22} = \sum_{j=1}^3 \delta t'_j =: V_{pot},$$

sodass insgesamt

$$(2.65) \quad \delta H^K = \begin{pmatrix} V_{pot} & \frac{e}{c} \cdot (A_x^{ps} - i \cdot A_y^{ps}) \\ \frac{e}{c} \cdot (A_x^{ps} + i \cdot A_y^{ps}) & V_{pot} \end{pmatrix} = 1 \cdot V_{pot} + \frac{e}{c} \cdot \vec{\sigma} \cdot \vec{A}^{ps}$$

gilt.

Schließlich soll noch der Zusammenhang mit einer (statischen) Verzerrung hergestellt werden, denn bislang wurden ja nur die durch sie bewirkten Änderungen der Energieparameter t und t' betrachtet. Vergleicht man zu diesem Zwecke die Ersetzung $t \mapsto t + \delta t(\vec{r})$ mit einer Taylor-Entwicklung nach dem nunmehr veränderlichen Abstand der Atome a , welcher bei genügend kleinen Auslenkungen ein Abbrechen nach dem ersten Gliede gestattet, so ist zunächst $\delta t_j = \frac{\partial t}{\partial a} \cdot \delta u_j$ mit der Abstandsänderung

$$(2.66) \quad \delta u_j = \frac{\vec{\delta}_j}{a} \cdot \left[\vec{u}_A(\vec{R}_j) - \vec{u}_B(\vec{R}_j + \vec{\delta}_j) \right].$$

Diese wird durch die Verschiebungen \vec{u}_A und \vec{u}_B der Atome auf den Gitterplätzen A und B aus ihren Ideallagen \vec{R}_j bzw. $\vec{R}_j + \vec{\delta}_j$ (hier o.B.d.A. vom Atom A aus gezählt) festgelegt; dabei wird durch den Vorfaktor die Projektion auf die Sollage der Verbindungslinie ausgewählt, da lediglich Längenänderungen als relevant, die Winkeländerungen dagegen als nachrangig betrachtet werden.

Im Sinne der Kontinuumsnäherung, bei der die Verzerrung \vec{u} nicht mehr bloß denjenigen Orten zugeordnet wird, an denen sich auch tatsächlich Atome befinden, sondern als nunmehr stetige Größe aufzufassen ist, die grundsätzlich überall in der Ebene des Graphen definiert zu werden vermag, kann die Differenz in (2.66) durch $\vec{u}_A - \vec{u}_B = \kappa \cdot (\vec{\delta}_j \nabla) \vec{u}$ ersetzt werden [58], wobei $\kappa \simeq 0,369$ ein dimensionsloser Parameter ist. Mit dem ebenfalls dimensionslosen Grüneisen-Parameter $\beta := -\frac{\partial \ln t}{\partial \ln a} \approx 2\dots 3$ – er ist positiv, da mit zunehmender Bindungslänge der Überlapp der Wellenfunktionen geringer wird – folgt für die dadurch bedingte Änderung der Wechselwirkungsenergie

$$(2.67) \quad \delta t_j = -\frac{\kappa \beta t}{a^2} \cdot \vec{\delta}_j \cdot (\vec{\delta}_j \nabla) \vec{u}.$$

Im Einzelnen liest sich dies als $\delta t_{1,2} = -\frac{1}{4}\kappa\beta t \cdot (u_{xx} \pm 2\sqrt{3}u_{xy} + 3u_{yy})$ und $\delta t_3 = -\kappa\beta t \cdot u_{xx}$, so dass schlussendlich

$$(2.68) \quad \frac{e}{c} \cdot \overrightarrow{A^{ps}} = \frac{3}{4}\kappa\beta t \cdot \begin{pmatrix} u_{xx} - u_{yy} \\ -2u_{xy} \end{pmatrix}$$

wird [58, 59]. Man beachte die ungleichartige Abhängigkeit von den Koordinaten x und y , welche einer entsprechenden Anisotropie des Graphen-Gitters (siehe Abb. 2.1) geschuldet ist. Durchschneidet man dieses nämlich entlang der y -Achse, so entstehen Zickzack-Kanten, sogenannte „zigzag-edges“; erfolgt hingegen die Teilung in Richtung der x -Achse, so kommt es zu sesselartigen „armchair-edges“. Eben diese Anisotropie schlägt sich in der unterschiedlichen (richtungsspezifischen) Zuordnung der beiden Komponenten der Scherung $u_{xx} - u_{yy}$ und $2u_{xy}$ zu jenen des Vektorpotentials (2.68) nieder; dabei sind die Komponenten des Verzerrungstensors in der Schreibweise $x, y, z = x_{1,2,3}$ durch

$$(2.69) \quad u_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right)$$

gegeben. Auch wenn das letzte (dritte) Glied seiner relativen Kleinheit wegen [60] oft fortgelassen wird, so zeigt sich doch in ihm über die Erfassung der damit einhergehenden Höhenänderung auch bereits ein Einfluss der Krümmung der Graphenschicht, sodass die formell-strukturelle Ähnlichkeit des einschlägigen Ergebnisses in [61] durchaus verständlich ist. Da selbiges jedoch im Folgenden keine Anwendung finden wird, sei indessen bloß eine Tatsache angemerkt, die sich auf eine Faltung des Graphen bezieht, wie sie bei seiner Herstellung mittels der Klebebandmethode (mechanische Exfoliation) zuweilen vorkommt. Bedingt durch die van-der-Waals'schen Anziehungskräfte zwischen den übereinandergelegten Teilen der Graphenschicht und begrenzt durch deren elastomechanische Eigenschaften ergibt sich laut [62] für die Faltung ein natürlicher Biegeradius $R \approx 7 \text{ \AA}$ und eine Verzerrung u_{yy} von einem Promille; hierbei wird angenommen, dass der Knick entlang der x -Richtung zu liegen kommt. Während aus Symmetriegründen $A_y = 0$ ist, setzt sich A_x aus zwei Anteilen zusammen: $A_x = (1, 6 + 7, 2) \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1} = 8,8 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$. Neben den kleineren, durch die Verzerrung im engeren Sinne selbst verursachten tritt ein zweiter, weitaus größerer Betrag, der auf der Hybridisierung der π - und σ -Orbitale fußt, welche durch die Krümmung nunmehr doch ermöglicht wird.

Eine analoge Überlegung wie bei (2.67), jetzt aber bezogen auf die übernächsten Nachbarn, führt zu

$$(2.70) \quad V_{pot} = \delta t'_1 + \delta t'_2 + \delta t'_3 = g_D \cdot (u_{xx} + u_{yy}).$$

Statt zur Scherung ist das Skalarpotential also der Dilatation (oder Kontraktion) proportional, wobei die Proportionalitätskonstante g_D zumeist mit 16 eV beziffert wird (siehe [63], [64] und dortige Referenzen). [58] schätzt (aus der Bandbreite) grob $g_D = 20 \dots 30 \text{ eV}$ ab. Hingegen kommt eine numerische Berechnung [65] auf der Grundlage der DFT, möglicherweise bedingt durch Abschirmeffekte elektrostatischer Natur, lediglich zu $g_D = 3,5 \text{ eV}$.

Gleichzeitiger Einfluss beider Spin-Bahn-Kopplungen, von Magnetfeldern und Verzerrungen

3.1. Zielstellung, allgemeiner Hamilton-Operator und Symmetrien

In dem hier vorliegenden Kapitel soll ausführlich untersucht werden, wie sich das Zusammenspiel all der in den Abschnitten 2.4 bis 2.7 des vorigen Kapitels getrennt dargelegten Effekte, nämlich sowohl mechanische Verzerrungen beschreibender Pseudo- als auch echter Magnetfelder einerseits sowie beider Arten der Spin-Bahn-Kopplung andererseits, erfassen und gestalten lässt.

Der Leitgedanke dabei ist zunächst, dass, bedingt durch die experimentellen Gegebenheiten, diese Größen nicht beliebig einzeln und getrennt voneinander zu kontrollieren sein werden. So werden zum Beispiel Magnetfelder, die nicht bloß homogen (wenngleich dabei unter Umständen sehr stark) sein sollen, sondern in definierter Weise auf mesoskopischer Längenskala veränderlich, durch das Aufdampfen entsprechender Schichten realisiert. Die in ihnen enthaltenen Atome werden aber durch den Kontakt, in den sie dadurch mit dem Graphen gebracht werden, auf dieses dann *auch* Spin-Bahn-Kopplungen auszuüben nicht unterlassen können. Prinzipiell gilt dies selbst dann noch, wenn durch erhöhten Abstand mittels einer Schutzlack-schicht wie Polymethylmethacrylat (PMMA) die genannten Effekte in ihrer Stärke gemindert werden können. Dass mechanische Verformungen andererseits sowohl skalare als auch Vektorpotentiale hervorzurufen in der Lage sind, wurde bereits in Abschnitt 2.7 dargelegt.

Vom theoretischen Standpunkt aus betrachtet ist die gleichzeitige Untersuchung all dieser Einflussgrößen in ihrem Zusammenwirken keineswegs trivial, da sich ihre Effekte mitnichten in bloß additiver Weise einfach überlagern lassen. Seine Ursache hat dieses Verhalten in der Nichtlinearität der zugrunde gelegten bzw. sich ergebenden Gleichungen; Anhaltspunkte dafür als auch einen Vorgeschmack darauf bieten bereits (2.54) und (2.47).

Unter Zusammenfassung des bei Berücksichtigung beider K -Punkte grundlegenden Hamilton-Operators (2.52), der Einbeziehung von echten und Pseudo-Magnetfeldern über die Peierls-Substitution (2.30), also (2.33) und (2.65) einschließlich beliebiger Potentiale V_{pot} , des Zeeman-Terms

$$(3.1) \quad H_Z = bB_z \cdot s_z$$

mit $b := \frac{1}{2}g_e\mu_B$ sowie beider Arten der Spin-Bahn-Kopplung (2.53) und (2.56) ergibt sich

$$(3.2) \quad H_{allg} = \sigma_x (\tau_z (p_x + A_x) + A_x^{ps}) + \sigma_y (p_y + A_y + \tau_z A_y^{ps}) + \dots \\ + V_{pot} + bB_z \cdot s_z + \Delta \cdot \sigma_z \tau_z s_z + \frac{1}{2} \lambda \cdot (\sigma_x \tau_z s_y - \sigma_y s_x).$$

Dies ist der Hamilton-Operator in seiner allgemeinsten Form, der all die in Tab. 2.1 des vorigen Kapitels aufgeführten Freiheitsgrade erfasst und demzufolge auf eine $2^3 = 8$ -komponentige Wellenfunktion

$$(3.3) \quad \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_{A\uparrow K} \\ \Psi_{B\uparrow K} \\ \Psi_{A\downarrow K} \\ \Psi_{B\downarrow K} \\ \Psi_{A\uparrow K'} \\ \Psi_{B\uparrow K'} \\ \Psi_{A\downarrow K'} \\ \Psi_{B\downarrow K'} \end{pmatrix}$$

anzuwenden ist. Im Hinblick darauf ist das Produkt mehrerer Pauli-Matrizen, die sich auf verschiedene Objekte beziehen, nicht in der üblichen Weise zu verstehen, sondern als direktes Produkt aufzufassen, welches auch als Kronecker-Produkt ge-läufig ist. Gedanklich (oder in der konkreten Rechnung) sind, um Konsistenz zu erzielen, bei jenen Termen, die weniger als drei derartige Matrizen enthalten (also auch beim letzten), die entsprechenden Einheitsmatrizen einzufügen. Außerdem wurde von der Setzung $\hbar := v_F := \frac{e}{c} := 1$ Gebrauch gemacht.

Falls, wie es im Folgenden vorgesehen ist, lediglich nicht explizit von der Zeit abhängige Situationen betrachtet werden sollen, ermöglicht die dann vorliegende Zeitumkehrsymmetrie jedoch eine beträchtliche Vereinfachung.

Die Zeitumkehr selbst wird durch den Operator

$$(3.4) \quad \mathcal{T} = \tau_x i s_y \mathcal{C}$$

bewerkstelligt, der die damit einhergehende Vertauschung der beiden Täler K und K' über die Matrix τ_x erfasst. Neben der komplexen Konjugation \mathcal{C} müssen auch die Spins umgekehrt werden. Dies geschieht jedoch nicht über eine entsprechende Matrix s_x , sondern, um bei doppelter Anwendung auf Teilchen mit dem Spin $\frac{1}{2}$, wie es sein muss, den Faktor -1 herauszubringen, über die (reelle) Matrix $i s_y$. Bei Anwendung des Zeitumkehr-Operators (3.4) von links auf die Gleichung

$$(3.5) \quad (H - E) \Psi = 0$$

ergibt sich das unmittelbar einleuchtende Ergebnis, dass nicht nur die Bewegungsrichtung jener Teilchen umzukehren ist, die sich im Graphen selbst befinden, dass also der Impuls der Quasiteilchen \vec{p} einen Vorzeichenwechsel erfährt, sondern dass ein Gleiches auch für diejenigen Elektronen zu ergehen hat, die das äußere Feld $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ erzeugen: Über $\mathcal{T} (H - E) \Psi \equiv (\mathcal{T} H \mathcal{T}^{-1} - E) \mathcal{T} \Psi = 0$ folgt nämlich die Transformation

$$(3.6) \quad \mathcal{T} H_{allg} (\vec{p}, \vec{A}, B_z) \mathcal{T}^{-1} = H_{allg} (-\vec{p}, -\vec{A}, -B_z)$$

und damit die erste Zeile in der unten stehenden Gleichung (3.9).

Es ist aufschlussreich, sich zu vergegenwärtigen, dass ein Wechsel der K -Punkte untereinander nicht nur durch eine zeitliche, sondern auch durch eine räumliche Inversion angestrengt werden kann. Unmittelbar ersichtlich ist dies ist aus (2.11).

Da eine Raumspiegelung jedoch nicht bloß auf das reziproke Gitter Bezug nimmt, sondern selbstverständlich auch das direkte Gitter betrifft, ist sie (siehe dazu Abb. 2.1) gleichermaßen auch mit einem Wechsel der Atome A und B verbunden; der entsprechende Operator lautet also

$$(3.7) \quad \mathcal{I} = \tau_x i \sigma_y .$$

Die Wahl der Matrix $i\sigma_y$, die jenen bewirkt, geschieht dabei aus formal völlig gleichem Anlass wie oben in (3.4), jedoch mit durchaus unterschiedlicher Ursache: Während der reale Spin, der in klassischer Deutung (insoweit eine solche überhaupt als angemessen empfunden werden kann) einer echten Drehung entspricht, die im *zeitlichen* Verlaufe stattfindet, kann etwas Derartiges über den Pseudospin, der sich auf die Atome A und B bezieht, welche gemeinsam und in ihrer Gesamtheit aufgefasst das starre Grundgitter des Graphen bilden, überhaupt nicht in Betracht gezogen werden. In dem einen Fall handelt es sich also um die Spineigenschaft des Elektrons als solchem selbst, in dem anderen Fall hingegen um eine zusätzliche Eigenschaft (die Berry-Phase), welche es als Quasiteilchen aus seiner Umgebung (dem Graphen mit zweiatomarer Basis) erst gewinnt.

Durch die Inversion der Graphenschicht erfährt Selbige, wie gewünscht, das Magnetfeld sozusagen von der anderen Seite her; jedoch würde eine Raumspiegelung auch die dort obwaltenden elastischen Verformungen und das damit einhergehende Vektorpotential $\overrightarrow{A^{ps}}$ „umklappen“, sodass dieses (und nur dieses) ausgleichshalber umzupolen ist. Es ergibt sich denn auch

$$(3.8) \quad \mathcal{I} H_{allg}(\overrightarrow{A^{ps}}) \mathcal{I}^{-1} = H_{allg}(-\overrightarrow{A^{ps}})$$

und folglich über die untere Zeile der folgenden Beziehung

$$(3.9) \quad \Psi^{(K')} \equiv \begin{pmatrix} \Psi_{A\uparrow} \\ \Psi_{B\uparrow} \\ \Psi_{A\downarrow} \\ \Psi_{B\downarrow} \end{pmatrix}_{K'} = \begin{pmatrix} +\Psi_{A\downarrow} \\ +\Psi_{B\downarrow} \\ -\Psi_{A\uparrow} \\ -\Psi_{B\uparrow} \end{pmatrix}_K^* \left(-\vec{p}, -\vec{A}, -B_z \right)$$

$$(3.10) \quad = \begin{pmatrix} +\Psi_{B\uparrow} \\ -\Psi_{A\uparrow} \\ +\Psi_{B\downarrow} \\ -\Psi_{A\downarrow} \end{pmatrix}_K \left(-\overrightarrow{A^{ps}} \right)$$

die zweite, mithin sogar noch einfachere Möglichkeit, aus der Lösung für den K -Punkt jene für den anderen Punkt K' zu generieren. Der Index K , der hier jeweils noch summarisch angefügt wurde, kann also im Folgenden fortgelassen werden, und es genügt die Betrachtung eines Vierer-Spinors

$$(3.11) \quad \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_{A\uparrow} \\ \Psi_{B\uparrow} \\ \Psi_{A\downarrow} \\ \Psi_{B\downarrow} \end{pmatrix}$$

als Wellenfunktion. Deren Komponenten müssen, wie sich aus dem Vergleich der beiden rechten Seiten von (3.9) und (3.10) ergibt, die wichtigen Relationen

$$(3.12) \quad \Psi_{A\uparrow}^* = -\Psi_{B\downarrow} \left(-\vec{p}, -B_z - \vec{A}, -\overrightarrow{A^{ps}} \right)$$

$$(3.13) \quad \Psi_{B\uparrow}^* = +\Psi_{A\downarrow} \left(-\vec{p}, -B_z - \vec{A}, -\overrightarrow{A^{ps}} \right)$$

erfüllen.

3.2. Der Modell-Hamiltonian und seine Lösungen

Aus Gründen rechentechnischer Beherrschbarkeit soll im Folgenden lediglich der einfachstmögliche Fall, der (3.2) realisiert, behandelt werden, und das ist zunächst *ein* gänzlich homogener Bereich mit konstanten Parametern. Später können dann mehrere derartige Bereiche, die in der x-Richtung immer noch unbegrenzt sein sollen, mit in y-Richtung veränderlichen, jedoch abschnittsweise konstanten Parametern aneinandergesetzt werden. Es werden also die „Dotierungen“ Δ , λ und natürlich auch $b = \text{const}$ vorausgesetzt, ebenso wie die Verzerrungen, von denen schon jetzt angenommen werden soll, dass sich auch bei ihnen in der x-Richtung nichts tut, sodass also $u_{xx} = u_{xy} = 0$ und nur $u_{yy} =: u_0 = \text{const}$ ist. Damit wird aus (2.68) und (2.70) schlicht $A_x^{ps} = -\frac{3}{4}\kappa\beta t \cdot u_0 =: -A_0$, $A_y^{ps} = 0$ und $V_{pot} = g_D \cdot u_0 =: V_0$ mit den Konstanten A_0 und V_0 . Die gewünschte Verzerrung der Graphenschicht kann im Vorhinein durch ein entsprechendes Höhenprofil des Untergrundes oder nachträglich noch veränderlich durch dessen lokale Erwärmung sowie – bequemer, präziser und auch schneller steuerbar – durch den piezoelektrischen Effekt betätigt werden. Für die theoretische Behandlung auch komplizierterer Verzerrungsprofile genügt im Allgemeinen die Betrachtung stückweise konstanter Bereiche, an deren Grenzen zwar δ -funktionsartige Spitzen des Vektorpotentials entstehen, die sich aber – ähnlich wie bei der Methode der Greensfunktionen – zu glatteren und damit realistischeren Verläufen überlagern lassen, vgl. dazu auch [66]; dies gilt natürlich nicht, wenn wie in [67] durch die mechanische Verzerrung gerade ein konstantes Pseudo-Magnetfeld erzielt werden soll. Das echte Magnetfeld wird hingegen, wie es der Realität eher entspricht, auch in der hier vorliegenden Arbeit zumindest abschnittsweise konstant sein. Dies lässt sich, wenn x als Koordinate gänzlich vermieden werden soll, sehr einfach durch die Landau-Eichung

$$(3.14) \quad \vec{A} = \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} = B_z \cdot \begin{pmatrix} y_{0i} - y \\ 0 \end{pmatrix}$$

für dessen Vektorpotential erreichen. Dabei wurden die Konstanten y_{0i} , die nicht unbedingt mit den Bereichsgrenzen übereinzustimmen brauchen, eingefügt, um bei einer späteren Aneinanderfügung verschiedener Bereiche sonst eintretende Unstetigkeiten zu vermeiden. Da also die Koordinate x in (3.2) nicht mehr vorkommt, mithin zyklische Variable ist, ist der kanonisch konjugierte Impuls $p_x = \hbar k_x \equiv k_x$ eine Erhaltungsgröße; hingegen bleibt $p_y = -i\partial_y$ ein echter Operator. Somit wird (3.2), alles Vorgenannte in sich aufnehmend, durch die Setzung $\tau_z = +1$ auf den Punkt K spezifiziert und damit auf den Vierer-Spinor (3.11) wirkend, zu

$$(3.15) \quad H_{SOAS;B_z} = \sigma_x (k_x + B_z \cdot (y_{0i} - y) - A_0) - i\sigma_y \partial_y + \dots \\ + V_0 + bB_z \cdot s_z + \Delta \cdot \sigma_z s_z + \frac{\lambda}{2} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{s})_z .$$

Der an diesem, im Folgenden zugrunde gelegten Hamilton-Operator angebrachte Index soll darauf hinweisen, dass hier sowohl ein Magnetfeld in z-Richtung (Zusatz „ B_z “) als auch Spin-Bahn-Kopplungen (beiderlei Art) sowie mechanische Verzerrungen („SOAS“ = Spin Orbit And Strain) miteinbezogen wurden. Will man diesen in Matrixform schreiben, so gilt es, das im vorigen Abschnitt über die Matrizenmultiplikation Dargelegte zu beachten – nunmehr selbstredend ohne die Einbeziehung

der Matrix τ . Exemplarisch sei dies hier für den letzten Term in (3.15) vorgeführt

$$(3.16) \quad \frac{\lambda}{2} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{s})_z = \frac{\lambda}{2} \cdot (\sigma_x s_y - \sigma_y s_x) = \lambda \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

da sich hieraus explizit ersehen lässt, dass bei Anwendung auf den Spinor (3.11) lediglich dessen mittlere Komponenten durch λ verkoppelt werden, nicht jedoch die beiden äußeren. Die restlichen Operatorbestandteile von (3.15) verknüpfen hingegen nur Komponenten gleichen Spins, siehe (3.18). Somit ergibt sich, dass der in den Abschnitten 2.5 und 2.6 ausführlich besprochene Spinumklapp im K -Punkt allein zwischen den Zuständen $A\downarrow$ und $B\uparrow$ stattfindet (selbstverständlich in beiden Richtungen) und mithin der Gesamtspin, der sich additiv aus echtem und Pseudospin zusammensetzt, erhalten bleibt. Auch dies ist mithin ein Grund, nicht bloß in rein formaler Analogie vom Pseudo-Spin des Untergitters zu sprechen, sondern ihm darüber hinaus auch eine physikalische Realität zuzubilligen, wenngleich es zu berücksichtigen gilt, dass Letzterem, wie bereits oben erläutert, doch einige etwas andere Eigenschaften zuzuschreiben sind.

Im Einklang damit steht, dass, wie die direkte Rechnung bestätigt, indem man im letzten Term aus (3.2) $\tau_z = -1$ setzt, sich das Umklappen der Spins im anderen K -Punkt lediglich zwischen den zuvor unbeteiligten Zuständen $A\uparrow$ und $B\downarrow$ abzuspielen vermag, da in K' mit seinem formal umgekehrten Zeitverlauf zwar die Zuordnung der Spinrichtungen vertauscht zu denken ist, nicht jedoch die Zuordnung der Atome selbst zu ihren Untergittern.

Setzt man in (3.15) $B_z = +B > 0$ und bedient sich der Abkürzung

$$(3.17) \quad K := k_x + B \cdot y_{0i} - A_0$$

(B bezeichnet von nun ab immer den Betrag des Feldes unabhängig von seiner tatsächlichen Polung), so schreibt sich die Grundgleichung (3.5), die auf den nun von x nicht mehr abhängigen Spinor (3.11) wirkt, folgendermaßen:

$$(3.18) \quad \begin{pmatrix} V_0 - E + \Delta + bB & K - B \cdot y - \partial_y & 0 & 0 \\ K - B \cdot y + \partial_y & V_0 - E - \Delta + bB & +i\lambda & 0 \\ 0 & -i\lambda & V_0 - E - \Delta - bB & K - B \cdot y - \partial_y \\ 0 & 0 & K - B \cdot y + \partial_y & V_0 - E + \Delta - bB \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{A\uparrow}(y) \\ \Psi_{B\uparrow}(y) \\ \Psi_{A\downarrow}(y) \\ \Psi_{B\downarrow}(y) \end{pmatrix} = 0$$

Durch Multiplikation mit dem Faktor $-1/\sqrt{2B}$ sowie die Substitution

$$(3.19) \quad \eta := \sqrt{2B} \cdot \left(y - \frac{K}{B} \right)$$

(sodass $\partial_y = \sqrt{2B} \cdot \partial_\eta$ ist) schreibt sich dies kompakt als

$$(3.20) \quad \begin{pmatrix} \tilde{\nu}_{\uparrow-} & \frac{1}{2}\eta + \partial_\eta & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\eta - \partial_\eta & \tilde{\nu}_{\uparrow+} & -i\Lambda & 0 \\ 0 & +i\Lambda & \tilde{\nu}_{\downarrow+} & \frac{1}{2}\eta + \partial_\eta \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}\eta - \partial_\eta & \tilde{\nu}_{\downarrow-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{A\uparrow}(\eta) \\ \Psi_{B\uparrow}(\eta) \\ \Psi_{A\downarrow}(\eta) \\ \Psi_{B\downarrow}(\eta) \end{pmatrix} = 0.$$

Hierbei wurde von folgenden Abkürzungen Gebrauch gemacht: $\Lambda := \frac{\lambda}{\sqrt{2B}}$ sowie

$$(3.21) \quad \tilde{\nu}_{\uparrow\pm} := \frac{E - V_0 - bB \pm \Delta}{\sqrt{2B}}$$

$$(3.22) \quad \tilde{\nu}_{\downarrow\pm} := \frac{E - V_0 + bB \pm \Delta}{\sqrt{2B}}$$

Durch Einsetzen der ersten in die zweite und analog der letzten in die vorletzte Gleichung dieses Systems folgt:

$$(3.23) \quad \left(\partial_\eta^2 - \frac{1}{4}\eta^2 + \nu_\uparrow + \frac{1}{2} \right) \Psi_{B\uparrow}(\eta) = +i\Lambda\tilde{\nu}_{\uparrow-} \Psi_{A\downarrow}(\eta)$$

$$(3.24) \quad \left(\partial_\eta^2 - \frac{1}{4}\eta^2 + \nu_\downarrow - \frac{1}{2} \right) \Psi_{A\downarrow}(\eta) = -i\Lambda\tilde{\nu}_{\downarrow-} \Psi_{B\uparrow}(\eta)$$

Dabei wurde $\tilde{\nu}_{\uparrow+} \cdot \tilde{\nu}_{\uparrow-} \equiv \frac{(E-V_0-bB)^2 - \Delta^2}{2B} =: \nu_\uparrow$ und $\tilde{\nu}_{\downarrow+} \cdot \tilde{\nu}_{\downarrow-} \equiv \frac{(E-V_0+bB)^2 - \Delta^2}{2B} =: \nu_\downarrow$ zusammengefasst. Insgesamt ist also die Differentialgleichung vierter Ordnung

$$(3.25) \quad \left(\partial_\eta^2 - \frac{1}{4}\eta^2 + \nu_\downarrow - \frac{1}{2} \right) \left(\partial_\eta^2 - \frac{1}{4}\eta^2 + \nu_\uparrow + \frac{1}{2} \right) \Psi_{B\uparrow}(\eta) = \Lambda^2 \tilde{\nu}_{\uparrow-} \tilde{\nu}_{\downarrow-} \cdot \Psi_{B\uparrow}(\eta)$$

zu lösen. Bekanntlich wird (siehe etwa [68]) die einfacherere Gleichung zweiter Ordnung $(\partial_\eta^2 - \frac{1}{4}\eta^2 + p + \frac{1}{2}) \Phi(\eta) = 0$ durch die vier parabolischen Zylinderfunktionen $\Phi(\eta) = D_p(\eta), D_p(-\eta), D_{-(p+1)}(i\eta), D_{-(p+1)}(-i\eta)$ gelöst, von denen jedoch nur zwei voneinander linear unabhängig sind.

Welche Auswahl man auch immer trifft, um (3.25) zu befriedigen, muss der Index p die Gleichung

$$(3.26) \quad (\nu_\uparrow - p)(\nu_\downarrow - p - 1) = \Lambda^2 \tilde{\nu}_{\uparrow-} \tilde{\nu}_{\downarrow-}$$

erfüllen. Da außerdem auch noch $D_n(-\eta) = (-1)^n \cdot D_n(\eta)$ für $n \in \mathbb{N}_0$ ist, und Ähnliches für die beiden Funktionen mit den imaginären Argumenten gilt, werden hier die Ansätze $\Psi_{B\uparrow}(\eta) = \tilde{\nu}_{\uparrow-} \cdot D_p(\eta)$ und $\Psi_{B\uparrow}(\eta) = \tilde{\nu}_{\uparrow-} \cdot D_{-(p+1)}(-i\eta)$ gewählt, und man gelangt als Lösung der Gleichung (3.20) zu den Endresultaten

$$(3.27) \quad \Psi_{SOAS+B}^{(reell)}(\eta) = \begin{pmatrix} -p \cdot D_{p-1}(\eta) \\ \tilde{\nu}_{\uparrow-} \cdot D_p(\eta) \\ \frac{-i(\nu_\uparrow - p)}{\Lambda} \cdot D_p(\eta) \\ \frac{i(\nu_\uparrow - p)}{\Lambda \tilde{\nu}_{\downarrow-}} \cdot D_{p+1}(\eta) \end{pmatrix}$$

$$(3.28) \quad \Psi_{SOAS+B}^{(imag)}(\eta) = \begin{pmatrix} -i \cdot D_{-p}(-i\eta) \\ \tilde{\nu}_{\uparrow-} \cdot D_{-(p+1)}(-i\eta) \\ \frac{-i(\nu_\uparrow - p)}{\Lambda} \cdot D_{-(p+1)}(-i\eta) \\ \frac{(\nu_\uparrow - p)(p+1)}{\Lambda \tilde{\nu}_{\downarrow-}} \cdot D_{-(p+2)}(-i\eta) \end{pmatrix}.$$

Da der Index p als Lösung der quadratischen Gleichung (3.26) jedoch jeweils zweier Werte

$$(3.29) \quad p = p^\pm := \frac{1}{2}(\nu_\uparrow + \nu_\downarrow - 1) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\nu_\uparrow - \nu_\downarrow + 1)^2 + \Lambda^2 \tilde{\nu}_{\uparrow-} \tilde{\nu}_{\downarrow-}}$$

fähig ist, sind das, wie es bei einer Gleichung vierter Ordnung ja der Fall sein muss, auch insgesamt vier Lösungen. Schreibt man diese in Form einer Matrix, die später

benötigt wird, auf, so lautet sie folglich

$$(3.30) \quad \Omega_{SOAS+B}(y) = \left(\Psi_{SOAS+B}^{(reell)p^+}(\eta) \quad \Psi_{SOAS+B}^{(reell)p^-}(\eta) \quad \Psi_{SOAS+B}^{(imag)p^+}(\eta) \quad \Psi_{SOAS+B}^{(imag)p^-}(\eta) \right),$$

wobei sich das Argument nach (3.19) transformiert.

Für den Fall einer Richtungsumkehr des Magnetfeldes, also $B_z = -B < 0$, folgen die entsprechenden Lösungen

$$(3.31) \quad \Psi_{SOAS-B}^{(reell)}(\eta) = \begin{pmatrix} \frac{i(\nu_{\uparrow}-p)}{\Lambda \tilde{\nu}_{\uparrow-}} \cdot D_{p+1}(\eta) \\ \frac{i(\nu_{\uparrow}-p)}{\Lambda} \cdot D_p(\eta) \\ \tilde{\nu}_{\uparrow-} \cdot D_p(\eta) \\ p \cdot D_{p-1}(\eta) \end{pmatrix}$$

$$(3.32) \quad \Psi_{SOAS-B}^{(imag)}(\eta) = \begin{pmatrix} -\frac{(\nu_{\uparrow}-p)(p+1)}{\Lambda \tilde{\nu}_{\uparrow-}} \cdot D_{-(p+2)}(i\eta) \\ \frac{i(\nu_{\uparrow}-p)}{\Lambda} \cdot D_{-(p+1)}(i\eta) \\ \tilde{\nu}_{\uparrow-} \cdot D_{-(p+1)}(i\eta) \\ -i \cdot D_{-p}(i\eta) \end{pmatrix}$$

sofort aus den Relationen (3.12) und (3.13). Sie ergeben sich natürlich auch aus der direkten Rechnung. Einzelheiten dazu und weitere Erläuterungen finden sich im Anhang. Aus mathematischer Hinsicht ist somit der Aufgabenstellung Genüge getan, und ich kann mich nunmehr der physikalischen Deutung zuwenden. Beginnen soll diese mit einer Betrachtung des homogenen Bereiches.

3.3. Homogener Bereich: die erlaubten Energien und Zustände

Um die vorstehend erhaltenen Ergebnisse, die zunächst mehr rechentechnischer Art zu sein scheinen, schrittweise einer physikalischen Ausdeutung zuzuführen, werde in diesem Abschnitt ein homogener Bereich betrachtet, an dessen formal im Unendlichen liegenden Grenzen die Wellenfunktionen (3.27) oder (3.28) zu verschwinden haben. Für die in (3.27) enthaltenen Zylinderfunktionen $D_p(\eta)$ – wegen der Definition (3.19) geht mit y auch $\eta \mapsto \pm\infty$ – ist dies nur dann der Fall, wenn ihr Index $p \in \mathbb{N}_0$, also eine natürliche Zahl einschließlich Null ist. Die Funktionen mit imaginärem Argument $D_{-(p+1)}(-i\eta)$ in (3.28) gehen zwar für $p \in \mathbb{N}$ ebenfalls gegen Null, jedoch nicht schnell genug, um quadratintegabel und damit normierbar zu sein. Somit müssen letztere verworfen werden, und es verbleiben für den unendlich ausgedehnten homogenen Bereich lediglich die Funktionen (3.27) mit $p = 1, 2, 3, \dots$. Wegen ihres für $n \in \mathbb{N}_0$ gültigen Zusammenhanges mit den Hermite-Polynomen H_n reduzieren sich die beteiligten Zylinderfunktionen

$$(3.33) \quad D_n(\eta) = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{4}\eta^2\right) \cdot H_n\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\eta\right)$$

zu den von der Lösung des harmonischen Oszillators her bekannten Ausdrücken, und die Funktionen (3.27) lassen sich durch Voranstellen eines Faktors N_p normieren. Dieser berechnet sich über

$$(3.34) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} D_n(\eta) \cdot D_m(\eta) \cdot d\eta = \sqrt{2\pi} \cdot n! \cdot \delta_{nm}$$

für $n, m \in \mathbb{N}_0$ zu

$$(3.35) \quad N_p = \left\{ \sqrt{2\pi} \cdot \left[p + \tilde{\nu}_{\uparrow-}^2 + \left(\frac{\nu_{\uparrow} - p}{\Lambda} \right)^2 \cdot \left(1 + \frac{p+1}{\tilde{\nu}_{\downarrow-}^2} \right) \right] \cdot p! \right\}^{-1/2}.$$

Anders als in Kapitel 2 (siehe Gleichung (2.46) in Abschnitt 2.4) ist aber die Beziehung des Index mit der Energie, über die noch im Einzelnen zu berichten sein wird, im Allgemeinen deutlich komplizierter als im dort betrachteten Falle. Schreibt man nämlich die Beziehung (3.26), die der Index p zu erfüllen hat, auf die ursprünglichen Größen um, indem man die dabei vorgenommenen Abkürzungen (also (3.21) usw.) wieder einfügt, so erhält man die grundlegende Beziehung

$$(3.36) \quad \left[(E - V_0 - bB)^2 - \Delta^2 - 2pB \right] \cdot \left[(E - V_0 + bB)^2 - \Delta^2 - 2(p+1)B \right] = \lambda^2 \cdot \left[(E - V_0 - \Delta)^2 - (bB)^2 \right],$$

die die Abhängigkeit der Energie vom Magnetfelde und den anderen hier vorkommenden Größen angibt.

Es sei hier auf einen Wechsel in der Sichtweise aufmerksam gemacht: Im vorigen Abschnitt wurden jeder Energie E über die quadratische Gleichung (3.29) [deutlicher zu sehen für $b = 0$ aus (6.18) im Anhang] zwei verschiedene, im Allgemeinen nicht-ganzzahlige Werte p zugeordnet, die, in die beiden Funktionen (3.27) und (3.28) – letztere wurde hier verworfen – eingesetzt, insgesamt vier verschiedene Zustände als Realisierungen eben dieser Energie ergaben. Hier hingegen liefert jeder vorzugebende Wert des Parameters p – der Randbedingungen wegen wurde er auf die natürlichen Zahlen \mathbb{N} beschränkt – als Lösung der biquadratischen Gleichung (3.36) ebenso viele, nämlich vier Energieeigenwerte E . Da der dieser Gleichung zu Grunde liegende Hamilton-Operator (3.15) bzw. die daraus folgende Matrix (3.20) hermitesch ist [man beachte, dass $(\frac{1}{2}\eta + \partial_\eta)^+ = \frac{1}{2}\eta - \partial_\eta$ gilt], sind diese sämtlich reell und im Allgemeinen auch voneinander verschieden.

Jedoch büßt bei „geschickter“ Wahl der beteiligten Parameter, insbesondere dann, wenn, wie es im Folgenden geschehen soll, einige derselben gleich Null gesetzt werden, der letzte Teil der soeben gemachten Aussage seine Gültigkeit ein, und es kommt zu entsprechenden Entartungen. Zieht man noch die beiden Täler der Dispersionsrelation in Betracht, also die beiden Punkte K und K' , so ist jede Energie ohnehin zweifach entartet. Der Punkt K' , dessen Schicksal nach Abschnitt 3.1 gemäß diesem nicht weiter verfolgt wurde, und der bei nicht zu großen Energien vom Punkt K energetisch entkoppelt ist, besitzt ja eine vom Letztgenannten nur unwesentlich verschiedene Wellenfunktion: Laut (3.10) handelt es sich lediglich um eine wechselseitige Vertauschung der Komponenten mit gelegentlichem Vorzeichenwechsel sowie, falls auch eine mechanische Verzerrung vorliegt, zusätzlich noch um eine simple Verschiebung der Ortsabhängigkeit. All dies verändert jedoch weder die Form der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung noch den Wert der ihr zugehörigen Energie.

Wenn eingangs dieses Abschnittes gesagt wurde, dass der Index der in (3.27) auftretenden Zylinderfunktionen $D_p(\eta)$ ein ganzzahlig-natürlicher (einschließlich Null) sein müsse, so bedarf dies angesichts der Tatsache, dass der in Rede stehende Index dort in Wirklichkeit in dreierlei Gestalt auftritt, nämlich als $p+1$, p und $p-1$, einer besonderen Klärung. Um nämlich die Frage zu entscheiden, welcher Wert denn nun tatsächlich als sein niedrigst möglicher zu gelten hat, setzt man zunächst probeweise $p = 0$ in die Wellenfunktion (3.27) ein. Auch ohne besondere Festsetzung

darüber, was man eigentlich unter $D_{-1}(\eta)$ zu verstehen habe, verschwindet dieser Term des Faktors $p = 0$ wegen aus der obersten Komponente, und es wird

$$(3.37) \quad \Psi_0(\eta) = N_0 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\nu}_{\uparrow-} \cdot D_0(\eta) \\ -i\nu_{\uparrow} \cdot D_0(\eta) \\ \frac{\Lambda}{\Lambda\nu_{\downarrow-}} \cdot D_1(\eta) \end{pmatrix}.$$

(Außer dem in seinem Werte angegebenen Index p wurden hier alle anderen Bezeichnungen als für diesen Abschnitt selbstverständlich angenommen und deshalb ebenso wie in dem folgenden fortgelassen.) Da definitionsgemäß $\nu_{\uparrow} = \tilde{\nu}_{\uparrow+} \cdot \tilde{\nu}_{\uparrow-}$ ist, enthalten alle Komponenten den Ausdruck $\tilde{\nu}_{\uparrow-}$ als einen Faktor, der selbstverständlich nicht Null sein darf, ansonsten die Wellenfunktion (3.37) identisch verschwände. Formal lässt er sich natürlich mit dem Vorfaktor N_0 , der auch für $p = 0$ mit der allgemeinen Formel (3.35) berechnet werden kann und diesen dann ebenfalls enthält, herauskürzen. Wichtiger ist jedoch, dass der Faktor $E - V_0 - bB - \Delta \neq 0$, der wegen der Definition (3.21) der Ungleichung $\tilde{\nu}_{\uparrow-} \neq 0$ entspricht, aus der Energiegleichung (3.36) herausgekürzt wird. Diese vereinfacht sich dann zu

$$(3.38) \quad (E - V_0 - bB + \Delta) \cdot \left[(E - V_0 + bB)^2 - \Delta^2 - 2B \right] = \lambda^2 \cdot (E - V_0 - \Delta + bB),$$

also einer Gleichung dritten Grades, welche aufzeigt, dass der Zustand (3.37) nur mit lediglich drei Energiewerten zu realisieren ist, und zwar jenen, die (3.38) als Lösung zukommen. Die Energie $E = V_0 + bB + \Delta$ ist – von einer zufälligen Entartung abgesehen – mit (3.37) nicht kompatibel.

In der einfachen Betrachtung des Kapitels 2, Abschnitt 2.4, die den Spin nicht in Erwägung zog, wurde bereits festgestellt, dass der Grundzustand durch einen Zweier-Spinor zu beschreiben ist, dessen obere Komponente identisch verschwindet, während die untere dies nicht tut. In der hier notwendigen Verallgemeinerung auf Vierer-Spinore könnte dies zweierlei bedeuten, nämlich einerseits: nur die oberste Komponente ist gleich Null, oder andererseits: nur die unterste Komponente ist von Null verschieden. Der erstgenannte Fall liegt gerade beim Zustand (3.37) mit $p = 0$ vor; der Letztgenannte ergibt sich, wenn man in der Darstellung (3.27) der allgemeinen Lösung den Index der Zylinderfunktion in der untersten Komponente gleich Null setzt, also gleich demjenigen Werte, der nach der anfänglichen Überlegung als niedrigster dafür überhaupt in Frage kommt, und die übrigen Funktionen, die allesamt niedrigere Indices tragen, völlig auslöscht. Damit ergibt sich

$$(3.39) \quad \Psi_{-1}(\eta) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ D_0(\eta) \end{pmatrix} \equiv \frac{\exp(-\frac{1}{4}\eta^2)}{\sqrt[4]{2\pi}} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Ohne Knoten aufzuweisen ist diese bereits normierte Funktion mit $p = -1$ zweifellos der Grundzustand. Naturgemäß kommt diesem auch nur eine einzige Energie, nämlich

$$(3.40) \quad E = V_0 + \Delta - bB$$

zu; dies erkennt man unmittelbar durch Einsetzen in (3.20) am Verschwinden des Koeffizienten $\tilde{\nu}_{\downarrow-}$.

Obzwar es durchaus festgehalten zu werden verdient, dass die Indices $p = -1$ und $p = 0$ zusammengenommen ebenso viele, nämlich *vier* Zustände liefern, wie dies jeder der folgenden Werte $p \in \mathbb{N}$ für sich alleine tut, erhellt sich daraus noch nicht deren endgültige Einteilung. Einen ersten Hinweis auf dieselbe erhält man bereits aus der Tatsache, dass die soeben gemachte Feststellung über (3.39) als den Grundzustand der Teilchen mit der Energie (3.40) selbstverständlich nur auf die Teilchen im engeren Sinne zu beziehen ist, während sich, den relativistischen Gegebenheiten entsprechend, das Spektrum der Löcher ebenso unbegrenzt ins energetisch Negative zu erstrecken bestrebt sein wird wie jenes der Teilchen ins positiv Unendliche – wenigstens solange, wie man bereit ist, von den tatsächlichen, durch die Kohlenstoffatome bestimmten Gegebenheiten im Graphen abzusehen.

Bemerkenswert in diesem Zusammenhang ist außerdem, dass einer der drei Zustände (3.37) mit zunehmender Feldstärke, insbesondere für $B \gg \lambda^2$, ziemlich flach verläuft und damit (3.40) ähnelt. Die erste Klammer von (3.38) muss nämlich bei unbegrenzt anwachsender eckiger Klammer auf derselben und kleinem Faktor λ^2 auf der anderen Seite dieser Gleichung sehr nahe bei Null liegen, sodass

$$(3.41) \quad E = V_0 + bB - \Delta + \mathcal{O}\left(\frac{1}{B}\right)$$

ist.

Jeder der vorstehend aufgeführten Punkte rechtfertigt eine detailliertere Untersuchung der Energiebeziehung (3.36); insgesamt gesehen wird diese sogar unerlässlich.

Wie eingangs dieses Abschnittes gesagt wurde, soll in diesem ein homogener Bereich betrachtet werden, der sich durch konstante Parameter A_0 , V_0 , Δ , λ und b auszeichnet. Dies schließt natürlich nicht die Möglichkeit aus, dass der eine oder andere, eventuell auch mehrere der genannten Werte konstant gleich Null sind, wodurch sich gewisse, zum Teil sogar recht beträchtliche Vereinfachungen ergeben.

Bevor nun die entsprechenden Sonderfälle im Einzelnen abgehandelt werden, sollen noch zwei allgemeine Bemerkungen vorausgeschickt werden: Erstens bewirkt, wie sich bereits aus (3.15) ergibt, das konstante Potential V_0 nur eine simple Verschiebung des Energienullpunktes und wird daher im Folgenden fortgelassen. Es wird gewissermaßen genau so in E absorbiert wie A_0 in k_x (siehe 3.17), nur dass die beiden zuletzt genannten Größen ohnehin keinen Einfluss auf die Energie haben. Denn angesichts der Tatsache, dass die Dirac-Weyl-Teilchen im Magnetfeld einer dauernden Ablenkung unterliegen, verliert k_x auch anschaulich seinen Zusammenhang mit der sich dabei nicht ändernden Energie und ist daher keine gute Quantenzahl mehr.

Die zweite Überlegung bezieht sich auf die Frage einer möglichen Symmetrie der durch (3.36) gegebenen Energiewerte, das heißt darauf, ob zu der Energie $+E$ eines Teilchenzustandes automatisch auch die Energie $-E$ eines Antiteilchenzustandes gehört und umgekehrt. Da soeben $V_0 = 0$ gesetzt wurde, ist der Bezugspunkt der Energiezählung und folglich die Symmetrieachse natürlich $E = 0$. Sogenannte Nullmoden, also Zustände, die unabhängig von B stets die Energie $E \equiv 0$ ausweisen, sind als solche grundsätzlich nur in den Fällen a) und c) möglich (siehe dazu weiter unten). In allen anderen Fällen kann $E = 0$, wenn überhaupt, nur als Ausnahme mit ganz bestimmten Werten der magnetischen Feldstärke B realisiert werden. (Die – zumindest rechnerisch – triviale Anpassung des Parameters V_0 scheidet nach dessen Nullsetzung natürlich aus.)

3.3.1. Vierfache Fallunterscheidung

Zum Zwecke der bereits angekündigten Untersuchung der einzelnen Fälle werden nun die verbleibenden Parameter, nämlich b des Zeeman-Effektes sowie Δ und λ der Spin-Bahn-Kopplung, zunächst alle gleich Null gesetzt, um sie dann, einen nach dem anderen, wieder einzuschalten. Von den sich dabei prinzipiell ergebenden acht Möglichkeiten müssen nicht alle getrennt behandelt werden, sondern es können, da in (3.36) die Terme bB und Δ , in der Gesamtschau gesehen, in recht ähnlicher Weise auftreten [siehe dazu auch (3.21) und (3.22)] *zweimal drei Fälle zusammen* erfasst werden. Somit handelt es sich also insgesamt noch um vier Fälle, und zwar sind dies die folgenden:

Fall a) Die einfachste Möglichkeit, nämlich die wohlbekanntes Landau-Niveaus liefert $b = \Delta = \lambda = 0$. Aus (3.36) folgt dann sofort $E^2 = 2pB$ bzw. $E^2 = 2(p+1)B$. Der Grundzustand $E = 0$ kann also sowohl mit $p = 0$ als auch mit $p = -1$ realisiert werden. Während $p = -1$ jedoch *nur* den Grundzustand liefert – es passt lediglich in die zweite Form –, kann der Wert $p = 0$ in beide Formeln eingesetzt werden und liefert dann *auch* den ersten Anregungszustand (der Teilchen bzw. den der Löcher).

Zwecks einheitlicher Schreibweise und besserer Vergleichbarkeit mit (2.47) setzt man zweckmäßigerweise

$$(3.42) \quad N = p + \frac{1}{2}(1 - s_z),$$

dann ist (wie zuvor)

$$(3.43) \quad E = \pm\sqrt{2N \cdot B}.$$

Dabei entstammt der Term $p + \frac{1}{2}$ der hier möglichen Abbildung auf den harmonischen Oszillator incl. Nullpunktenergie; siehe [34]. Den Zusammenhang mit der Spinquantenzahl $s_z = \pm 1$ (siehe Tabelle 2.1) und die richtige Zuordnung entnimmt man am besten unmittelbar aus der Gleichung (3.26) mit $\Lambda = 0$. Allerdings darf aus (3.42) nicht der Fehlschluss gezogen werden, dass der reale Spin irgendeinen direkten Einfluss habe, denn der echte Zeeman-Term, der ohnehin nur schwach ausgeprägt ist, wurde ja für den betrachteten Fall gerade gleich Null gesetzt. Hier ist vielmehr der Pseudospin (mit seinem Zeeman-artigen Term $\sigma_z B$) am Werke; dies wurde bereits im Zusammenhang mit der Gleichung (2.36) in Abschnitt 2.4 erklärt und findet seine entsprechende Erhärtung hier wie folgt: Betrachtet man die Indices in den Zylinderfunktionen der Wellenfunktion (3.27) [wegen $\Lambda = 0$ sind korrekter Weise stattdessen die Funktionen (6.8) und (6.10) des Anhangs zu benutzen], so findet sich bei Anwendung der Schreibweise (3.42) analog zu (2.46) in den A -Komponenten stets $N - 1$ als Index, in den B -Komponenten hingegen immer der Index N .

Von der Quantenzahl N ausgehend sind also die Zustände (3.43) mit Ausnahme von $N = 0$ aufgrund des Spins allesamt zweifach entartet, da jeder Zustand $N \neq 0$ sowohl mit $N = p \in \mathbb{N}$ und $s_z = \uparrow$ als auch mit $p = N - 1$ und $s_z = \downarrow$ realisiert wird. Da außerdem noch die Entartung in den beiden Tälern K und K' – mit dem Übergang von der achtkomponentigen Wellenfunktion (3.3) auf die vierkomponentige (3.11) wurde nur noch eines derselben betrachtet – hinzutritt, sind alle Zustände (3.43) je vierfach entartet. Im Ergebnis gilt dies auch für den Zustand $N = 0$, also für die Nullmode, zu der alle anderen Energien symmetrisch angeordnet sind. Obwohl hier beide Vorzeichen in (3.43) zum selben Resultat $E \equiv 0$ führen, weist auch dieser Zustand keine insgesamt höhere Entartung auf, da, wie im nächsten

Abschnitt noch auszuführen sein wird, allein bei diesem eine strenge Verkopplung von Spin und Valley vorliegt, wie sie bei den anderen Zuständen in dieser Form nicht gegeben ist.

Diese an sich bekannten Feststellungen – sie werden u.a. durch den QHE [5, 6] bestätigt – sollten hier nochmals getroffen werden, um in den folgenden, komplizierteren Fällen als Vergleich und Richtschnur dienen zu können.

Fall b) Es sei $\lambda = 0$, aber $(\Delta, b) \neq 0$, also mindestens einer der beiden Parameter Δ oder b ungleich Null. Wegen $\lambda = 0$ entkoppelt (3.36) immer noch, und die zulässigen Energien ergeben sich bei Verwendung der Schreibweise (3.42) zu

$$(3.44) \quad E = bB \cdot s_z \pm \sqrt{\Delta^2 + 2N \cdot B}.$$

Man erkennt, dass die Zusatzterme bB und Δ in durchaus unterschiedlicher Weise zu (3.43) hinzutreten: Während die Kopplung Δ des Spins pythagoräisch und damit unabhängig von dessen Ausrichtung in die Energie hineingeht, wird der Zeeman-Term algebraisch hinzugefügt und mit einem von der Spineinstellung abhängigen Vorzeichen erfasst. Für den feldfreien Fall $B = 0$ verbleibt nur die Aufspaltung $\pm\Delta$ nach Kane und Mele [40]. Die Spinentartung ist für $b \neq 0$ aufgehoben, und damit sind auch schon alle derartigen Fälle erschöpft, denn für $\lambda \neq 0$ sind die Spins miteinander verkopplert. Für $b \neq 0$ muss für den Übergang $E \mapsto -E$ nicht nur das Vorzeichen vor der Wurzel, sondern auch die Richtung des Spins (oder diejenige des Magnetfeldes) umgekehrt werden. Das über die Valleyentartung Gesagte bleibt nach wie vor, also auch in den folgenden Fällen bestehen – und zwar inclusive des *caveat* bezüglich jener Zustände, die aus der Nullmode hervorgehen.

Fall c) Nun sei allein $\lambda \neq 0$, während der Einfachheit halber $\Delta = b = 0$ sein möge. Aus (3.36) ergibt sich eine quadratische Gleichung für E^2 [sic] mit der Lösung

$$(3.45) \quad E^2 = (2p + 1)B + \frac{1}{2}\lambda^2 \pm \sqrt{\left(B + \frac{1}{2}\lambda^2\right)^2 + 2pB \cdot \lambda^2}.$$

Von Emmanuel I. Rashba wurde diese Gleichung bereits in [24] angegeben; sie wird hier als Sonderfall reproduziert. Um sie entsprechend einzuordnen, sollen auch hier wieder einige ergänzende Erläuterungen angefügt werden: Für $p \geq 1$ ist die Wurzel stets kleiner als die Summe der ihr vorangestellten Terme, und es ergeben sich für E vier Lösungen, zwei positive und zwei negative, mit perfekter Symmetrie bezüglich $E = 0$. Für $p = -1$ und $p = 0$, wenn die Wurzel den restlichen Termen gleich wird, treten derartige Nullmoden auch tatsächlich auf. Vorsicht ist jedoch geboten, damit keine scheinbaren zu den echten Lösungen hinzutreten; insgesamt müssen sich, wie oben, deren wieder vier ergeben.

Eine sorgfältige Analyse liefert folgendes Bild: Für $p = -1$ ist nur ein Zustand mit der Energie $E = 0$ (vgl. 3.40) und der Wellenfunktion (3.39) möglich. Für $p = 0$ ergibt sich *eine* weitere Nullmode [zur Energie vgl. (3.41)] mit der Wellenfunktion

$$(3.46) \quad \Psi_0^{E=0}(\eta) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi} \cdot \sqrt{1 + \Lambda^2}} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ D_0(\eta) \\ 0 \\ -i\Lambda \cdot D_1(\eta) \end{pmatrix}.$$

Zwei weitere Zustände mit von Null verschiedener Energie $E = \pm\sqrt{2B + \lambda^2}$ ergeben sich leicht aus (3.37) und entsprechen dem ersten Landau-Niveau der Elektronen bzw. Löcher.

Fall d) ist der komplizierteste und interessanteste zugleich, stellt er doch mit $\lambda \neq 0$ und $(\Delta, b) \neq 0$ die simultane Verallgemeinerung der einfacheren Landau-Niveaus aus Fall a) in Richtung der beiden Fälle b) und c) gleichzeitig und damit in ihrer gegenseitigen Beeinflussung dar. Es werden hier also die Rashba-Kopplung und mindestens eine weitere Wechselwirkung des Spins, nämlich entweder seine intrinsische Kopplung oder aber diejenige mit einem äußeren Magnetfeld, also der (echte) Zeeman-Term, im allgemeinen jedoch beide, betrachtet. Leider lässt sich nun allerdings die Energie nicht mehr in derart einfacher Weise wie in den zuvor behandelten Fällen aus der Formel (3.36) extrahieren. Wenngleich auch die Auflösung einer quartischen Gleichung bekanntlich noch prinzipiell machbar sein sollte, so muten die im vorliegenden Falle sich dabei ergebenden Ausdrücke doch dermaßen länglich und kompliziert an, dass eine sinnvolle Information ihnen entnehmen zu wollen so gut wie vergeblich erscheint. Aus diesem Grunde wird an vorliegender Stelle auf eine Wiedergabe derselben verzichtet. Stattdessen sollen einige numerische Berechnungen in Form graphischer Darstellungen [siehe Abb. 3.1 bis 3.5] präsentiert werden.

Lediglich für $B = 0$, also den Startpunkt der Verläufe in Abb. 3.1, kann (3.36) einfach gelöst werden: für die Ordinaten ergibt sich $E = \pm\lambda - \Delta$ sowie (als doppelte Lösung) $E = \Delta$. Natürlich sind dies genau jene Werte, die uns in Abschnitt 3.5, wo der feldfreie Fall eine gesonderte Betrachtung erfahren wird, als Intervallgrenzen wiederbegegnen werden – *Grenzen* der Energieintervalle (3.80) deshalb, weil dort $q_{y,\alpha}$ wegen $B = 0$ wieder eine gute Quantenzahl wird und die Energie (3.72) mitbestimmt, und auch k_x ein Gleiches tut, anstatt über (3.17) und (3.19) nur die räumliche Lage der Wellenfunktionen zu verschieben.

3.3.2. Übergänge im Hoch- und Niedrigfeldbereich

Es erscheint angebracht, an dieser Stelle jene Werte zu nennen und sie kurz zu rechtfertigen, die für die soeben erwähnten Parameter Δ und λ im Rest dieses Kapitels fast ausschließliche Verwendung finden sollen. Zwar ist es, um ihre Wirkung möglichst deutlich hervortreten zu lassen, wünschenswert, diese so groß als möglich zu wählen; dabei soll die Wahl jedoch nicht unrealistisch erfolgen, sondern im Einklang stehen mit den Ergebnissen anderer Forscher, wie sie in Abschnitt 2.6 dargelegt wurden. Unter diesen Gesichtspunkten kann folgendes Wertepaar sowohl als zweckmäßig wie auch sinnvoll erachtet werden:

$$(3.47) \quad \lambda = 13 \text{ meV} \quad \& \quad \Delta = 3 \text{ meV}$$

$\lambda = 13 \text{ meV}$ wurde unmittelbar aus der experimentellen Arbeit [53] entnommen; auch Rashba benutzt ihn unter Berufung auf diese Autoren in seinem weiter oben angeführten Artikel [24]. Der auf eine glatte Zahl abgerundete Wert $\Delta = 3 \text{ meV}$ lehnt sich an die theoretische Voraussage $2\Delta = 7 \text{ meV}$ für adsorbiertes Indium in [18] an und kann durch eine etwas geringere Bedeckung auch entsprechend eingestellt werden. Für Thallium ergäbe sich laut [18] sogar eine Aufspaltung von 21 meV, sodass (mit einer entsprechenden Erhöhung bzw. Erniedrigung des Bedeckungsgrades) neben den Standardwerten (3.47) auch eine vertauschte Zuordnung derselben, also $\Delta = 13 \text{ meV}$ und $\lambda = 3 \text{ meV}$, als realistisch erreichbar erscheint. Eine derartige Reversion der Parameterwerte ist, wie in Abschnitt 2.5 ausgeführt, erforderlich, um bei $B = 0$ in den isolierenden (normalen) QSH-Zustand mit vorhandener Energielücke zurückzukehren, und soll bei entsprechender Gelegenheit zuweilen auch hier zu Zwecken des Vergleiches vorgenommen werden. Wenn aber nicht

ausdrücklich etwas anderes gesagt wird – und selbstverständlich auch von jenen Bereichen abgesehen, in denen überhaupt keine Spin-Bahn-Kopplung vorhanden sein soll – gelten also stets die Standardparameter (3.47).

Für die Kopplungskonstante b des Zeeman-Terms wurde, wenn diese nicht wie in Abschnitt 3.6 und 3.7 eine gänzliche Vernachlässigung erfahren soll, immer der tatsächliche Wert $b = \frac{1}{2}g_e\mu_B$ mit $g_e = 2,00232$ und $\mu_B = 9,27401 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$ verwendet.

Es folgt eine Beschreibung der numerischen Ergebnisse respektive ihrer graphischen Darstellungen. Wie bereits erwähnt, starten die Verläufe der Kurven E vs. B in Abb. 3.1 nicht mehr mit $E = 0$, sondern bei $\pm\lambda - \Delta$ und Δ , um sich dann, dank einer verminderten Krümmung, denjenigen Landau-Niveaus anzunähern, zu welchen sie sich bei Nullsetzung der Parameter Δ , λ und b wieder zurückentwickeln würden. Zwecks Vergleich und Bezugnahme auf die letzteren wurde die in Abb. 3.1 erstmalig benutzte und dort erläuterte Nomenklatur eingeführt.

Im Niedrigfeldbereich – damit seien Feldstärken unterhalb von einem Tesla bezeichnet – sind die durch die verschiedenen Wechselwirkungen bedingten Aufspaltungen der Niveaus $N = 0$ und $N = 1$ unverkennbar. (Zum System der Niveaus $N = 2$ sind auch noch die Zustände 2^+ und 2^- hinzuzunehmen, die, zur Quantenzahl $p = 2$ gehörig, der Übersichtlichkeit halber hier bereits nicht mehr eingezeichnet wurden.)

Bei größeren Feldstärken, also im Hochfeldbereich – experimentell sind hier durchaus Werte bis zu 20 ... 30 T erreichbar – nähert sich der Verlauf der Energieniveaus (3.36) den liegenden Parabelästen der reinen Landau-Niveaus (3.43) sehr stark an. Einer Abbildung, die sich nicht bloß auf einen einzelnen und dabei entsprechend vergrößerten Ausschnitt beschränken wollte, ließen sich des notwendigerweise stark zusammengestauchten Energiemaßstabes auf der Ordinatenachse wegen die Unterschiede kaum noch entnehmen, und einer solchen wird deshalb hier auch weiter kein Platz eingeräumt. Als sinnvoller wird stattdessen eine Darstellung erachtet, die diese Unterschiede direkt aufzeigt, und wie sich der entsprechenden Abbildung 3.2 unschwer entnehmen lässt, liegen selbige im Bereich weniger meV. Desweiteren wird unmittelbar evident, dass es (zumindest bei der hier verwendeten Parameterwahl) unrichtig wäre, zu sagen, die Annäherung an die Landau-Niveaus erfolge asymptotisch. Im Gegenteil: bei Feldern in der Größenordnung $B_{eq} \approx 10 \dots 15 \text{ T}$ (die genauen Werte sind in Tab. 3.1 ausgewiesen) werden die Energien der Landau-Niveaus erreicht, um anschließend, das heißt bei weiterer Erhöhung des Feldes, wieder davon abzuweichen – diesmal in der anderen Richtung. Schon hier sei vorweggenommen, dass der Grund für ein derartiges Überkreuzen der Landau-Niveaus im Zeeman-Terme zu verorten ist (weiter unten dazu mehr).

Diese Überkreuzungen¹ könnten als von rein akademischem Interesse angesehen werden, bedeuten sie doch lediglich, dass bei einer ganz bestimmten, genau

¹Die beiden weiteren Überkreuzungen (oberer und unterer Kreuzungspunkt) mit $\Delta E \neq 0$ bei rund 13 Tesla (es handelt sich um zwei leicht unterschiedliche Werte, nämlich 13,044 T für 1^+ mit 1^{++} sowie 13,140 T für 0^{++} mit 2^+) sind ohne Belang, bedeuten sie doch nur, dass zwei weit voneinander entfernt verlaufende Niveaus (siehe Abb. 3.3), die auch sonst wenig miteinander gemein haben, da sie zu Landau-Niveaus mit *unterschiedlichem* N gehören, sich bei der Annäherung an das ihnen zuzuordnende Landau-Niveau in einem jeweils gleichen energetischen Abstand von demselben befinden. Dabei ist es sogar so, dass dem einen der beiden aufgespaltenen Niveaus die Überkreuzung noch bevorsteht, während sie das andere bereits vollzogen hat und sich schon wieder von seinem Landau-Niveau entfernt.

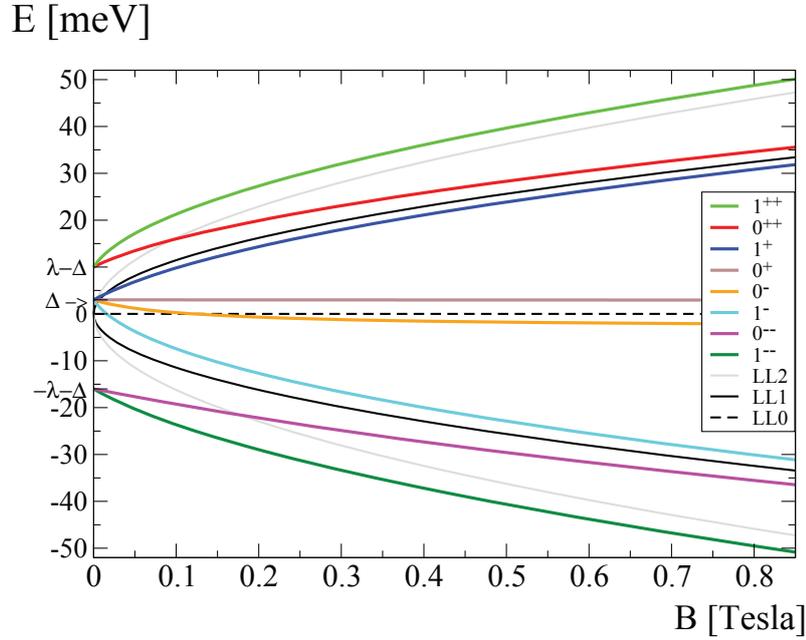


ABBILDUNG 3.1. Die Energieniveaus (3.36) mit $p \leq 1$ und $V_0 = 0$ in Abhängigkeit von der magnetischen Feldstärke B im Niedrigfeldbereich. Zusätzlich sind unbunt diejenigen „reinen“ Landau-Niveaus (3.43) mit $N = 0, 1, 2$ eingezeichnet, in welche sie bei fehlender Kopplung $b = \Delta = \lambda = 0$ übergehen. Dabei wurde die folgende Bezeichnungsweise verwendet, von der auch im Haupttext Gebrauch gemacht wird: $p^{(VZ)}$. Zunächst wird der Wert von p angegeben; nur wird dieser, falls er gleich -1 ist, im Sinne der über die Anzahl der Zustände gemachten Ausführungen und zur Vereinheitlichung der Schreibweise ebenfalls als „0“ aufgezählt. Der hochgestellte Index mit einfachem oder doppeltem Vorzeichen (VZ) nummeriert dann die zu einem gemeinsamen p gehörigen Zustände in der Reihenfolge abnehmender Energie durch: $++$, $+$, $-$, $--$. Dies erlaubt eine Zuordnung sowohl zu den Energien bei $B = 0$ [beim hier gewählten Parametersatz (3.47) startet „ $++$ “ bei $\lambda - \Delta$, „ $--$ “ dagegen bei $-\lambda - \Delta$, das einfache Vorzeichen beiderlei Art hingegen bei Δ] als auch zu den reinen Landau-Niveaus LLN , in die die Energien (3.36) einmünden, wenn besagte Parameter verschwinden: Die Art des Vorzeichens stimmt mit jenem in (3.43) überein; falls es sich um ein verdoppeltes Vorzeichen handelt, gilt $N = p + 1$, ansonsten ist $N = p$.

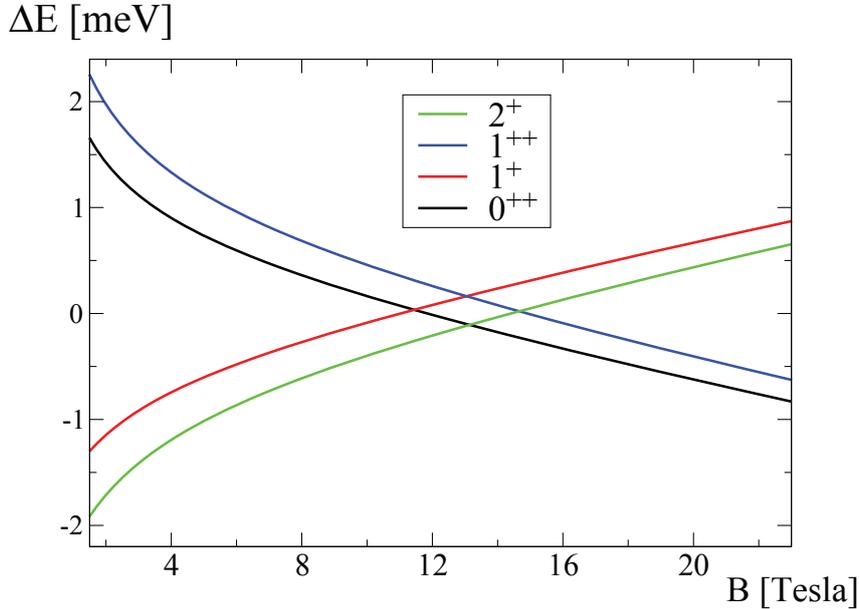


ABBILDUNG 3.2. Abweichung der Energie der Zustände 0^{++} , 1^+ , 1^{++} und 2^+ von ihrem jeweiligen Landau-Niveau (LL1 bzw. LL2) in Abhängigkeit vom Magnetfeld; Gleichheit mit diesen liegt für die in der Tabelle 3.1 genannten Werte vor. Für $B_{cr1} = 11,44$ T und $B_{cr2} = 14,66$ T [siehe Tabelle 3.2 – diese Werte liegen *nicht* bei $\Delta E = 0$] erfolgt hingegen ein jeweils paarweises Zusammentreffen untereinander; vgl. dazu auch Abb. 3.4.

spezifizierbaren Feldstärke eines der (zahlreichen) Niveaus eine Energie annimmt, wie sie ihm auch dann zukäme, wären die diversen Kopplungen des Spins erst gar nicht vorhanden. Spannender sind hingegen jene Punkte – in der Abbildung sind das linker und rechter Eckpunkt der sich durch die Kurven ergebenden Raute –, in denen die Abweichung der Energie zweier *demselben* Landau-Niveau zuzuordnenden Zustände dieselbe ist, signalisiert dies doch letzten Endes, dass sie zwar nicht ihrem gemeinsamen Landau-Niveau, dafür aber untereinander energiegleich, mithin also entartet sind. Tab. 3.2 weist die entsprechenden Daten der Kreuzungs- bzw. Entartungspunkte aus. Abb. 3.3 zeigt, wie wenig sich die betreffenden Zustände auch jenseits dieser Punkte in ihrer Energie voneinander unterscheiden; die Differenzen selbst verdeutlicht Abb. 3.4. Es soll nicht unerwähnt bleiben, dass für den Fall vertauschter Parameterwerte die Feldstärken B_{cr} , bei denen diese Entartungen auftreten, um eine volle Größenordnung niedriger ausfallen, siehe Tab. 3.3.

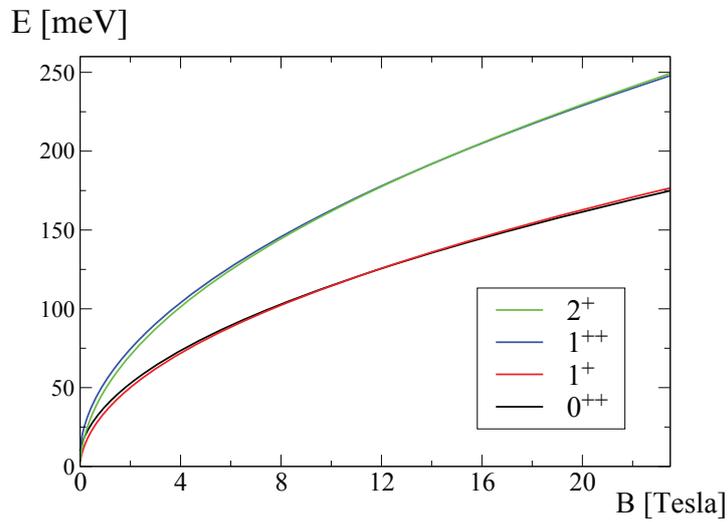


ABBILDUNG 3.3. Verlauf der Energie-Niveaus 0^{++} , 1^+ , 1^{++} und 2^+ nach Gleichung (3.36) in Abhängigkeit vom Magnetfeld.

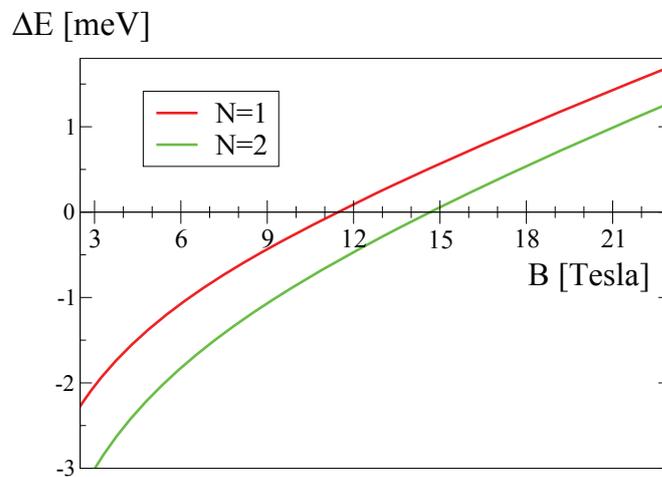


ABBILDUNG 3.4. Größe bzw. Kleinheit der Aufspaltungen: Energiedifferenzen $\Delta E_{N=1} = E_{1^+} - E_{0^{++}}$ und $\Delta E_{N=2} = E_{2^+} - E_{1^{++}}$ der in Abb. 3.3 gezeigten Zustände in ihrer Abhängigkeit vom Magnetfeld.

Zustand	B_{eq} / Tesla	E / meV
0^{++}	11,848	124,80
1^+	11,019	120,36
1^{++}	14,907	197,97
2^+	14,405	194,61

TABELLE 3.1. Äquivalente Feldstärken im Hochfeldbereich: Werte derjenigen Feldstärken B_{eq} , bei denen Lösungen der Gleichung (3.36) mit den reinen Landau-Niveaus (3.43) übereinstimmen, und die dazu gehörigen Energien E .

Übergang	B_{cr} / Tesla	E / meV
0^{++} mit 1^+ ($N = 1$)	11,442	122,68
1^{++} mit 2^+ ($N = 2$)	14,659	196,34

TABELLE 3.2. Überkreuzungen im Hochfeldbereich: Werte derjenigen Feldstärken B_{cr} , bei denen zwei Lösungen der Gleichung (3.36) zusammenfallen, und die dazu gehörigen Energien E .

Übergang	B_{cr} / Tesla	E / meV
0^{++} mit 1^+ ($N = 1$)	1,002	38,55
1^{++} mit 2^+ ($N = 2$)	1,589	65,93

TABELLE 3.3. Überkreuzungen bei invertiertem Parametersatz: Wie Tabelle 3.2, aber mit vertauschten Parametern für die Spin-Bahn-Kopplung. Es ergeben sich sehr viel niedrigere Feldstärken.

Absolut bemerkenswert ist jedoch, dass in beiden Fällen (und auch mit weiteren, probenhalber angenommenen Parametersätzen) für $b = 0$ keine derartige Überkreuzung auftrat: auch bei noch so hoher Feldstärke gab es weder eine Übereinstimmung mit dem Landau-Niveau noch irgendeine Gleichheit (Entartung) der *zusammengehörigen* Niveaus untereinander. Dies erweist den Zeeman-Effekt als ursächlich für das vorstehend beschriebene Verhalten der Energie in Abhängigkeit von der Stärke des Magnetfeldes: Der Zeeman-Term (3.1) ist wesentlich, um die durch die verschiedenen Spin-Bahn-Kopplungen herbeigeführten Verschiebungen der Energie kompensatorisch wieder zurückzutreiben. Da in ihn die magnetische Feldstärke B jedoch linear hineingeht, während sonst eine Proportionalität zur Wurzel derselben besteht – siehe in den Fällen a) bis c) die Formeln (3.43), (3.44) [mit $b = 0$] und (3.45) –, kommt es bei weiterem Zuwachs der Feldstärke zu der bereits geschilderten Überkompensation der energetischen Effekte.

Diese Zusammenhänge, jedenfalls in vergleichend-heuristischer Weise zu erfassen, gestattet bereits die vorstehend genannte, gegenüber dem vollständigen Ausdruck (3.36) in mathematischer Hinsicht deutlich einfachere Formel (3.44): Ohne den Zeeman-Term liegt die durch sie gegebene Energie (betragsmäßig) stets höher als der Wert (3.43) des entsprechenden reinen Landau-Niveaus und nähert sich diesem für $B \mapsto \infty$ bloß asymptotisch an. *Mit* dem Zeeman-Term aber ist für eine

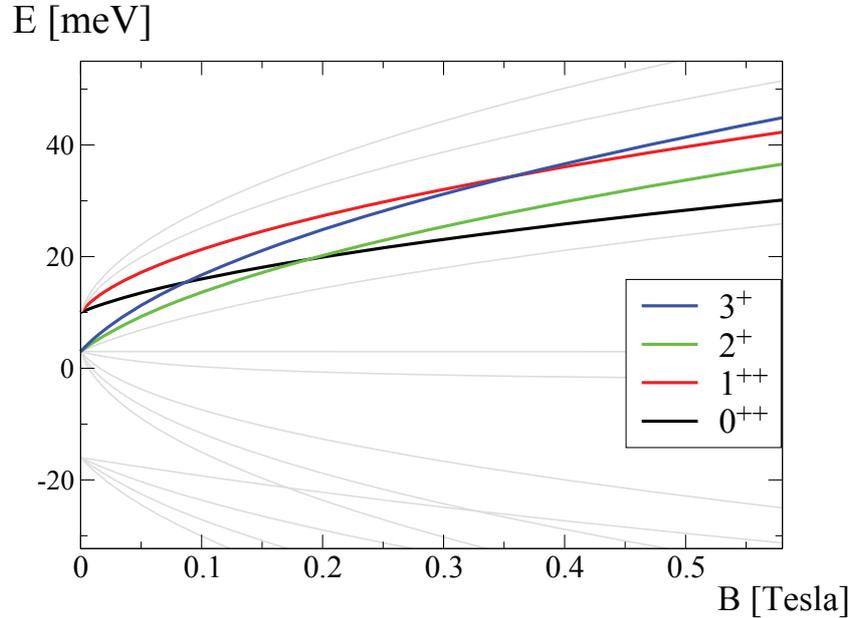


ABBILDUNG 3.5. Ähnlich wie Abb. 3.1, jedoch sind jene Zustände durch Strichdicke und Farbwahl hervorgehoben, auf die im Text Bezug genommen wird. Das dortselbst erläuterte Durchlaufen der Folge $3^+ \mapsto 0^{++} \mapsto 2^+$ für das Fermi-Niveau bleibt auch dann bestehen, wenn weitere, der Übersichtlichkeit halber hier nicht eingezeichnete Niveaus in die Betrachtung mit einbezogen werden.

bestimmte Feldstärke (und bei einer bestimmten Einstellung des Spins) eine Kompensation möglich. Die soeben in der Parantese gemachte Einschränkung wird aber bei einer Verkopplung der Spins obsolet – bei $\lambda \neq 0$ gibt es [abgesehen vom Grundzustand (3.39)] keine definierte Spineinstellung mehr. Die jetzt „vermischten“ Zustände können beide, bei jeweils einer etwas anderen Feldstärke, energetisch mit dem reinen Landau-Niveau zusammenfallen. Und, bedenkt man den kompletten Sachverhalt noch weiter, so auch miteinander.

Im Niedrigfeldbereich treten ebenfalls energetische Entartungen auf, siehe Abb. 3.5. Allerdings sind diese von anderer Art als diejenigen, über die bis jetzt berichtet wurde, handelt es sich doch jeweils um die Überkreuzungen zweier Niveaus, die *nicht* zu einem gemeinsamen Landau-Niveau korrespondieren. Durch die bereits oben erwähnte Verschiebung der Startpunkte durch Δ und λ sowie die unterschiedliche Krümmung der Kurven in ihrem anfänglichen, noch recht stark gebogenen Teil kommt es in diesem Bereich zu einer ziemlich großen Zahl von Schnittpunkten, also energetischen Entartungen, von denen einige in Tab. 3.4 aufgeführt sind. Deutlich unterstrichen werden soll die Tatsache, dass für das Zustandekommen der Entartungen im vorliegenden Fall allein die Spin-Bahn-Wechselwirkungen verantwortlich zu

entartete Zustände	B_{tr} / Tesla	E / meV
3^+ und 0^{++}	0,0865	15,379
0^{++} und 2^+	0,1881	19,491
1^{++} und 3^+	0,3584	34,452

TABELLE 3.4. Übergänge im Niedrigfeld: Feldstärken B_{tr} , bei denen energetische Entartungen auftreten (es wurden nur die Teilchen-Zustände mit $E > 0$ und den niedrigsten Indizes aufgeführt). Die betreffenden Zustände korrespondieren jeweils zu verschiedenen Landau-Niveaus.

entartete Zustände	B_{tr} / Tesla	E / meV
3^+ und 0^{++}	0,0866	15,385
0^{++} und 2^+	0,1886	19,517
1^{++} und 3^+	0,3600	34,528

TABELLE 3.5. Entartungen bei fehlendem Zeeman-Term: Wie Tabelle 3.4, aber für $b = 0$. Die Werte sind einander sehr ähnlich.

machen sind, während dem Zeeman-Effekt keine wesentlich-ursächliche Beteiligung zukommt. Auf die relative Kleinheit des Zeeman-Termes (3.1) und seine Vernachlässigbarkeit insbesondere bei abnehmendem Felde wurde bereits in Abschnitt 2.4 hingewiesen. Diese Überlegungen werden nun, bei einem Vergleich der Tabellen 3.4 und 3.5, erhärtet.

Interessant und instruktiv ist es, in Abb. 3.5 den Verlauf der Energie in Abhängigkeit vom Magnetfelde zu verfolgen, wie er sich etwa unter folgender Voraussetzung ergibt: Die Anzahldichte der Elektronen sei, beispielsweise über eine entsprechende Gatespannung, so eingestellt, dass bei infinitesimal kleiner Feldstärke alle Niveaus bis einschließlich zum 3^+ -Niveau (letzteres nicht unbedingt vollständig) besetzt seien, während (bei genügend tiefer Temperatur) die höheren sämtlich leer zu bleiben haben. Das Fermi-Niveau liegt bei $B = 0$ also noch bei 3 meV. Es muss aber bei zunehmender Stärke des Feldes, dem Verlauf der Kurve $E(B)$ für das Niveau 3^+ folgend, allmählich ansteigen. Dieses wird sich aber bei $B_{tr1} = 86,5$ mT in das dann tiefer zu liegen kommende, bislang unbesetzt gebliebene Niveau 0^{++} entleeren. Ein weiterer Übergang, diesmal vom Niveau 0^{++} zum Niveau 2^+ , findet bei $B_{tr2} = 188,1$ mT statt. Da das letztgenannte Niveau laut Annahme aber zuvor ebenfalls bereits besetzt war, tut sich, wenn man von einer anfänglich vollständigen Besetzung des 3^+ -Niveaus ausgeht, hier scheinbar gar nicht viel: Es wird lediglich ein Zustand durch einen anderen mit seiner jeweilig spezifischen Verteilung von Spin und Dichte in seiner Rolle als höchst-besetztes und damit Fermi-Niveau abgelöst. Den integralen Eigenschaften dürfte dies, wenn überhaupt, nicht allzu viel ausmachen: es kommt lediglich zu einer geringfügigen Änderung im Energieanstieg.

Zu einer gänzlich anderen Schlussfolgerung wird man jedoch gelangen, wenn von einer anfänglich nur teilweisen, wenn auch nicht allzu geringen Besetzung des 3^+ -Niveaus auszugehen ist. In diesem Falle nämlich wird sich der Übergang bei *beiden* Feldern, B_{tr1} und B_{tr2} , in einer Veränderung der gesamten Spineinstellung, über alle Niveaus hinweg summiert, niederschlagen; siehe Abb. 3.8.

Der thematischen Ordnung halber (und um einen bereits recht langen Abschnitt nicht noch weiter auszudehnen) wurde bislang bewusst jeglicher Zusammenhang mit dem Spin auf das Nötigste beschränkt. Diese Unterlassung soll nun nachgeholt werden.

3.4. Spinverteilung, Randzustände und Phasenübergang

Die Spinverteilung entlang der y-Richtung $\vec{S}(y) = \Psi^+ \left(\frac{\vec{s}}{2} \right) \Psi$ mit dem zugehörigen Operator $\vec{s} = (s_x, s_y, s_z)$ des (echten) Spins ist bei gegebener Wellenfunktion, für $p \geq 0$ also (3.27), aus dieser natürlich leicht zu berechnen. Für die Komponenten in der Graphen-Ebene ergibt sich

$$(3.48) \quad S_x(y) \equiv 0$$

und

$$(3.49) \quad S_y(y) = N_p^2 \cdot \frac{\nu_{\uparrow} - p}{\Lambda} \cdot \left[p \cdot D_{p-1}(\eta) + \frac{\tilde{\nu}_{\uparrow-}}{\tilde{\nu}_{\downarrow-}} \cdot D_{p+1}(\eta) \right] \cdot D_p(\eta),$$

wobei sich Letzteres bei Vernachlässigung des Zeeman-Terms zu

$$(3.50) \quad S_y^{b=0}(y) = N_p^2 \cdot \frac{\nu_{\uparrow} - p}{\Lambda} \cdot \eta \cdot D_p^2(\eta)$$

vereinfacht; in beiden Fällen liefert die y-Komponente ebenso wie die x-Komponente keinen Netto-Beitrag zum Spin: $S_x^{ges} = S_y^{ges} = 0$.

Nur senkrecht zur Ebene des Graphen, also in z-Richtung, ergibt sich mittels (3.51)

$$(3.51) \quad S_z(y) = \frac{1}{2} N_p^2 \cdot \left[p^2 \cdot D_{p-1}^2(\eta) + \left(\tilde{\nu}_{\uparrow-}^2 - \left(\frac{\nu_{\uparrow} - p}{\Lambda} \right)^2 \right) \cdot D_p^2(\eta) - \left(\frac{\nu_{\uparrow} - p}{\Lambda \tilde{\nu}_{\downarrow-}} \right)^2 \cdot D_{p+1}^2(\eta) \right]$$

auch integriert über die (unendliche Ausdehnung der) y-Achse ein Gesamteffekt:

$$(3.52) \quad S_z^{ges} = \frac{1}{2} \cdot \frac{p + \tilde{\nu}_{\uparrow-}^2 - \left(\frac{\nu_{\uparrow} - p}{\Lambda} \right)^2 \cdot \left(1 + \frac{p+1}{\tilde{\nu}_{\downarrow-}^2} \right)}{p + \tilde{\nu}_{\uparrow-}^2 + \left(\frac{\nu_{\uparrow} - p}{\Lambda} \right)^2 \cdot \left(1 + \frac{p+1}{\tilde{\nu}_{\downarrow-}^2} \right)}$$

Vom Betrage her ist dieser selbstverständlich niemals größer als $\frac{1}{2}$ und erreicht diesen Eckwert auch nur in den folgenden, leicht nachvollziehbaren Fällen:

- (1) $S_z^{ges} = \pm \frac{1}{2}$ bei $\lambda = 0$. Bei fehlender Rashba-Kopplung zwischen den Spins vermögen sich dieselben vollständig auszurichten. Bei entsprechend unterschiedlicher Energie (3.44) sind beide Vorzeichen (Einstellungen) möglich; siehe (6.8) und (6.10) im Anhang.
- (2) Als Grenzwert $S_z^{ges} \mapsto -\frac{1}{2}$ für $B \mapsto \infty$ bei vorhandenem Zeeman-Terme. In diesem Falle wird die Spinausrichtung bei genügend starkem Felde praktisch erzwungen. Tatsächlich realisierbar ist dies nur, wenn die anderen Parameter (Δ und λ) nicht zu groß sind.
- (3) Im Grundzustande (3.39) ist $S_z^{ges} = -\frac{1}{2}$. Da dieser hier wegen $p = -1$ jedoch noch nicht miterfasst wurde, erfolgt seine Behandlung erst etwas weiter unten.

In ganz ähnlicher Weise kann auch die (zweidimensionale) Stromdichte $\vec{J} = \Psi^+ \vec{\sigma} \Psi$ bestimmt werden, wofür der Operator $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ benötigt wird, der aus den Pauli-Matrizen für die Untergitter A/B besteht. Hierbei ist aber zu beachten, dass

die Vektoren \vec{s} und $\vec{\sigma}$ (abgesehen von ihrer Dimension) gemäß der im Hamilton-Operator (3.15) vorliegenden Reihenfolge der Matrizen und im Einklang mit dem daran geknüpften Hinweis einerseits von links, andererseits jedoch von rechts mit der 2×2 -Einheitsmatrix zu multiplizieren sind. Einsetzen der Wellenfunktionen (3.27) ergibt

$$(3.53) \quad J_x(y) = -2N_p^2 \cdot \left[\tilde{\nu}_{\uparrow-p} \cdot D_{p-1}(\eta) + \frac{1}{\tilde{\nu}_{\downarrow-}} \left(\frac{\nu_{\uparrow-p}}{\Lambda} \right)^2 \cdot D_{p+1}(\eta) \right] \cdot D_p(\eta)$$

und

$$(3.54) \quad J_y(y) \equiv 0.$$

Wieder ist der Gesamteffekt innerhalb der Ebene gleich Null: $J_x^{ges} = J_y^{ges} = 0$.

Zu Vergleichszwecken nützlich ist natürlich auch die Kenntnis der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x, y) = |\Psi(x, y)|^2$. Man kann ansonsten nämlich nicht entscheiden, ob sich an einer bestimmten Stelle die beiden Spinrichtungen, wenn sie dort etwa gleich stark, aber eben doch stark besetzt sind, einander (fast) kompensieren, oder ob, schlicht gesagt, an dieser Stelle einfach keine Spins vorhanden sind; siehe Abb. 3.7. Auch diese Größe hängt nur von y bzw. über (3.19) von η ab und ergibt sich zu

$$(3.55) \quad \rho(y) = N_p^2 \cdot \left[p^2 \cdot D_{p-1}^2(\eta) + \left(\tilde{\nu}_{\uparrow-}^2 + \left(\frac{\nu_{\uparrow-p}}{\Lambda} \right)^2 \right) \cdot D_p^2(\eta) + \left(\frac{\nu_{\uparrow-p}}{\Lambda \tilde{\nu}_{\downarrow-}} \right)^2 \cdot D_{p+1}^2(\eta) \right].$$

Die von Null verschiedenen Komponenten, nämlich $\rho(y)$, $S_y(y)$, $S_z(y)$ und $J_x(y)$ sind in ihrem Verlaufe beispielhaft in Abb. 3.6 dargestellt. Dass einige, und zwar die hier nicht dargestellten Komponenten S_x und J_y überall zu verschwinden haben, erkennt man bereits aus einer Symmetrieüberlegung:

Da sich in x -Richtung nichts tut – und damit bleibt die jetzige Überlegung und das mit ihr verbundene Ergebnis auch noch im übernächsten Abschnitt 3.6 bestehen – kann eine Spiegelung an der yz -Ebene vorgenommen werden, ohne dass es dadurch zu irgendeiner Veränderung im Sachverhalt käme. Bei dieser Transformation des äußeren Koordinatensystems wird der Ortsvektor $\vec{r} \equiv (x, y, z) \mapsto (-x, y, z)$ abgebildet. Entsprechendes gilt auch für die polare Stromdichte $\vec{J} \equiv (J_x, J_y) \mapsto (-J_x, J_y)$. Hingegen transformieren sich die beiden axialen Vektoren $\vec{S} \equiv (S_x, S_y, S_z) \mapsto (S_x, -S_y, -S_z)$ und $\vec{B} \equiv (0, 0, B) \mapsto (0, 0, -B)$ in anderer Weise. Eine mit der Ausgangslage übereinstimmende Situation $B_z > 0$ herbeizuführen, gelingt anschließend mittels einer Zeitumkehr, sodass letztlich nur J_y und S_x einen Vorzeichenwechsel erfahren und deshalb identisch zu verschwinden haben.

Die anderen Komponenten können von Null verschieden sein – müssen es aber nicht, wie sich sogleich erweisen wird. Denn auch unter Berücksichtigung der im vorigen Abschnitt angegebenen Möglichkeit, für den Fall $p = 0$ Kürzungen im Ausdruck (3.37) [mit (3.35); ganz analog auch in (3.52)] vorzunehmen, gelten die oben angegebenen Formeln [(3.49) bis (3.53) und (3.55)] nur für $p \geq 0$, mithin also für alle Zustände mit Ausnahme des Grundzustandes (3.39), welchem deshalb hier eine gesonderte Behandlung zuteil werden soll. Bei ihm sind neben den durch die Symmetrie erzwungenen auch noch weitere Komponenten gleich Null, und zwar gilt $J_x = J_y = 0$ und $S_x = S_y = 0$, das heißt, dass sich innerhalb der Ebene, was den Spin und die Stromdichte angeht, überhaupt nichts abspielt und nur senkrecht

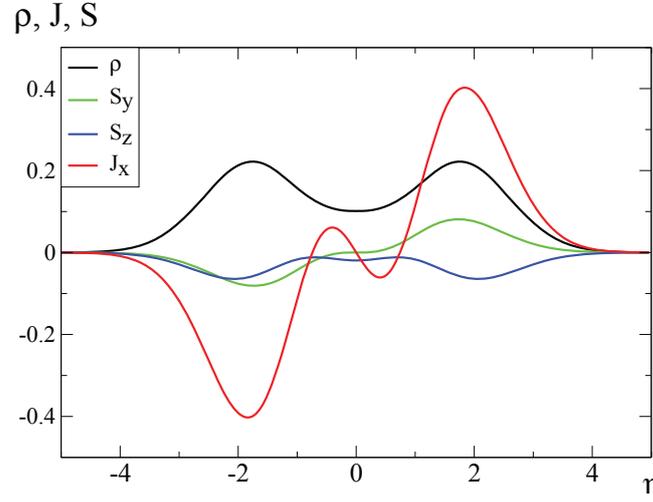


ABBILDUNG 3.6. Wahrscheinlichkeitsdichte ρ sowie die von Null verschiedenen Komponenten des Stromes und der Spinausrichtung für den Zustand 1^{++} . Im Niedrigfeld von $B = 0,2$ T ergibt sich aus (3.36) mit $p = 1$ als (höchste) Energie $E = 27,3$ meV. Dieser Zustand liegt genügend fern von allen eventuell vorhandenen Kreuzungspunkten. Dafür spricht neben Abb. 3.5 vor Allem die Tatsache, dass Gleichung (3.29) mit den angegebenen Werten für p nur *eine* ganzzahlige Lösung liefert (der andere Wert wäre $p = 3,6$). Man erkennt sowohl die achssymmetrischen Verläufe von ρ und S_z , die (hier) negativ miteinander korrelieren, als auch die sich in ihrer Summe über verschiedene Werte der Ortskoordinate η gegenseitig aufhebenden, da punktsymmetrischen Verläufe von J_x und S_y . Für Letztere wird die soeben benannte Symmetrieeigenschaft für den Fall $b = 0$ aus (3.50) besonders deutlich; bei derart niedrigen Feldern wie dem hier betrachteten sind die durch die entsprechende Vernachlässigung bedingten Unterschiede ohnehin kaum vernehmbar.

dazu eine Spinkomponente existiert, deren räumliche Verteilung, ebenso wie die der Dichte, einer Gaußschen Glockenkurve gehorcht:

$$(3.56) \quad S_z^{p=-1}(y) = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\exp(-\frac{1}{2}\eta^2)}{\sqrt{2\pi}} = -\frac{1}{2} \cdot \rho(y)$$

Die hierbei gegebene vollständige Ausrichtung des Spins, $S_z^{ges} = -\frac{1}{2}$, erweist sich als dem energieärmsten Zustande angemessen.

Wie bereits im letzten Abschnitt angedeutet, sind in diesem Zustande die diskreten Größen Valley, Pseudo- und (echter) Spin in einer Weise miteinander verknüpft, die nur wenige, ganz bestimmte Kombinationen zulässt, und zwar sind dies,

wie man (3.39) in Verbindung mit (3.10) leicht entnimmt, die beiden folgenden: $KB\downarrow$ und $K'A\downarrow$. Während die einheitliche Ausrichtung des echten Spins \downarrow entgegen der Feldrichtung (zumindest beim Vorliegen des Zeeman-Termes) energetisch verständlich ist, kommt es zu einer eigenartigen Polarisation der Atome A und B im Sinne einer Beschränkung auf jeweils eines der beiden Täler K und K' . Dies kann als Ausdruck des Zusammenhanges zwischen dem direkten und dem indirekten Gitter in Abb. 2.1 angesehen werden; dreht man nämlich dort das rechte Teilbild (und nur dieses) um $+90^\circ$ (entgegen dem Uhrzeigersinn), so kommen dadurch jene Täler bzw. Atome auf äquivalente Positionen zu liegen, die im Grundzustande nicht miteinander korrespondieren. (Bei Drehung *im* Uhrzeigersinne fallen die – für eine bestimmte Spinausrichtung – kombinierbaren Atome und Täler dann natürlich zusammen.)

Es wurde bereits dargelegt, dass im hier betrachteten allgemeinen Fall d) wegen der Form der Wellenfunktion streng genommen nur (3.39) [mit insgesamt zweifacher Entartung] als wirklicher Grundzustand apostrophiert zu werden vermag; durch die im Moment erfolgende Betrachtung der Freiheitsgrade Spin, Valley und Pseudospin erfährt diese Haltung ihre Bekräftigung. Die soeben für (3.39) festgestellte Beschränkung auf nur zwei der möglichen Kombinationen verliert nämlich bei (3.27) vollkommen ihre Gültigkeit, während (3.37) insofern eine Zwischenstellung einnimmt, als dort immerhin schon sechs der acht Kombinationen auftreten und lediglich die Fälle $KA\uparrow$ und $K'B\uparrow$ ausgeschlossen werden. Im Sinne der Überlegung mit den gedrehten Gittern kommt es auch hier wieder zu einem entsprechenden Zusammenfallen, anders als zuvor gilt aber die damit einhergehende Vermeidung nur noch für eine Spinrichtung.

Interessant ist es, hier einen Vergleich mit dem reinen Rashba-Fall [Fall c)] anzustrengen, bei dem neben (3.39) dann noch eine weitere Nullmode, nämlich (3.46) existiert, welche (im K -Punkt) die Zustände $B\uparrow$ und $B\downarrow$ als besetzt ausweist. Es soll betont werden, dass die oben nur für den Grundzustand (3.39) getroffene Aussage, A-Atome seien vollständig K' - und B-Atome vollständig K -polarisiert, bei entsprechender Formulierung, also *ohne* Bezug auf den Spin, auch im Hinblick auf (3.46) nicht an Gültigkeit verliert. Die Spinbeimischung erklärt sich natürlich durch die hier vorhandene Rashba-Kopplung λ , sie bleibt aber, da eine Wechselwirkung mit dem äußeren Felde über den Zeeman-Term (3.1) nun nicht gegeben ist, energetisch folgenlos. Die zuletzt gemachte Bemerkung erlaubt es auch, die zunächst unerwartete Tatsache zu akzeptieren, dass mit zunehmendem Felde B die Besetzung von $B\uparrow$ auf Kosten von $B\downarrow$ anwächst. Begreifen freilich kann man sie erst durch die folgende Überlegung, bei der in einer korrespondenzmäßigen Betrachtung [gemeint ist hier, welche Zustände miteinander korrespondieren] b allmählich (adiabatisch) eingeschaltet wird. Diese zeigt, dass sich die Zustände (3.39) und (3.46), obwohl beide aus $E = 0$ hervorgehen, dabei in durchaus verschiedener Richtung weiterentwickeln. Während (3.39) nur die abwärts gerichtete Spinkomponente aufweist und durch den Zeeman-Term, sobald dieser eingeschaltet wird, eine Verminderung in seiner Energie (3.40) erfährt, gilt für den Zustand (3.46) das Gegenteil. In Letztergenanntem ist nämlich auch die Komponente Spin \uparrow vertreten [für $B \gg \lambda^2$, was bei den hier gewählten Parametern schon bei deutlich weniger als einem Tesla zuverlässig der Fall ist, sogar im Übergewicht], sodass beim Übergang auf (3.37) mit zunehmendem Felde keine Energieabsenkung erfolgt, sondern eine -erhöhung; siehe (3.41).

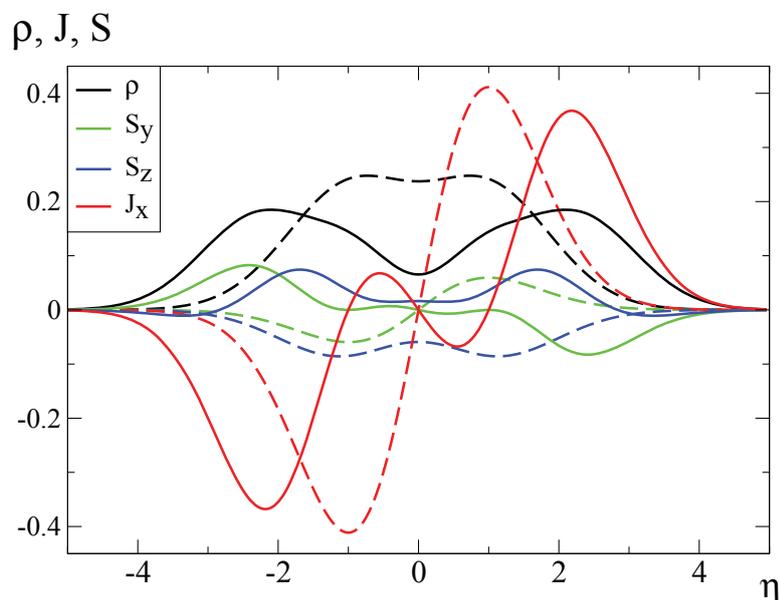


ABBILDUNG 3.7. Darstellung analog zu Abb. 3.6, jedoch für einen Kreuzungspunkt: für $B_{tr2} = 188,1$ mT (siehe Tabelle 3.4 und Abb. 3.5) ergeben sich zwei Zustände, nämlich 0^{++} (gestrichelt) und 2^+ (ausgezogen). Bemerkenswert ist, dass bei Letzterem S_z ein durchgängiges und recht breites Minimum besitzt, während ρ dort nur einen schmalen Dip aufweist. Also sind bis $|\eta| \lesssim 0,7$ zwar Spins vorhanden, jedoch entgegengesetzt zueinander ausgerichtet, sodass die Wahrscheinlichkeitsdichte, von $\eta = 0$ ausgehend, schon sehr bald zunimmt, ohne dass sich das jedoch, eben auf Grund der gegenseitigen Kompensation, beim Spin S_z sogleich bemerkbar zu machen vermöchte.

Es soll noch vermerkt werden, dass bei der hier gemachten Voraussetzung über die Stärke des Feldes für denjenigen der drei Zustände (3.37), zu dem sich (3.46) bei Vorhandensein auch der anderen Kopplungen entwickelt – das ist genau jener, dem die genannte Energie (3.41) zukommt –, fast nur die Kombinationen $KB\uparrow$ und $K'A\uparrow$ vorliegen, die im Grundzustande fehlten. Bei den anderen zu $p = 0$ gehörigen Zuständen (3.37) mit stärker von Null verschiedener Energie – anderen Ortes wurden sie als 0^{++} und 0^{--} bezeichnet – ist das nicht der Fall; hier sind (bei genügend hohem Felde) die Spin \downarrow -Komponenten als Majorität vertreten, und mittels (3.42) erfolgt die Zuordnung zu $N = 1$. Ab $p \geq 1$ treten dann alle Kombinationen auf, selbstverständlich in jeweils unterschiedlich wechselnder Gewichtung.

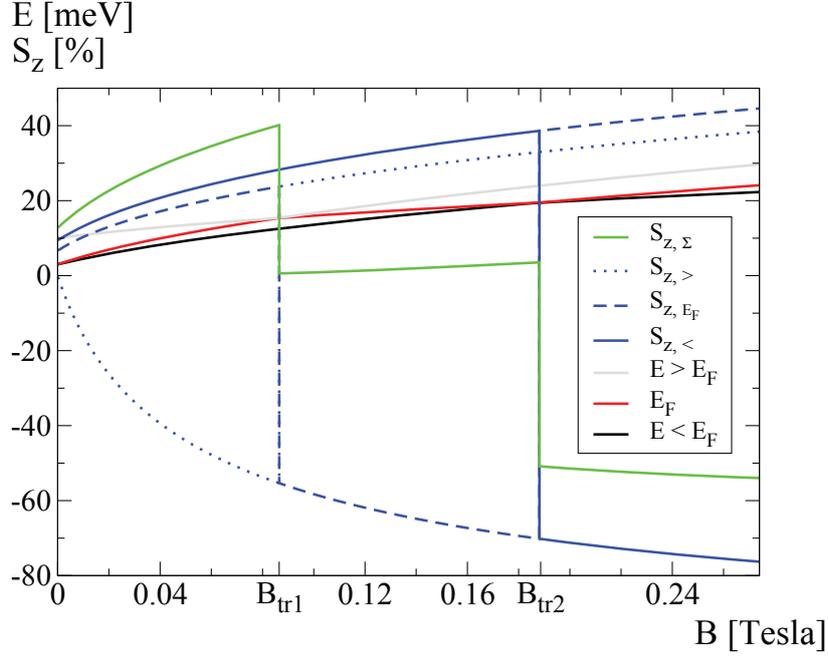


ABBILDUNG 3.8. Energie und Spin in Abhängigkeit vom Magnetfelde im Niedrigfeldbereich: Bei der im Text gemachten Annahme über die Anzahl der zur Verfügung stehenden Elektronen werden die Niveaus 0^{++} , 2^+ und 3^+ unterschiedlich stark besetzt sein, und zwar in einer je nach dem anliegenden Magnetfelde zweimal abwechselnden Weise. Die diesbezüglichen Kurven für die Energien sind schon in der Abb. 3.5 enthalten und auch dort bereits hervorgehoben worden, nun aber wurden sie, ihrer Rolle entsprechend, anders zusammengesetzt: Nicht mehr wie zuvor nach ihrer Zugehörigkeit zu einem bestimmten Quantenzustande, sondern in der veränderlichen Reihenfolge einer stets größer werdenden Energie. Dabei sind nun die Niveaus $3^+ \mapsto 0^{++} \mapsto 2^+$ in eben dieser Reihenfolge nacheinander jeweils halb besetzt und determinieren so die Fermi-Energie. Die Übergänge bei den Feldstärken $B_{tr1} = 86,5$ mT und $B_{tr2} = 188,1$ mT ziehen über die veränderte Besetzung der Niveaus auch eine dementsprechend deutliche Veränderung bei den Gewichten der Spinanteile (3.52) nach sich, die sich in der Summe (3.57) für den Gesamtspin auswirkt: Das jeweils gepunktete Niveau (oberhalb der Fermi-Energie E_F) ist leer geblieben, das gestrichelte (bei E_F) halb und das ausgezogene (unterhalb derselben) ganz besetzt. Wären nun die beiden Letztgenannten von einer stets einheitlichen und dabei vollständigen Ausrichtung der Spins geprägt, so ergäbe sich für deren Summe mithin ein maximaler Wert von $\pm 150\%$. Der tatsächliche Verlauf ist der Kurve $S_{z,\Sigma}$ zu entnehmen und sollte als Magnetisierung einer entsprechend präparierten Probe messbar sein; derartig scharfe Übergänge wie die hier gezeigten werden natürlich nur bei genügend tiefen Temperaturen (etwas unterhalb von 1K) nachzuweisen sein.

3.4.1. Übergänge unter Beteiligung von Zuständen verschiedener Herkunft

Im vorangegangenen Abschnitt 3.3 wurde bereits mehrfach das Auftreten energetischer Entartungen thematisiert, zuletzt im Zusammenhang mit Abb. 3.5. Diese sollen hier nochmals, und zwar diesmal vom Standpunkte der Spin- und anderer Verteilungen aus, besprochen werden.

Analog zu Abb. 3.6 zeigt Abb. 3.7 die von Null verschiedenen Verläufe der Spinkomponenten sowie der Wahrscheinlichkeits- und Stromdichten für die *beiden* mit $B_{tr2} = 188,1$ mT und $E = 19,491$ meV [siehe Tab. 3.4] verträglichen Zustände; man erkennt, dass, von allen feineren Einzelheiten abgesehen, ihr Hauptunterschied darin besteht, dass einmal, nämlich für den Zustand 2^+ eine positive, für den Zustand 0^{++} aber eine negative Korrelation zwischen $\rho(y)$ und $S_z(y)$ besteht. Wendet man das Augenmerk von $\rho(y)$ bzw. von der Wellenfunktion ab, so kann man, wenn auch in einer etwas vergrößernden Weise, durchaus von einem Umklappen des Spins (auch in Bezug auf die y -Komponente $S_y(y)$) sprechen. Deutlicher noch wird dies beim Verfolg der gestrichelten Kurve in Abb. 3.8, die den Gesamtspin S_z^{ges} in Abhängigkeit von der Feldstärke B für das Fermi-Niveau angibt. Interessant ist auch das Verhalten der Spinsumme

$$(3.57) \quad S_{z,\Sigma}(B) = \sum_{E_i \leq E_F} n(E_i, B) \cdot S_z^{ges}(E_i, B)$$

in Abhängigkeit von B , wobei n die jeweilige Besetzung der Niveaus angibt. De facto wurde – der Darstellung entsprechend – nur ein Zustand unterhalb E_F in die Summation miteinbezogen; an der Höhe der Sprünge ändert dies jedoch nichts. Bei Annahme eines halbvollen Fermi-Niveaus erfolgt ein endlicher Sprung bei *beiden* Feldern B_{tr1} und B_{tr2} . Den Verlauf der Kurve (3.57) in Abb. 3.8 versteht man am ehesten, wenn man bedenkt, dass der Zustand 0^{++} , der als einziger ein negatives S_z^{ges} in sie miteinzubringen in der Lage ist, erst leer, dann halb- und schließlich ganz gefüllt ist.

3.4.2. Übergänge zwischen Zuständen zum ursprünglich gleichen Landau-Niveau

Drastischer noch als im soeben besprochenen Falle fällt die kontrastierende Wirkung bei den Hochfeld-Übergängen ins Auge: Während die Änderung der Energiezunahme angesichts der ohnehin gekrümmten Kurve in Abb. 3.9 kaum noch auszumachen ist – ihre Steigung mindert sich in unmittelbarer Nähe von $B_{cr1} = 11,44$ T nur um etwa 3,1% –, erfolgt ein fast vollkommenes Umschlagen des Spins, siehe auch Abb. 3.10. Letztere verdeutlicht überdies, wie gering die Unterschiede der beiden energetisch miteinander entarteten Zustände bezüglich Wahrscheinlichkeits- und Stromdichte schlussendlich ausfallen, während demgegenüber die Spineinstellungen, insbesondere was deren z -Komponenten anbelangt, zueinander fast perfekt spiegelbildlich verlaufen. Begründet liegt dies darin, dass – anders als zuvor – nun beide Zustände zum gleichen Landau-Niveau [hier $N = 1$ mit positiver Energie] korrespondieren, und sich diesem im Hochfelde bereits insoweit angenähert haben, dass überhaupt nur noch die (fast entgegengesetzte) Spinausrichtung einen irgendwie bemerkbaren Unterschied mit ins Spiel hineinzubringen vermag.

Diesbezügliche Entartung wurde zwar in Abschnitt 2.4 [und dann wieder in Abschnitt 3.3, Fall a)] angenommen, doch der Zeeman-Term (3.1) bewirkt nun einen geringen, größenordnungsmäßig 1 meV betragenden Unterschied der Energien, der

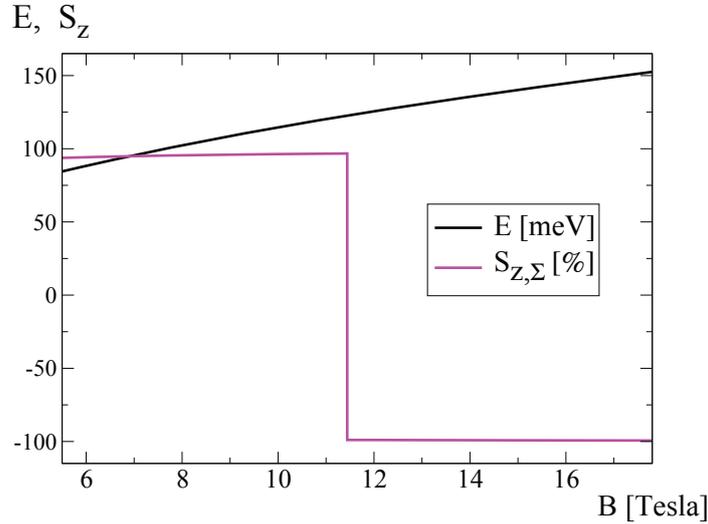


ABBILDUNG 3.9. Spinumkehr bei $B_{cr1} = 11,44$ T durch einen Wechsel der Niveaus von 1^+ nach 0^{++} (innerhalb desselben Landau-Niveaus mit $N = 1$; siehe Abb. 3.3). Wird durch äußere Umstände die Elektronendichte so gewählt, dass das jeweils obere Niveau leer bleibt und das andere vollständig gefüllt ist, so kommt es bei stetiger Energiezunahme zu einem abrupten und fast hundertprozentigen Spinumklapp. Eine Halb-Besetzung ist, anders als in Abb. 3.8, hier nicht vonnöten, da jetzt lediglich *ein* Übergang betrachtet wird.

beim angegebenen Felde $B_{cr1} = 11,44$ T gerade ausreicht, um jenen durch die beiden Spin-Bahn-Kopplungen hervorgerufenen exakt zu kompensieren. Ein ganz ähnlicher und aus diesem Grunde hier nicht dargestellter Verlauf wie in Abb. 3.9 ergibt sich auch für $N = 2$ mit $B_{cr2} = 14,66$ T [siehe Tab. 3.2].

3.4.3. QSH-Phasenübergang

Die abrupten Sprünge, die bei einer Zunahme des Feldes in Abb. 3.8 oder Abb. 3.9 in der Spinmagnetisierung zu sehen sind, können durchaus als Zeichen eines Phasenüberganges interpretiert werden, der sich in der Spineinstellung manifestiert. Von fundamentalerer Art und womöglich noch größerer Bedeutung ist hingegen jener Übergang, der dann eintritt, wenn die magnetische Feldstärke B die Bedingung

$$(3.58) \quad bB = \Delta$$

erfüllt. Er zeigt sich, wie bereits die vorigen, zunächst wieder als energetische Entartung, ist aber allein dadurch schon interessanter als jene, dass sich nunmehr übereinstimmende Niveaus mit $E = 0$ ergeben oder besser gesagt zurückbilden, siehe Gleichung (3.40) und (3.41). Letztere gilt für diesen Fall exakt, wie man (3.38),

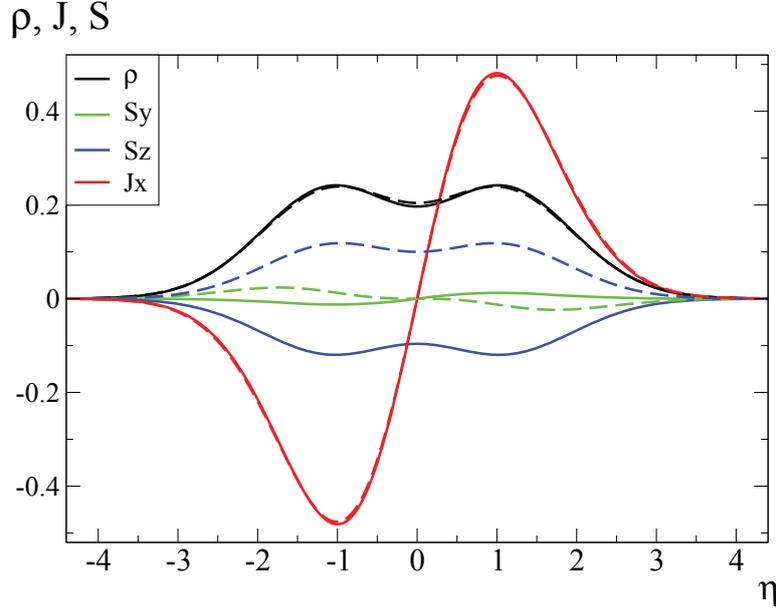


ABBILDUNG 3.10. Ähnlich wie Abb. 3.7, jedoch für einen Kreuzungspunkt im Hochfeld (siehe Abb. 3.3) bei $B_{cr1} = 11,44$ T; die beteiligten Zustände gehören zu $N = 1$ und sind 0^{++} (ausgezogen) bzw. 1^+ (gestrichelt). Ähnlich wie dort kann die Korrelation zwischen ρ und S_z je nach Zustand wieder eine positive oder negative sein, doch findet hier, während die Verteilungen der Wahrscheinlichkeits- und Stromdichte nur eine kaum noch merkbare Veränderung erfahren, wegen des im Hochfelde nun so viel stärkeren Einflusses des Zeeman-Effektes leicht ein Übergang mit einem fast kompletten Umklappen der Spineinstellungen statt (siehe auch Abb. 3.9).

aus der sie hergeleitet wurde, leicht entnehmen kann. Durch zwei unterschiedliche Zustände, nämlich den einen (einzigen) mit $p = -1$ sowie einen weiteren (von dreien) mit $p = 0$ ergibt sich zusammen mit den K' -Punkten, die in Abschnitt 3.1 aufgrund ihrer Symmetrie, also der Übersichtlichkeit halber, vorübergehend herausgenommen wurden, wieder die volle vierfache Entartung des Null-Niveaus. Dies entspricht ganz genau dem elementaren Fall, der in Abschnitt 2.4 betrachtet wurde [Gleichung (2.47) mit $N = 0$], und das, obwohl inzwischen drei zusätzliche Wechselwirkungen, der Zeeman-Effekt und die beiden Spin-Bahn-Kopplungen, hinzugetreten sind.

Weitere Informationen und Aufschlüsse über die hier vorliegenden Nullmoden ergeben sich aus der Betrachtung ihrer Wellenfunktionen, und zwar sind dies einmal (3.39) sowie andererseits (3.37), die sich für (3.58) und $E = 0$ zu (3.46) vereinfacht. Bemerkenswerterweise handelt es sich dabei um genau die gleichen Wellenfunktionen, die auch im reinen Rashba-Fall [Fall c)] des vorigen Abschnittes (für $E = 0$) auftraten, sodass füglich von einer vollständigen Kompensation der beiden anderen

Effekte, bB und Δ , gesprochen werden kann. Dass die Funktion (3.46) hier keine andere Energie ausweist als die Funktion (3.39), obwohl doch ein Teil des Spins gegen die Wirkung des Magnetfeldes umzuklappen ist, erklärt sich wie folgt: Bei gleichem σ_z (hier gleich -1 wegen Atom B) verändert der echte Spin $s_z = \pm 1$ sowohl das Vorzeichen des Zeeman-Terms (3.1) als auch dasjenige der intrinsischen Kopplung (2.53). Und im Falle der Bedingung (3.58) hebt sich eben beides exakt auf, sodass mithin nur noch λ überlebt. (Ohne diese letztgenannte Kopplung ergäbe sich aus (3.46) einfach (6.8) mit $p = 0$, so dass dann wieder zwei völlig nach Spins getrennte Funktionen vorlägen.)

Was die A-Atome anbelangt, so erfahren diese ihre Besetzung im Tale K' , und wie sich aus (3.10) ergibt, treten dadurch insgesamt die folgenden vier Kombinationen auf: $KB\uparrow$, $KB\downarrow$, $K'A\uparrow$, $K'A\downarrow$. Die Entartung wird also einmal durch den (echten) Spin und zum anderen wahlweise entweder durch das Atom (den Pseudospin) *oder* durch das Tal gegeben; da aber letztere gekoppelt sind, dürfen sie nicht beide und damit doppelt gezählt werden.

Weder die Funktion (3.39) noch die Funktion (3.46) gestatten einen Transport von Teilchen (und damit auch nicht von Ladung oder Spin), da bei beiden lediglich die B-, nicht aber auch die A-Atome besetzt sind. Denn eine Wechselwirkung übernächster Nachbarn wurde in diesem Kapitel von der Betrachtung ausgenommen; sie würde ja erst durch den Term t' in (2.1) bewerkstelligt, der aber in (2.17) und damit (3.15), wo $v_F := 1$ gesetzt wurde, nicht mit eingeht. Auch ein Überwechseln zu den K' -Punkten, wo zwar die A-Atome (aber eben nicht die B-Atome) besetzt sind, kommt aus energetischen Gründen nicht in Frage.

Welche Änderung erfahren nun diese Verhältnisse, wenn das Magnetfeld B jetzt so gewählt wird, dass es nicht mehr der Bedingung (3.58) genügt?

Da die Funktion (3.39) ihre Form einer Gauß-Glocke stets beibehält – sie erfährt bloß über (3.19) eine mit B veränderte Skalierung –, muss hier nur noch der Fall $p = 0$, also (3.37) untersucht werden. Der mit diesem Zustand verbundene Teilchentransport lässt sich zwar aus (3.53) [und (3.54)] herauslesen, jedoch gewinnen die Formeln an Klarheit, wenn in (3.37), wie dort bereits angedeutet, einige Kürzungen mit dem Normierungsfaktor N_0 [siehe (3.35)] vorgenommen werden. Unter Ausnutzung von (3.26) und für $p = 0$ wird

$$(3.59) \quad \Psi_0(\eta) = \widetilde{N}_0 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ (1 - \nu_\downarrow) \cdot D_0(\eta) \\ i\Lambda\widetilde{\nu}_{\downarrow-} \cdot D_0(\eta) \\ -i\Lambda \cdot D_1(\eta) \end{pmatrix}$$

mit

$$(3.60) \quad \widetilde{N}_0 = \left\{ \sqrt{2\pi} \cdot \left[(1 - \nu_\downarrow)^2 + (\widetilde{\nu}_{\downarrow-}^2 + 1) \cdot \Lambda^2 \right] \right\}^{-1/2}.$$

Der Grenzübergang, der für

$$(3.61) \quad B \mapsto B_\Delta := \Delta/b \Rightarrow \widetilde{\nu}_{\uparrow+}, \nu_\uparrow, \widetilde{\nu}_{\downarrow-}, \nu_\downarrow \mapsto 0$$

wieder in die Funktion (3.46) zurückführt, ist hierbei unverkennbar. Die Teilchenstromdichte für $E = 0$ wird dann

$$(3.62) \quad J_x^{(p=0)}(y) = -2\widetilde{N}_0^2 \cdot \Lambda^2 \widetilde{\nu}_{\downarrow-} \cdot D_0(\eta) D_1(\eta)$$

und erleidet bei $B \gtrsim B_\Delta$ einen Vorzeichenwechsel. Gleiches gilt auch für den Spintransport $J_x^{S_z(p=0)}(y) = -\frac{1}{2} \cdot J_x^{(p=0)}(y)$, der hier zum Teilchenstrom proportional

ist, denn aufgrund des Fehlens von $A\uparrow$ kann nur der andere Spin, der auch energetisch günstig ausgerichtet ist, von Atom zu Atom weitergereicht werden. Dieselbe Schlussfolgerung ergibt sich übrigens auch für den anderen K -Punkt, dem die Komponente $B\uparrow$ ermangelt.

Allgemein kann der Transport des Spins, insbesondere seiner auf die z -Richtung projizierten Komponente $\frac{1}{2}s_z$, formal durch

$$(3.63) \quad \overrightarrow{J^{S_z}} = \Psi^+ \left(\overrightarrow{\sigma} \cdot \frac{s_z}{2} \right) \Psi$$

erfasst werden. In Anwendung auf (3.27) ergibt sich eine ganz ähnliche Formel wie (3.53) für den Teilchentransport: nur das Vorzeichen in der Mitte der eckigen Klammer ändert sich von plus nach minus, außerdem entfällt der Vorfaktor 2. Ein Spintransport in y -Richtung findet analog zu (3.54) auch nicht statt.

Wenn oben gesagt wurde, dass in den Transportgrößen $J_x^{(p=0)}$ und $J_x^{S_z(p=0)}$ beim Übergang von $B < B_\Delta$ nach $B > B_\Delta$ wegen des in ihnen enthaltenen und in (3.22) definierten Koeffizienten $\tilde{\nu}_{\downarrow-}$ ein Vorzeichenwechsel stattfindet, so bezog sich das strenggenommen auf einen festen Wert der reduzierten Koordinate η . Durch das sich dabei verändernde Magnetfeld verschiebt sich nun aber wegen (3.19) die tatsächliche Koordinate y , wenn auch nur in einer unendlich ausgedehnten und dabei völlig homogenen Schicht. Will man hingegen einen ortsfesten, auf ein bestimmtes Atom bezogenen Standpunkt $y = \text{const}$ einnehmen, so könnte zwar argumentiert werden, dass man dieses y ja so wählen könne, dass η und damit auch D_1 im betrachteten oder zu betrachtenden Intervall der Feldstärke eben noch keinen Vorzeichenwechsel erleidet (D_0 ist immer positiv). Wenngleich die Stromdichten unter dieser Voraussetzung ihr *Vorzeichen* zwar nur im Punkte $B = B_\Delta$ ändern, so tun sie dies in Bezug auf ihren *Wert* als solchen, und sei es auch nur innerhalb entsprechend eng gezogener Grenzen, hingegen dauernd. Außerdem muss natürlich, und das macht die Problematik einer solchen Argumentationsführung in jeder Hinsicht deutlich, der Koordinatennullpunkt in einer unendlich ausgedehnten Ebene ein vollkommen beliebig wählbarer sein. Man kommt also, um die Bedeutung des in Rede stehenden Vorzeichenwechsels bei $B \gtrsim B_\Delta$ richtig zu erfassen, nicht umhin, einen Nullpunkt für die Koordinate y auch physisch-greifbar festzulegen. Denn dass bei $bB = \Delta$ ein echter Effekt auftritt, den der besagte Vorzeichenwechsel wenigstens als Hinweis – und in der geschilderten Weise auch als dessen Vorbote – ankündigt, steht ja durch die Nullmoden und die energetische Entartung, die mit ihnen verbunden ist, gänzlich außer Zweifel.

Im Folgenden werde deshalb eine Halbebene $y \geq 0$ betrachtet, das heißt eine Graphenschicht mit einem einzigen Rande, der exakt bei $y = 0$ verlaufe. Da eine derartig atomar scharfe Begrenzung der Schicht – anders als in einem späteren Abschnitt (Abschnitt 3.6) handelt es sich nicht bloß um die Grenze eines Magnetfeldes oder einer Dotierung in einem an sich unbegrenzten Graphen-Film – in einem Kontinuumsmodell, wie es hier zu Grunde liegt, eigentlich keine adäquat-quantitative Beschreibung mehr erfahren kann, soll, bevor eine solche wenigstens versucht wird, deshalb das folgende intuitive und mehr anschauliche Bild über die bei getrennter Einwirkung der Einzeleffekte sich ergebenden (und bereits von anderer Seite ausgiebig untersuchten) Randzustände als eine Art Richtschnur für das Kommende vorangestellt werden:

Bekanntlich [36] führt das Einschalten eines Magnetfeldes senkrecht zu einer (endlichen) Graphenschicht, die sonst keine mit dem Spin in Zusammenhang stehenden Wechselwirkungen ($b = \Delta = \lambda = 0$) ausweist, an ihren Begrenzungen zu Randströmen. Indem sie in bestimmter Richtung fließen, sind diese in der Lage, einen Transport von Ladung zu bewerkstelligen, dessen Richtungssinn sich aus der Linken- bzw. Rechten-Hand-Regel ergibt. Man spricht deshalb auch von den Elektronen bzw. allgemeiner den Quasiteilchen als einer chiralen Fermi-Flüssigkeit; es muss aber darauf hingewiesen werden, dass dieser und ähnliche Begriffe hier anders benutzt werden als in Abschnitt 2.3, wo sie sich auf den Pseudospin bezogen.

Der echte Spin, zunächst ohne jeden Belang, gewinnt einen solchen erst bei Berücksichtigung des Zeeman-Terms, der zu einer Energieaufspaltung führt. Im Probeninneren sind bei entsprechender Anzahldichte der Elektronen, das heißt bei Ladungsneutralität, nur die Niveaus mit $E < 0$ besetzt; für die vormalige Nullmode ergibt sich dabei eine Energieabsenkung von $E = 0$ auf $E = -bB$, siehe (3.44) mit $\Delta = 0$ und $N = 0$. Bedingt durch eine unterschiedliche Dispersion der Zustände am Probenrande – ihre Betrachtung kann hier nur eine allgemein-qualitative sein; genauere Einzelheiten finden sich in [69] sowie in [70] –, die auf der Längenskala l_B [siehe (2.37)] erfolgt, ergeben sich dort jedoch Rechts- und Linksläufer mit entgegengesetzter Spinausrichtung. Hierbei erhält gewissermaßen jedes einzelne Teilchen seine eigene Chiralität. Die unterschiedliche Besetzung beider Laufrichtungen, die das Magnetfeld (im Verein mit einer von außen einstellbaren Elektronendichte) erzwingt, ermöglicht somit einen Stromtransport, der eine Erklärung des Quanten-Hall-Effektes auch bei einer Einbeziehung des Spins über die Randzustände erlaubt. Wegen seiner Halbzahligkeit, gemeint ist die durchgängige Verschiebung der Stufen um ihre halbe Höhe gegenüber dem Nullpunkt, die auf der Aufspaltung des Nullniveaus basiert, wird dieser auch als anomal bezeichnet (QAH = „quantum anomalous Hall“). Eine etwa vorhandene Rashba-Kopplung $\lambda \neq 0$ bewirkt dabei – nicht nur im Probeninneren, siehe dazu oben – eine Mischung und Verkopplung der beiden Spin-Zustände.

Ein in Anbetracht der völlig anderen Ausgangslage am Ende verblüffend ähnliches Gesamtbild ergibt sich, wenn in einer zeitinvarianten Situation, also ohne äußeres Magnetfeld (und zunächst auch ohne λ) die intrinsische Kopplung Δ eingeschaltet wird. Zwar verschwindet, erwähnter Zeitinvarianz wegen, der Netto-Stromtransport identisch, doch schließt dies nicht die Möglichkeit entgegengesetzter, gleich großer Teilströme aus, und wie in [40] gezeigt wird, sind diese tatsächlich vorhanden. Ohne dass Ladung transportiert würde, kommt es zu einer Fortleitung der Spins, denn beide Teilströme tragen, bedingt durch Δ als Kopplung von Spin- und Bahnbewegung und ganz im Sinne der zeitlichen Invarianz, auch einander entgegengesetzte Spins. Ganz entsprechend wird in [71] ein solches Verhalten als helikaler oder QSH-Zustand bezeichnet (QSH = „quantum spin Hall“).

Dass λ wiederum über eine Verkopplung der Spins effektiv eine Verkleinerung der Lücke von 2Δ auf $2\Delta - \lambda$ bewirkt, wurde bereits am Ende von Abschnitt 2.5 erwähnt; siehe dazu auch (3.80) im folgenden Abschnitt. In einer gemischten Situation, in der alle drei Effekte (bB , Δ und λ) miteinander wetteifern, fällt λ also gewissermaßen aus der Konkurrenz heraus. Welcher der beiden dann noch verbleibenden Effekte schlussendlich überwiegt, wird über deren energetische Stärke entschieden; für (3.58) besteht hier offensichtlich ein Gleichgewicht.

Wie bereits angekündigt – und den dabei gemachten Vorbehalten, die Verwendung des Kontinuummodelles betreffend, zum Trotz – sollen nun die Zustände am Rande der unendlichen Halbebene $y \geq 0$ einer wenigstens in Ansätzen rechnerischen Behandlung unterworfen werden.

Es ist zunächst festzustellen, dass die Konvergenz der Wellenfunktionen jetzt nur noch für $\eta \propto y \mapsto +\infty$ zu fordern ist, denn bei endlichem Argument η_0 , wie es sich für $y = 0$ aus (3.19) ergibt, bereiten die Zylinderfunktionen keinerlei Probleme. Während die Funktionen (3.28) mit ihren imaginären Argumenten weiterhin zu verwerfen sind, konvergieren die Funktionen (3.27) nunmehr für jedes beliebige, auch insbesondere nicht-ganzzahlige p . Dies ermöglicht den Randzuständen, wenigstens auf einer Breite von der Größenordnung der magnetischen Längenskala l_B , Energien einzunehmen, die tief im Inneren verboten wären. Während dort nämlich nur die diskreten Werte der dispersionslosen Beziehung (3.26) mit ganzzahligem Index p aufzutreten vermögen, erlaubt die am Rande der Schicht herrschende Dispersion an dieser Stelle ein Energiekontinuum und damit zusätzliche Lösungen, die den Randbedingungen anzupassen sind. Legt man zu diesem Behufe in Abb. 2.1 die Linie $y = 0$, mithin die x-Achse, als Grenze so, dass sie auf Atome trifft – jede andere Festlegung wäre physikalisch ohne Aussage –, dann erkennt man, dass die derartig ge- oder betroffenen Atome nebeneinander liegende Zweiergruppen AB bilden, die, da sie alsbald eine nicht nur vom Rest des Gitterverbandes abgelöste, sondern auch voneinander getrennte Behandlung erfahren werden, in chemischer Ausdrucksweise als Dimere anzusprechen sind. Deren Gesamtwellenfunktion, die sich als Linearkombination aus Atomorbitalen (LCAO = „linear combination of atomic orbitals“) ergibt, muss nämlich nach Maßgabe der Randbedingung identisch verschwinden. Da es sich bei den beiden Atomen auf den Gitterplätzen A und B um letztlich gleichartige (Kohlenstoff-)Atome handelt, kommen dafür infolgedessen nur die Kombinationen $\Psi_A \pm \Psi_B$ in Frage, von denen eine gleich Null gesetzt wird. Wählt man dazu diejenige mit dem unteren Vorzeichen, so ergibt sich für den Punkt K , welcher der größeren Deutlichkeit halber wieder als Index hinzugefügt werde, die Bedingung

$$(3.64) \quad \Psi_{KA\uparrow} = \Psi_{KB\uparrow} \quad \& \quad \Psi_{KA\downarrow} = \Psi_{KB\downarrow} .$$

Dabei ist diese Wahl ohne Beschränkung der Allgemeinheit, handelt es sich doch um einen im Sinne der hier anzustellenden Betrachtungen ganz unerheblichen Phasenfaktor ± 1 , der, wie man (3.10) entnimmt, darüber hinaus auch noch mit dem K -Punkt wechselt. Nutzt man die letztgenannte Beziehung und die aus ihr für den Fall einer verzerrungsfreien Schicht sich unmittelbar ergebende Gleichheit $\Psi_{KB\uparrow} = \Psi_{K'A\uparrow}$ (sowie entsprechend für den anderen Spin) für eine im Sinne der K -Punkte „gemischte“ Darstellung aus, so lässt sich die Bedingung (3.64) auch wie folgt schreiben:

$$(3.65) \quad \Psi_{KA\uparrow} = \Psi_{K'A\uparrow} \quad \& \quad \Psi_{KA\downarrow} = \Psi_{K'A\downarrow} .$$

Je nach Standpunkt kann man also sagen, dass die Randbedingung sowohl die Täler eines Atoms [hier] als auch bezogen auf das gleiche Tal [siehe (3.64)] die beiden Atome, also den Pseudospin, miteinander verkoppelt. Die Verwandtschaft beider Standpunkte und ihre damit einhergehende, in gewissem Sinne wechselseitige Austauschbarkeit deutete sich bereits oben bei der Abzählung der vierfachen Entartung an und beruht letzten Endes auf der geometrischen Gleichartigkeit, das heißt der

hexagonalen Struktur *beider* Gitter, des direkten und des reziproken (siehe Abb. 2.1), mit ihren jeweils zwei nichtäquivalenten Eckpunkten.

Hingegen werden die beiden Einstellmöglichkeiten des echten Spins nicht durch die Randbedingung, sondern nach wie vor erst über die Rashba-Kopplung miteinander verknüpft. Ohne selbige ergäben sich bei Anwendung der Bedingung (3.64) auf die Wellenfunktion (3.27) zwei Gleichungen, nämlich

$$(3.66) \quad D_p(\eta_0) = -\frac{p}{\tilde{\nu}_{\uparrow-}} \cdot D_{p-1}(\eta_0) \xrightarrow{\Lambda \rightarrow 0} -\tilde{\nu}_{\uparrow+} \cdot D_{p-1}(\eta_0)$$

$$(3.67) \quad D_{p+1}(\eta_0) = -\tilde{\nu}_{\downarrow-} \cdot D_p(\eta_0),$$

die sich außer in der Verschiebung des Index $p \mapsto p+1$, also der an sich belanglosen Zählung, nur in der Ersetzung $\tilde{\nu}_{\uparrow+} \mapsto \tilde{\nu}_{\downarrow-}$ voneinander unterscheiden, also durch das unterschiedliche Vorzeichen sowohl der intrinsischen als auch der Zeeman-Kopplung, wie es vom Hamilton-Operator (3.15) her auch erwartet werden konnte. Die Spin-entartung ist damit aufgehoben; beide Gleichungen sind voneinander verschieden. Da die beiden Spineinstellungen s_z aber noch nicht über Λ miteinander verkoppelt worden sind, müssen auch nicht beide Gleichungen simultan erfüllt werden – jede für sich liefert bereits eine mögliche Dispersionsbeziehung $E_{s_z}(k_x)$.

Erst beim Einschalten von λ wird dies obligatorisch, und die unter Beachtung von (3.26) zu erhaltende Lösung beschränkt sich auf die ihnen gemeinsamen Schnittpunkte, ergibt also einen diskreten Satz von nur wenigen Wertepaaren (k_x, E) . Oben gemachter Vorbehalte wegen wurden diese hier jedoch nicht bestimmt. Vielmehr lässt sich auch ohne Einbeziehung numerischer Unsicherheiten, die dabei unumgänglich entstünden, das Grundsätzliche der Erscheinung wie folgt beleuchten:

Unter Beachtung, dass die Komponenten von (3.27) entweder rein reell (für Spin \uparrow) oder aber rein imaginär (für Spin \downarrow) sind, erhält man, wenn man mit (3.64) in (3.63) hineingeht:

$$(3.68) \quad J_x^{S_z} = |\Psi_{\uparrow}|^2 - |\Psi_{\downarrow}|^2$$

Formal stimmt diese Größe (für $v_F = 1$) mit jener für die *Einstellung* des Spins überein (durch zwei jeweils gleiche Komponenten, deren Index (A/B) von daher fortgelassen werden konnte, entfällt der Faktor $\frac{1}{2}$). Hier handelt es sich aber um dessen *Transport* am Rande der Probe und im Punkte K . Dieser wird im Allgemeinen von Null verschieden sein. Nur durch die Anpassung eines weiteren Parameters, beispielsweise Δ , experimentell leichter realisierbar aber über die Änderung der Feldstärke B , vermag ein entsprechender Abgleich zu erfolgen, welcher den Phasenübergang ankündigt.

Hingegen kann der Ladungs- und Teilchentransport

$$(3.69) \quad J_x = 2 \cdot \left(|\Psi_{\uparrow}|^2 + |\Psi_{\downarrow}|^2 \right)$$

am Rande nicht zum Verschwinden gebracht werden, da ansonsten die Wellenfunktion in all ihren Komponenten übereinstimmend gleich Null zu sein hätte, was bedeuten würde, dass dort gar kein Zustand vorhanden wäre und der Rand – im Gegensatz zur Annahme – entsprechend enger gezogen werden müsste.

Im Probeninneren war eine Richtungsumkehr beim Strome selbst (3.62) vorhin auch nur deshalb möglich, weil sich die Betrachtung auf die Nullmoden beschränkte, und sich bei den mit $E = 0$ verträglichen Zuständen entweder die eine (bei $p = 0$) oder sogar beide (bei $p = -1$) Spin-Komponenten als intransportabel erwiesen, sodass auch der Teilchen-Strom dann nicht mehr von beiden Komponenten

gemeinsam getragen werden konnte bzw. musste. Ein Verschwinden der Wellenfunktion ging damit aber nicht einher, da die Bedingung (3.64) im Innern einer unbegrenzten Probe nicht erfüllt zu werden brauchte, und jene Komponente des Spins, die zwar grundsätzlich vorhanden war, aber einen Strom nicht zu tragen vermochte, doch bei der Besetzung des Atoms B auftrat. Für andere Zustände mit $p \neq 0, -1$ ist der Strom aber gleichwohl zweikomponentig, vergleiche hierzu die oben geschilderte Abwandlung der Formel (3.53). Für die Randzustände tun sich entsprechende Möglichkeiten mit $E \neq 0$ trotz der einengenden Forderung (3.64) andererseits dadurch wiederum leichter auf, als dass bei ihnen die Beschränkung auf ein ganzzahliges p in (3.26) entfällt.

Es soll noch kurz auf eine andere Randbedingung eingegangen werden, und zwar jene, die sich bei Betrachtung einer Halbebene $x \geq 0$ ergibt; in Abb. 2.1 ist das eine Zickzack-Kante, auf der zum Beispiel die A-Atome „genullt“ werden, das heißt, in den Wellenfunktionen (3.27) verschwinden bei $x = 0$ die erste und die dritte Komponente; dabei ist natürlich die Definition der Koordinate η in (3.19) und die Eichung (3.14) von y auf x zu revidieren. Die gestellte Forderung bedingt jedoch zwangsläufig auch noch das Verschwinden einer weiteren Komponente, und zwar zunächst rein formal entweder das der zweiten aufgrund der gleichen Zylinderfunktion oder aber des Vorfaktors wegen das der vierten Komponente, sodass am Rande zwar eine vollständige Polarisation des Spins erzwungen wird, ein Transport von Teilchen oder Spin entlang diesem jedoch unterbunden wird.

Dies ist auch anschaulich verständlich, da die A-Atome auf der Grenze $x = 0$ von jenen Partner-Atomen B, die links derselben liegen, abgetrennt wurden, und auch nach innen hin nur noch mit jeweils einem einzigen der B-Atome in Verbindung stehen. Da die besagte Bindung darüber hinaus auch noch in x-Richtung, also genau senkrecht zum Rande verläuft, kann durch sie eine Beeinflussung der Transportvorgänge in der nächst weiter innen liegenden Kette ABABA, entlang derer eine Verschiebung von Teilchen aufs Ganze gesehen natürlich nur in y-Richtung stattzufinden vermag, wenigstens in einer direkten Weise nicht mehr eintreten. Lediglich über die Verschiebung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten an den einzelnen Atomen, die vom Rande ausgehend ihren Ursprung nimmt, ist ein allerdings eher indirekt zu denkender Einfluss nicht ganz auszuschließen, der aber auch dann nur von quantitativer, nicht aber qualitativer Art sein wird. Falls hingegen die B-Atome auf der Grenze liegen und deshalb zu nullen sind, so ergibt sich die gleiche Schlussfolgerung zwar weniger direkt, im Endergebnis jedoch in einer sogar noch drastischeren Form, da als Rand – und gewissermaßen zur Untätigkeit verurteilt – statt einer halben nun eine volle AB-Kette fungieren wird.

Wollte man sich angesichts dessen nicht zu der etwas angestrengten Behauptung versteigen, es gäbe bei dieser Randbedingung keinerlei Einfluss auf das Innere – oder gar umgekehrt, dieser sei so groß, dass auch dort bloß noch die Nullmoden aufträten –, so bleibt nichts anderes übrig als zu konzedieren, dass eine angemessen quantitative Behandlung der Grenze $x = 0$ allein mit einer mehr mikroskopischen Betrachtung, als sie hier zugrunde liegt, gelingen könnte. Dies ergibt sich, zumindest für den hier zuerst betrachteten Fall der Grenzbedingung, wo die A-Atome bei $x = 0$ zu liegen kamen, schon daraus, dass diese mit nunmehr nur einer Bindung gleichsam „in der Luft“ hingen, und zweifellos werden diese „dangling bonds“ eine gegenseitige Absättigung und, damit verbunden, die Oberfläche auch eine entsprechende Rekonstruktion erfahren. Auch wenn hierbei keine zusätzliche Verzerrung

entstünde – bislang wurde eine solche stets als gar nicht vorhanden vorausgesetzt –, kann im Gegensatz zur „armchair“-Grenze die Beziehung (3.10) *nicht* für eine Aussage über die Wellenfunktion im Tale K' herangezogen werden, da die Grenze $x = 0$ eine Anwendbarkeit des Operators (3.7) vereitelt, da dieser auf der jetzt nicht mehr gegebenen Vertauschbarkeit der Atome A und B beruht und jene [(3.10)] erst nach sich zieht.

Eingedenk dieser Einschränkungen zeigt eine sorgfältige Untersuchung im Rahmen der Kontinuumsnäherung, welche der hier vorliegenden Arbeit zugrundeliegt und den eine mikroskopische Beschreibung bei Weitem sprengen würde, dass die Matrix-Gleichung (3.20) für das Tal K mit der Randbedingung bei $x = 0$ auch unter Berücksichtigung der Tatsache, dass eine dort verschwindende Wellenfunktion an gleicher Stelle durchaus eine von Null verschiedene Ableitung aufzuweisen vermag, letztlich nur mit der Funktion (3.39) erfüllt werden kann, denn die anderenfalls sich ergebende Forderung $D_p(\eta_0) = pD_{p-1}(\eta_0) = 0$ ist für $p \neq 0$ überbestimmt, und auch für $p = 0$ [siehe (3.37)] besitzt $D_0(\eta_0)$ keine (endliche) Nullstelle. Diese im Allgemeinen, also für $B \gtrsim B_\Delta$ gültige Aussage bekräftigt demzufolge die bereits oben angedeutete Vorstellung, mit der bei $x = 0$ vorliegenden Randbedingung seien allein nur die Nullmoden [die Funktion (3.39) entwickelt sich ja aus einer solchen bzw. wieder in eine solche zurück] verträglich, erfährt aber für $B = B_\Delta$ insofern eine Ausnahme oder vielmehr Erweiterung, als nun, bei einer ganz bestimmten Feldstärke, neben (3.39) auch noch die (dann ebenfalls exakte) Nullmode (3.46) hinzutritt. Zwar ergeben sich in allen hier als zulässig erkannten Fällen bei beliebigem B am Rande der Probe (wenigstens im Kontinuumsmodell) weder Spin- noch Stromfluss, und damit auch keine Möglichkeit, über die *Art* des Phasenüberganges irgendeine Aussage zu machen, dafür jedoch eindeutig über die Feldstärke, bei der dieser eintritt.

In organischer Zusammenschau alles bisher Gesagten entsteht nun aus den bis jetzt vorliegenden Mosaiksteinchen das folgende Bild:

- (1) Bei Erfüllung der Bedingung (3.58), also bei $B = B_\Delta$ findet ein Phasenübergang statt.
- (2) Bei vorhandenem Teilchenstrom ist dieser von einer Richtungsumkehr des Spinstromes am Probenrande gekennzeichnet und kann gegebenenfalls über diesen experimentell auch nachgewiesen werden.
- (3) Da in beiden Fällen, für $B < B_\Delta$ und $B > B_\Delta$, ein von Null verschiedener Spinstrom, wenn auch in unterschiedlicher Richtung fließt, handelt es sich nicht um zwei grundsätzlich verschiedenartige, sondern vielmehr um zwei einander ähnelnde Phasen, und zwar sind dies, eben der Spinströme wegen, zwei QSH-(ähnliche) Phasen. Die Möglichkeit einer (verallgemeinerten) QSH-Phase auch bei Brechung der Zeitumkehrinvarianz durch ein äußeres Magnetfeld wurde in [72] nachgewiesen.

Insgesamt kann festgehalten werden, dass bei einer allmählichen Erhöhung der Feldstärke B ein Übergang zwischen zwei QSH-(ähnlichen) Phasen stattfindet, und zwar liegt bei schwachem Felde $B < B_\Delta$ der echte QSH-Zustand mit seinen helikalen, also spingefilterten Randzuständen vor, während sich bei höheren Feldstärken $B > B_\Delta$ unter Richtungsumkehr des Spinstromes eine zweite, QSH-ähnliche Phase ausbildet, die ebenfalls spingefilterte Randzustände aufweist.

3.5. Hamilton-Operator ohne Magnetfeld

In den beiden noch folgenden Abschnitten sollen Bereiche verschiedener Art aneinandergesetzt werden, darunter auch solche ohne Magnetfeld. Es ist daher erforderlich, die Ausdrücke für die unter diesen Bedingungen gültigen Wellenfunktionen aufzusuchen, denn die Transformation (3.19) versagt jetzt. Einfacher als ein Grenzübergang, bei dem sowohl Argument als auch Index der Zylinderfunktionen in den Ausdrücken (3.27), (3.28) etc. in einer über (3.29) und (3.19) verkoppelten Weise gegen Unendlich zu gehen hätten, ist eine Neubetrachtung des Hamilton-Operators. Statt (3.18) ergibt sich unter Beachtung von (3.17) für den Fall $B = 0$ nunmehr

$$(3.70) \quad \begin{pmatrix} V_0 - E + \Delta & k_x - A_0 - \partial_y & 0 & 0 \\ k_x - A_0 + \partial_y & V_0 - E - \Delta & +i\lambda & 0 \\ 0 & -i\lambda & V_0 - E - \Delta & k_x - A_0 - \partial_y \\ 0 & 0 & k_x - A_0 + \partial_y & V_0 - E + \Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{A\uparrow}(y) \\ \Psi_{B\uparrow}(y) \\ \Psi_{A\downarrow}(y) \\ \Psi_{B\downarrow}(y) \end{pmatrix} = 0.$$

Macht man nun ähnlich wie zuvor schon für die x-Richtung jetzt auch für die Abhängigkeit von y – eine solche liegt ja anders als in (3.14) auch formal nun nicht mehr vor – den Ansatz eines Faktors $\exp(\pm iq_{y,\alpha}y)$ in der Wellenfunktion, so verwandelt Letzterer den Operator $\partial_y \mapsto \pm iq_{y,\alpha}$. Das doppelte Vorzeichen wurde gewählt, um beide Laufrichtungen der Welle erfassen zu können, obwohl in der folgenden Gleichung unter $q_{y,\alpha}$, sofern diese Größe überhaupt reell ist, stets die positive Wurzel verstanden sein soll; der Index α wird später erklärt. Eine nicht-triviale Lösung des Gleichungssystems (3.70) ist bekanntermaßen nur beim Verschwinden seiner Koeffizientendeterminante möglich, was

$$(3.71) \quad q_{y,\alpha} = \sqrt{(E - V_0)^2 - (k_x - A_0)^2 - \Delta^2 - \alpha\lambda \cdot (E - V_0 - \Delta)}$$

bedeutet, beziehungsweise nach der Energie E aufgelöst:

$$(3.72) \quad E_{\alpha,\pm}(k_x, q_{y,\alpha}) = V_0 + \alpha\lambda/2 \pm \sqrt{(k_x - A_0)^2 + q_{y,\alpha}^2 + (\Delta - \alpha\lambda/2)^2}$$

Das doppelte Vorzeichen vor der Wurzel, das zusätzlich (neben α) auch als Index an die Energie E angefügt wurde, dabei aber nicht mit jenem von $q_{y,\alpha}$ zu verwechseln ist, realisiert [ganz analog zu Gleichung (3.44)] die Unterscheidung zwischen Teilchen- und Lochzuständen – beziehungsweise solchen, die daraus hervorgehen; vergleiche dazu Abschnitt 2.3 und die dort angegebene Literaturstelle [34]. Letztere Behauptung erhellt sich sofort, indem man $V_0 = A_0 = \Delta = \lambda = 0$ setzt und mit Formel (2.18) vergleicht.

Ohne die hier unwesentliche Abhängigkeit von x lauten die normierten Wellenfunktionen im SOAS-Bereich damit wie folgt:

$$(3.73) \quad \Psi_{SOAS,\alpha}^{(\pm q_{y,\alpha})}(y) = \frac{1}{2} \exp(\pm iq_{y,\alpha}y) \cdot \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \delta_\alpha} \cdot \exp(\mp i\theta_\alpha) \\ \sqrt{1 - \delta_\alpha} \\ -\alpha i \cdot \sqrt{1 - \delta_\alpha} \\ -\alpha i \cdot \sqrt{1 + \delta_\alpha} \cdot \exp(\pm i\theta_\alpha) \end{pmatrix}$$

Hierbei wurden die Abkürzungen $\delta_\alpha := \frac{\Delta - \alpha\lambda/2}{E - V_0 - \alpha\lambda/2}$ und $w_\alpha := \sqrt{\frac{1 - \delta_\alpha}{1 + \delta_\alpha}} \equiv \sqrt{\frac{E - V_0 - \Delta}{E - V_0 + \Delta - \alpha\lambda}}$ sowie über $\tan \theta_\alpha := \frac{q_{y,\alpha}}{k_x - A_0}$ der Winkel θ_α [analog zu (2.16)] eingeführt, sodass

$$(3.74) \quad \exp(\pm i\theta_\alpha) \equiv \cos \theta_\alpha \pm i \sin \theta_\alpha = w_\alpha \cdot \frac{k_x - A_0 \pm iq_{y,\alpha}}{E - V_0 - \Delta}$$

ist. Der auch als Index benutzte Vorzeichenfaktor $\alpha = \pm 1$ ist dabei im Zusammenhang mit dem (realen) Spin zu sehen; allerdings bedeutet er nicht eine bestimmte Einstellung desselben, sondern gibt vielmehr an, wie die beiden möglichen – und dabei gleichzeitig vorhandenen – Stellungen des Spins miteinander zu überlagern sind. Dies deutet sich bereits aus der Tatsache an, dass er stets in Verbindung mit der Kopplung λ auftritt, insbesondere in (3.72), es wird klarer beim Vergleich von (3.73) mit den Indices im allgemeinen Spinor (3.11) und ist schließlich nicht mehr zu übersehen, wenn man zu dem Fall fehlender Kopplung $\lambda = 0$ übergeht:

Im Normal- oder Nullbereich (im Folgenden kurz als „N-Bereich“ apostrophiert) seien *sämtliche* Parameter $V_0 = A_0 = \Delta = \lambda = 0$ und selbstverständlich auch das Magnetfeld $B = 0$. Dann wird aus (3.73)

$$(3.75) \quad \Psi_N^{(\pm k_y)}(y) = \frac{1}{2} \exp(\pm i k_y y) \cdot \begin{pmatrix} \exp(\mp i \phi) \\ 1 \\ -\alpha i \\ -\alpha i \cdot \exp(\pm i \phi) \end{pmatrix}.$$

Hierbei ist natürlich $\tan \phi = \frac{k_y}{k_x}$, sodass $\exp(\pm i \phi) = \frac{k_x \pm i k_y}{E}$ gilt. Da die Spins nun, wie bereits gesagt, entkoppelt sind, können stattdessen auch die beiden aufgetrennten Linearkombinationen

$$(3.76) \quad \Psi_{N,\uparrow}^{(\pm k_y)}(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(\pm i k_y y) \cdot \begin{pmatrix} \exp(\mp i \phi) \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

und

$$(3.77) \quad \Psi_{N,\downarrow}^{(\pm k_y)}(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(\pm i k_y y) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \exp(\pm i \phi) \end{pmatrix}$$

Verwendung finden. Die entsprechenden Ω -Matrizen finden sich im Anhang.

Es ist bemerkenswert, dass im SOAS-Bereich eine Verkleinerung der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Teilchen (und der Antiteilchen) gegenüber jener, die im N-Bereiche vorliegt und durch (2.17) gegeben ist, eintritt. Dies folgt sowohl aus der Dispersionsrelation (3.72) über $v_{x,\alpha} = \frac{\partial E}{\partial k_x}$ und $v_{y,\alpha} = \frac{\partial E}{\partial q_{y,\alpha}}$ als auch aus der Wellenfunktion (3.73) über die allgemeine Formel für die Teilchenstromdichte $\vec{J} = \Psi^+ (v_F \vec{\sigma}) \Psi$; der Deutlichkeit halber wurde der zuvor gleich Eins gesetzte Faktor v_F wieder eingefügt. Auf beiden Wegen ergibt sich

$$(3.78) \quad \vec{J} = v_{F,\alpha}^{\text{eff}} \cdot \begin{pmatrix} \cos \theta_\alpha \\ \pm \sin \theta_\alpha \end{pmatrix}$$

mit der effektiven Fermi-Geschwindigkeit

$$(3.79) \quad v_{F,\alpha}^{\text{eff}} := v_F \cdot \sqrt{1 - \delta_\alpha^2}.$$

Anders als die bereits im Abschnitt 2.7 angedeutete Möglichkeit einer Veränderung der Fermi-Geschwindigkeit, wie sie etwa durch mechanische Verzerrungen bewirkt werden könnte, die durch geringfügig modifizierten Überlapp den Parameter t in (2.17) beeinflussen – was sich aber lediglich im Promill- oder allenfalls Prozentbereiche abzuspielen vermag –, ist die effektive Ausbreitungsgeschwindigkeit (3.79) je

nach Wahl der Parameter gegenüber der in (2.17) definierten Fermi-Geschwindigkeit v_F deutlich bis drastisch verringert, dabei stark von der Energie abhängig und kann sogar, wenigstens für bestimmte Werte derselben, gleich Null werden.

Wie aus der Lichtoptik bekannt und analog zur Teilchenoptik, die u.a. die Bewegung von Elektronen in Raumbereichen beschreibt, in denen, wie das etwa in Elektronenmikroskopen der Fall ist, ein unterschiedliches Potential vorliegt, tritt beim Übergang eines Teilchens oder einer Welle in ein Medium mit veränderter Ausbreitungsgeschwindigkeit eine Ablenkung (Brechung) auf – beziehungsweise, wenn ein solcher nicht möglich sein sollte, eine Totalreflexion. Es kann nämlich sein, dass die Ausbreitung im SOAS-Bereiche, zumindest wenn dieser beliebig ausgedehnt ist, gar nicht statthaft sein wird, und zwar dann, wenn $q_{y,\alpha}$ imaginär ist; nach (3.71) ist dies unter allen Umständen (also für alle k_x) dann der Fall, wenn die Energie E im Intervall

$$(3.80) \quad [\min \{V_0 + \Delta; V_0 + \alpha\lambda - \Delta\} \dots \max \{V_0 + \Delta; V_0 + \alpha\lambda - \Delta\}]$$

liegt. An den Grenzen dieses Bereichs wird $\delta_\alpha = \pm 1$ und (3.79) verschwindet.

Außerhalb desselben ist $|\delta_\alpha| < 1$ und damit w_α ebenso wie $q_{y,\alpha}$ reell. Demzufolge kann die Abtrennung des Realteils in (3.74) leicht vorgenommen werden, und sie ergibt unmittelbar

$$(3.81) \quad \frac{\cos \theta_\alpha}{w_\alpha} = \frac{k_x - A_0}{E - V_0 - \Delta}$$

(der Imaginärteil liefert demgegenüber nichts Neues). Da die rechte Seite nicht von α abhängt, gilt diese Gleichung für beide Werte des genannten Parameters, sodass letztlich

$$(3.82) \quad \frac{\cos \theta_+}{w_+} = \frac{\cos \theta_-}{w_-} = \frac{E \cdot \cos \phi_N - A_0}{E - V_0 - \Delta}$$

ist, wobei noch $k_x = E \cdot \cos \phi_N$ eingesetzt wurde. Der angefügte Index N soll in diesem Zusammenhange darauf hinweisen, dass mit dem Winkel ϕ die Ausbreitungsrichtung im N-Bereich gemeint ist. Neben der Gesamtenergie E ist ja die Impulskomponente k_x eine Invariante der Bewegung, wenn nach wie vor angenommen wird, dass eine Änderung – welcher Art auch immer – nur in der y -Richtung stattfinden kann, während die Homogenität in der x -Richtung grundsätzlich unangetastet bleiben soll. Je nachdem, für wie viele Werte von α die Gleichung (3.81) bzw. (3.82) erfüllbar ist, kommt es zu einer Energielücke, zur Polarisierung oder zur Doppelbrechung; siehe Anhang.

Das Faktum einer Änderung von Richtung und/oder Geschwindigkeit ist natürlich insoweit ein wichtiger Umstand, als es ihn zu berücksichtigen gilt, wenn man (wie in Abschnitt 3.7) Transmissionen aus SOAS-Gebieten heraus oder durch solche hindurch berechnen will.

3.6. Lineare magnetische Strukturen: Wellenleiter

Es ist zu konzedieren, dass die Präsentation der Abbn. 3.6, 3.7 und 3.10 in Abschnitt 3.4 nicht ohne einen gewissen inneren Vorbehalt geschah. Denn wie kann in einer äußerlich in x - und y -Richtung völlig homogenen Situation eine Abhängigkeit messbarer Größen von der Koordinate y auftauchen?

Letztlich ergibt sich dies als ein Artefakt der Landau-Eichung (3.14). Selbst wenn man diese mit ihren Implikationen als gegeben hin- und die Befüllung des

gewünschten Energieniveaus mit nur einem Elektron annimmt, so erscheint dessen Verweilen, eine homogene Situation vorausgesetzt, während der erforderlichen Dauer der Messung – und unbeeinflusst durch diese – an demselben Orte y_{0i} nur schwer vorstellbar. Bekanntlich [36] sind die Landau-Niveaus hochgradig entartet. Ohne Berücksichtigung von Spin- und Valley-Freiheitsgraden ergibt sich eine makroskopische Entartung $g_A = \Phi/\Phi_0$ proportional zur Fläche A der Probe aus dem Verhältnis des Gesamtflusses $\Phi = B \cdot A$ zum elementaren Flussquantum $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/e$, so dass folglich die Linearabmessungen eines solchen Zustandes durch die magnetische Länge (2.37) gegeben sind. In der dimensionslosen Variable η [Gleichung (3.19)] bedeutet dies einen Abstand der Größenordnung Eins bis zum jeweils benachbarten Zustand. Im entsprechend verschobenen Zusammenwirken vieler solcher Zustände (und im Verein mit der Unschärferelation) erfolgt eine Ausmittelung der Größen S_y und J_x ; die Integration geschieht dabei gewissermaßen automatisch.

Während also in der homogenen Situation S_z^{ges} als messbare Größe, zum Beispiel in Abhängigkeit von B (siehe Abb. 3.8) überlebt, ist seine räumliche Verteilung, ebenso wie diejenige von S_y , J_x und ρ nicht feststellbar. Ja, man kann sagen, dass eine solche überhaupt nicht existiert. Anders wird dies, wenn die Homogenität aufgegeben und Randbedingungen eingeführt werden, die den Zustand auf einen bestimmten Ort oder Bereich festnageln; gegenüber Abb. 3.6 werden dabei natürlich Veränderungen eintreten, die sich, von den Randbereichen ausgehend, auch auf das Innere der Verteilungen auszuwirken befähigt sind.

Genau dies soll jetzt geschehen, und zwar sollen drei verschiedene Konfigurationen betrachtet werden, die, nur in y-Richtung veränderlich und damit gegebenenfalls dorthin als Barrieren wirkend, unter geeigneten Umständen in x-Richtung als Wellenleiter [73] fungieren können. Ihnen allen gemeinsam ist, dass ein mittlerer Bereich $y \in [-L; +L]$, in welchem die beiden Spin-Bahn-Kopplungen sowie eventuell noch eine mechanische Verzerrung wirksam sein sollen, von halbunendlichen Bereichen umschlossen wird, in denen die einzige Einwirkung, der die Graphenschicht ausgesetzt ist, durch ein von außen angelegtes Magnetfeld gegeben sei. Je nach dessen Polung ergeben sich unterschiedliche Fälle:

- Konfiguration I – der antiparallele Fall, in symbolischer Schreibweise: $+B / \text{SOAS} / -B$, d.h. $B_z = +B$ für $y < -L$ und $B_z = -B$ für $y > +L$ sowie $B_z = 0$ dazwischen.
- Konfiguration II – paralleler Fall, in symbolischer Schreibweise: $+B / \text{SOAS} / +B$, also $B_z = +B$ für $y < -L$ und $y > +L$ (und wieder $B_z = 0$ dazwischen).
- Konfiguration III – symmetrischer Fall mit Gegenfeld im mittleren Bereich, in symbolischer Schreibweise also: $+B / \text{SOAS} - B / +B$. Wieder ist $B_z = +B$ für $y < -L$ und $y > +L$, aber $B_z = -B$ dazwischen.

Der letzte Fall wurde gewählt, damit auch eine Konfiguration untersucht wird, bei der (im mittleren Bereich) all' jene Einflussgrößen zusammentreten, wie sie auch in der homogenen Situation des Abschnittes 3.3 betrachtet wurden; nur vom Zeeman-Effekte soll dabei abgesehen werden. Die letztgenannte Einschränkung gilt allgemein (für alle Bereiche) in diesem und dem nächsten Abschnitt und gründet sich auf die Kleinheit des Effektes, etwa 0,01 meV bei der hier gewählten Feldstärke $B = 0,2$ T (vergleiche dazu auch Tab. 3.4 mit Tab. 3.5, insbesondere deren Einträge in der jeweils vorletzten Zeile). Die (halbe) Breite des mittleren Bereiches wurde

an die magnetische Länge angepasst: $L = l_B := 1/\sqrt{B} = 57,4$ nm. Die dort herrschende Spin-Bahn-Kopplung werde (außer im Einschub der Abb. 3.12) durch die beiden Standard-Parameter (3.47) gegeben, und die mechanische Verzerrung, die (vgl. Abschnitt 2.7) ein Promill betragen soll, führt, wenn sie denn eingeschaltet wird, zu $A_0 = 1,6 \cdot 10^7 \text{m}^{-1}$ und $V_0 = -20$ meV.

Es werden nun die drei Konfigurationen im Einzelnen besprochen.

3.6.1. Konfiguration I: Antiparalleler Fall

Zur Beschreibung der hier vorgesehenen Magnetfeld-Konfiguration ist das (stetige) Vektorpotential

$$(3.83) \quad A_x(y) = -B \cdot \begin{cases} L + y & \text{für } y < -L \\ 0 & \text{für } y \in [-L; +L] \\ L - y & \text{für } y > +L \end{cases}$$

geeignet. Als Wellenfunktionen finden Verwendung: im Mittelbereich (ohne Magnetfeld) die Funktionen (3.73), und für die magnetisierten Außenbereiche (ohne SOAS) können prinzipiell die Funktionen (2.46) aus Kapitel 2 herangezogen werden. Es gilt aber zu bedenken, dass erstens der dort enthaltene Index wegen der durchbrochenen Homogenität kein unbedingt ganzzahliger mehr sein muss, und dass zweitens eine Erweiterung auf Viererspinoren stattzufinden hat, die den echten Spin miteinbezieht. In diesem Sinne fällt die Wahl auf die folgenden Funktionen, die im Anhang niedergeschrieben sind: Im Bereich $y < -L$ die Funktion (6.14) [anstelle von (6.12), welche für $y \sim \eta \mapsto -\infty$ divergiert] mit ihrem Gegenstück für Spin \downarrow sowie im Bereich $y > +L$ entsprechend die Funktion (6.15) und deren Pendant. Weitab vom Übergangsgebiet $|y| \gg L$ verschwinden diese allesamt. Die im mittleren Bereiche selbst auftretenden Funktionen (3.73) [insgesamt ebenfalls vier] sind in der Matrix (6.22) zusammengefasst.

Die Phasenfaktoren $\exp(ik_x x)$ für die Abhängigkeit von x sind hier nicht aufgeschrieben worden, da sie beim Aneinanderfügen der Wellenfunktionen ohnehin herausfallen (dies gilt entlang jeder Parallelen zur x-Achse). Es geht nämlich jetzt darum, die Koeffizienten $c_{1..8}$ der Wellenfunktionen so zu bestimmen, dass diese an den Grenzen $y = \pm L$ stetig aneinanderstoßen. Da die Dirac-Gleichung nur von erster Ordnung auch in Bezug auf den Ort ist, muss hier, anders als bei der Schrödinger-Gleichung, lediglich die Stetigkeit der Funktionen selbst, nicht aber ihrer ersten Ableitungen gefordert werden.

Die durch die Linearisierung bezüglich des Ortsoperators verminderte Ordnung wird bekanntlich durch eine höhere Zahl an Komponenten erkauft, sodass die Anzahl der insgesamt zu erfüllenden Bedingungen letztlich dieselbe ist. Das sich auf diese Weise ergebende Gleichungssystem sei einmal hierher gesetzt:

$$c_1 \cdot \begin{pmatrix} D_1 \\ D_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ D_1 \\ D_0 \end{pmatrix} = c_3 \cdot \begin{pmatrix} e^{-i\theta_+} \\ w_+ \\ -iw_+ \\ -ie^{i\theta_+} \end{pmatrix} + c_4 \cdot \begin{pmatrix} e^{i\theta_+} \\ w_+ \\ -iw_+ \\ -ie^{-i\theta_+} \end{pmatrix} + \dots$$

$$+ c_5 \cdot \begin{pmatrix} e^{-i\theta_-} \\ w_- \\ iw_- \\ ie^{i\theta_-} \end{pmatrix} + c_6 \cdot \begin{pmatrix} e^{i\theta_-} \\ w_- \\ iw_- \\ ie^{-i\theta_-} \end{pmatrix}$$

(3.84)

und

$$c_3 Q_+ \cdot \begin{pmatrix} e^{-i\theta_+} \\ w_+ \\ -iw_+ \\ -ie^{i\theta_+} \end{pmatrix} + c_4 Q_+^{-1} \cdot \begin{pmatrix} e^{i\theta_+} \\ w_+ \\ -iw_+ \\ -ie^{-i\theta_+} \end{pmatrix} + c_5 Q_- \cdot \begin{pmatrix} e^{-i\theta_-} \\ w_- \\ iw_- \\ ie^{i\theta_-} \end{pmatrix} + \dots$$

$$+ c_6 Q_-^{-1} \cdot \begin{pmatrix} e^{i\theta_-} \\ w_- \\ iw_- \\ ie^{-i\theta_-} \end{pmatrix} = c_7 \cdot \begin{pmatrix} D_0 \\ D_1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_8 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ D_0 \\ D_1 \end{pmatrix}$$

Neben bereits bekannten Abkürzungen wurden zusätzlich noch die folgenden eingeführt: $D_0 := D_{\nu_0}(\eta_{gr})$ und $D_1 := \tilde{\nu}_0 \cdot D_{\nu_0-1}(\eta_{gr})$ mit $\tilde{\nu}_0 := \frac{E}{\sqrt{2B}}$ und $\nu_0 := \tilde{\nu}_0^2 \equiv \frac{E^2}{2B}$ als Index sowie $\eta_{gr} := \sqrt{2/B} \cdot k_x$ als Argument, außerdem der Phasenfaktor $Q_\alpha := \exp(2iq_{y,\alpha}L)$.

Eine Normierung der Wellenfunktionen insbesondere in den Außenbereichen erübrigt sich, da eine solche durch die Koeffizienten c_i ohnehin aufgefangen würde. Als Bedingung für die (nicht-triviale) Lösbarkeit des obigen Gleichungssystems erweist sich schließlich das Verschwinden der Determinante einer Matrix aus 4×4 Elementen, nämlich:

(3.85)

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} D_0 e^{-i\theta_+} - D_1 w_+ \\ D_1 e^{-i\theta_+} - D_0 w_+ \end{pmatrix} & Q_+ \begin{pmatrix} D_0 e^{i\theta_+} - D_1 w_+ \\ D_1 e^{i\theta_+} - D_0 w_+ \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} D_0 e^{-i\theta_-} - D_1 w_- \\ D_1 e^{-i\theta_-} - D_0 w_- \end{pmatrix} & Q_- \begin{pmatrix} -D_0 e^{i\theta_-} + D_1 w_- \\ -D_1 e^{i\theta_-} + D_0 w_- \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} D_1 e^{i\theta_+} - D_0 w_+ \\ D_0 e^{i\theta_+} - D_1 w_+ \end{pmatrix} & Q_+ \begin{pmatrix} D_1 e^{-i\theta_+} - D_0 w_+ \\ D_0 e^{-i\theta_+} - D_1 w_+ \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -D_1 e^{i\theta_-} + D_0 w_- \\ -D_0 e^{i\theta_-} + D_1 w_- \end{pmatrix} & Q_- \begin{pmatrix} D_1 e^{-i\theta_-} - D_0 w_- \\ D_0 e^{-i\theta_-} - D_1 w_- \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

Diese enthält, schlüsselt man die Abkürzungen auf, neben den konstanten Größen L , B , A_0 , V_0 , Δ und λ nur noch die beiden Variablen k_x und E , deren Zusammenhang, mithin die Dispersionsrelation $E(k_x)$ numerisch auszuwerten ist. Dies geschah (für die am niedrigsten liegenden Teilchenzustände) mit Hilfe des Programms Mathematica, Version 7, und die Ergebnisse wurden, einschließlich diverser Sonderfälle, bei denen bestimmte Größen gleich Null gesetzt wurden, in die Abbn. 3.11 und 3.12 eingezeichnet. Grundsätzlich ist festzustellen, dass sich für genügend negative k_x wieder die Landau-Niveaus (3.43) ergeben, während sich nach einem eventuellen Minimum für große (positive) k_x eine annähernd lineare Dispersion einstellt. Dieses für beide Laufrichtungen so unterschiedliche Verhalten kann nicht nur analytisch-formal als Grenzwert (siehe Anhang) hergeleitet, sondern auch, wenigstens auf qualitativer Ebene, in einem klassisch-anschaulichen Bilde verstanden werden, welches schon in Abschnitt 2.4 Verwendung fand.

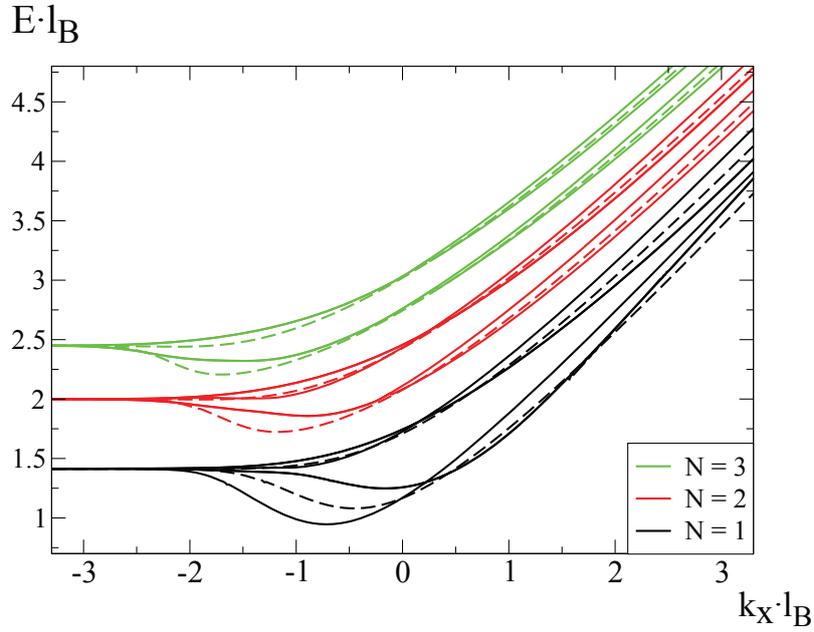


ABBILDUNG 3.11. Dispersionsbeziehungen $E(k_x)$ für den Fall antiparalleler Magnetfelder in den beiden Außenbereichen (Konfiguration I) ohne Vorhandensein einer mechanischen Verzerrung für die Zustände geringster positiver Energie. Die ausgezogenen Kurven gelten bei Vorliegen einer Spin-Bahn-Kopplung mit den Standardwerten (3.47), die gestrichelten hingegen dann, wenn auch diese ausgeschaltet wird und der mittlere Bezirk damit zu einem N -Bereich mutiert. Durch die Farbwahl wurden die Zustände (sowohl für die gestrichelten als auch die ausgezogenen Kurven und in einer bis Abb. 3.16 einheitlichen Weise) derart sortiert, dass sie leicht denjenigen Landau-Niveaus zugeordnet werden können, aus denen sie sich entwickeln und in die sie von Abb. 3.13 ab (bei Konf. II und III) auch wieder einmünden. Es ist davon auszugehen, dass nicht nur, wie es hier der Fall ist, die dem Niveau $N = 1$ zugeordneten Zustände, sondern (analog zu Abb. 3.12) auch jene, die zu $N = 2$ und $N = 3$ gehören, bereits für $-2 \lesssim k_x \cdot l_B \lesssim 0$ in jeweils vier Niveaus mit unterscheidbarer Energie aufspalten. Bei bzw. von der numerischen Lösung wurden diese jedoch nicht erfasst, mutmaßlich wegen ihrer Nähe zu benachbarten, insbesondere unmittelbar darunter sich befindenden Energieniveaus, die in der Berechnung eventuell Anlass zu Instabilitäten gegeben haben können. Durch den Bezug auf die magnetische Länge l_B wird die Darstellung bezüglich beider Achsen dimensionslos; auf der Abszisse entspricht eine Einheit $1,74 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ und auf der Ordinate $11,47 \text{ meV}$.

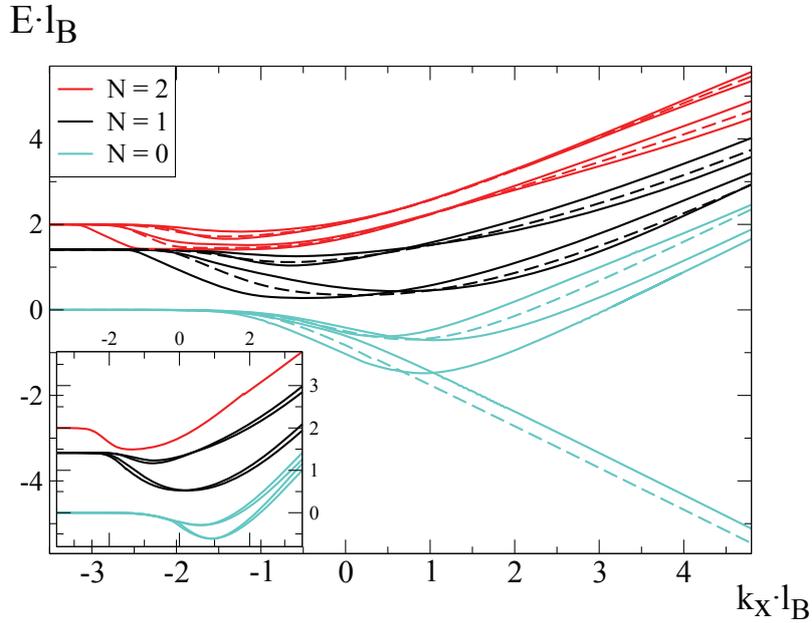


ABBILDUNG 3.12. Analog zu Abb. 3.11, aber mit zusätzlicher Berücksichtigung einer mechanischen Verzerrung. Wie zuvor findet bei den gestrichelten Kurven allein diese, nicht jedoch auch die Spin-Bahn-Kopplung ihre Beachtung. Überdies wurden auch noch jene Zustände wiedergegeben, die aus dem Niveau $N = 0$ entspringen; für die gegebenen Parameter wird dabei eine interessante 3+1-Struktur sichtbar. Dagegen wurde im Einschub der invertierte Parametersatz (also $\lambda = 3$ meV und $\Delta = 13$ meV) zu Grunde gelegt. Auffällig hierbei ist nicht nur die grundsätzlich geringere Aufspaltung zueinander gehöriger Niveaus (man beachte den gleichen Maßstab der Energieachse; der Übersichtlichkeit halber wurde für $N = 2$ nur das niedrigste Niveau dargestellt, und auch die gestrichelten Kurven für den Fall fehlender Spin-Bahn-Kopplung wurden fortgelassen – es sind natürlich dieselben wie im Hauptteil der Abbildung). Der erhöhte Wert von Δ vereitelt auch, dass sich ein Mitglied der ursprünglichen Nullmode von den anderen absondert, um für genügend große k_x gegen unbegrenzt *negative* Energien zu laufen. Ohne die Verzerrung bildet sich ein prinzipiell gleichartiges Bild aus.

Hierbei werden die Teilchenzustände mit $E > 0$ und $k_x < 0$ als nach links laufende Elektronen betrachtet, auf die die Linke-Hand-Regel anzuwenden ist. Gleichgültig, ob die Bewegung der Teilchen mit $y > +L$ oder $y < -L$ startet, ergibt sich, dass sämtliche Elektronen durch die auf sie einwirkende Lorentz-Kraft nur noch tiefer in ihren jeweiligen Bereich hineingetrieben werden, wo sie bloß ein homogenes

Feld (von einheitlicher, wenn auch beliebiger Polung) erfahren – eine Situation, die der Betrachtung in Abschnitt 2.4 zu Grunde lag und dort auf die Landau-Niveaus (2.47) führte.

Für $k_x > 0$ hingegen werden die Teilchen aus „ihrem“ Bereich herausgedrängt, durchfliegen den mittleren Bereich auf gerader Bahn – eine Streuung findet den Annahmen zufolge dabei nicht statt –, um dann in den anderen Außenbereich einzudringen, wo sich (bei vertauschter Polarität) das nämliche Spiel zu wiederholen beginnt. Insgesamt erfolgt also eine Bewegung entlang einer Schlangenlinie, die, indem sie nicht in sich zurückläuft, einer freien Bewegung ähnelt, wobei sich jene Phasen richtungsmäßig kompensieren, die das Teilchen in den einander entgegengesetzt magnetisierten Bereichen zubringt.

Indessen sollen auch die Grenzen einer solchen Sichtweise nicht verschwiegen werden, die nur das jeweilige Magnetfeld am Orte eines eindeutig lokalisierbaren Teilchens in Betracht zieht, ergäbe sich doch solcherart bei $k_x = 0$ ein abrupter Übergang von den Landau-Niveaus zu der linearen Dispersion bei $k_x > 0$. Denn für Teilchen, die aus dem Bereich $y \in [-L; +L]$ starten, führt jede, auch eine infinitesimal kleine Komponente $k_y \neq 0$ über kurz oder lang in einen der Randbereiche $|y| > L$ hinein, sodass die obige Überlegung nur dann keine Gültigkeit mehr zu beanspruchen vermöchte, wenn sich ein Teilchen finden ließe, das sich exakt parallel zur x-Achse bewegte. Selbst wenn man diese Möglichkeit der geringen Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens wegen nicht ohnehin vernachlässigen wollte, so würde sie doch nur insofern etwas prinzipiell Neues zu liefern imstande sein, als dass sich die mit ihr verbundene lineare Dispersion dann auch in den Bereich $k_x < 0$ hinein fortsetzen müsste; allerdings handelte es sich hierbei um eine instabile Situation.

Ein tatsächliches Verständnis erschließt sich erst durch die Quantenmechanik und die ihr inhärente Nichtlokalität, derzufolge die in den Außenbereichen herrschenden Magnetfelder auch dann auf ein Teilchen einzuwirken vermögen, wenn es sich dort gar nicht aufhält. Das dadurch gegebene Überlappen wird vielleicht bei einer vereinfachten Betrachtung ohne den Spin am besten verdeutlicht. Selbstverständlich können die entsprechenden Resultate, die in die Abbn. 3.11 und 3.12 gestrichelt eingezeichnet wurden, einfach durch das Nullsetzen der diesbezüglichen Parameter in der numerischen Rechnung erzielt werden. Es ist aber auch eine analytische Vereinfachung möglich, und zwar folgt aus $\Delta = \lambda = 0 \Rightarrow \delta_\alpha = 0 \Rightarrow w_\alpha = 1$, dass (3.81) in $\cos \theta = \frac{k_x - A_0}{E - V_0}$ übergeht und $Q_\alpha \mapsto Q_0 := \exp(2iq_{y,0}L)$ mit $q_{y,0} = \sqrt{(E - V_0)^2 - (k_x - A_0)^2}$ statt (3.71). Damit vereinfacht sich die Bedingung der verschwindenden Determinante auf

$$(3.86) \quad \det \begin{pmatrix} (D_0 e^{-i\theta} - D_1) & Q_0 (D_0 e^{i\theta} - D_1) \\ Q_0 (D_1 e^{-i\theta} - D_0) & (D_1 e^{i\theta} - D_0) \end{pmatrix} = 0,$$

was letztlich

$$(3.87) \quad \frac{Q_0 e^{i\theta} \pm 1}{Q_0 \pm e^{i\theta}} = \frac{D_1}{D_0}$$

impliziert. Die Vorzeichen sind gekoppelt, und so gibt es durch die verschiedenen Linearkombinationen, die symmetrische und die antisymmetrische, eine Aufspaltung in jeweils zwei auch energetisch unterschiedene Zustände; nur im Grenzfall $k_x \mapsto -\infty$ sind die Landau-Niveaus zweifach (bzw. mit Berücksichtigung des Spins eben vierfach) entartet.

Wie ein Vergleich der ausgezogenen mit den gestrichelten Kurven erweist, bedingt dies den Löwenanteil der Aufspaltung. Hinzu kommen jedoch, insbesondere bei steigendem k_x , noch weitere, wenn auch kleinere Aufspaltungen, die durch den Einfluss des Spins und seiner Wechselwirkungen, also Δ und λ verursacht werden. Wie der Einschub in Abb. 3.12 deutlich macht, ist die intrinsische Kopplung Δ , die nur die Energie *eines* Spins entsprechend seiner Einstellung verschiebt, dafür von geringerer Bedeutung und Wichtigkeit als die Rashba-Wechselwirkung λ , die die Kopplung beider Einstellungen vermittelt. Aus diesem Grunde wird der vertauschte Parametersatz, bei dem Δ gegenüber λ bevorzugt ist, für den Rest dieses Kapitels verworfen und nur noch von den Standardwerten (3.47) Gebrauch gemacht.

3.6.2. Konfiguration II: Paralleler Fall

Die Umpolung des Magnetfeldes im Bereich $y > +L$ bei der Konfiguration II erfordert ein gegenüber (3.83) etwas anderes Vektorpotential

$$(3.88) \quad A_x(y) = -B \cdot \begin{cases} y + L & \text{für } y < -L \\ 0 & \text{'' } y \in [-L; +L] \\ y - L & \text{'' } y > +L \end{cases} .$$

Die ansonsten recht ähnlich verlaufende Kalkulation wird in den Anhang verlegt, sodass hier gleich die Ergebnisse, die in den Abbn. 3.13 und 3.14 dargestellt sind, mitgeteilt werden können. Einen ersten Schritt zu ihrem Verständnis liefert wieder die klassische Betrachtung, die folgendes Bild ergibt: Für $k_x > 0$ werden die Elektronen, wenn sie sich nicht ohnehin schon dort befinden, in den Bereich $y > +L$ hineingetrieben, während sich die Teilchen mit $k_x < 0$ in $y < -L$ ansammeln. In beiden Fällen befinden sie sich am Ende in einem Bereich homogener Magnetisierung $B_z = +B$ und besetzen demzufolge, unabhängig von ihrer ursprünglich angenommenen Flugrichtung, die zugehörigen Landau-Niveaus (3.43); anschaulich erfolgt dabei eine Bewegung auf einem Gyrationkreis, der entgegen dem Uhrzeigersinne durchlaufen wird.

Da die ablenkende Lorentzkraft bekanntlich der Geschwindigkeit des Teilchens proportional ist, besteht jedoch, insbesondere für nicht zu große $|k_x|$, auch die Möglichkeit, dass die Bewegung der dann nur geringen Bahnkrümmung wegen sich nicht auf einen der beiden Außenbezirke beschränkt, sondern, über den mittleren Bereich auf gerader Bahn hinwegziehend, zwischen eben diesen beiden hin- und herpendelt. Da das Teilchen dabei im Durchschnitt ein geringeres B -Feld durch- und erfährt, als wenn es sich in den Außenbereichen allein aufhielte, ist seine Energie, der Formel (3.43) zufolge, entsprechend verringert.

Dadurch, dass das Magnetfeld nun in den beiden Außenbezirken die gleiche Polarität besitzt, findet im spinlosen Fall auch keine Aufspaltung der Energie statt, sondern lediglich eine Verringerung derselben, denn durch die völlige Übereinstimmung der Verhältnisse für $y > +L$ und $y < -L$ gibt es hier schlichtweg keine Möglichkeit mehr zu einer antisymmetrischen Kombination.

Da besagte Verringerung aber mit kleiner werdendem $|k_x|$ stetig vonstatten geht, führt sie im Dispersionsverlaufe bei $k_x = 0$ zu einem Minimum und insbesondere in dessen Umgebung zu einer Krümmung, die einer effektiven Masse $m^* = (\partial^2 E / \partial k_x^2)^{-1}$ entspricht. Dass dem an sich masselosen Dirac-Weyl-Teilchen hier – bildlich gesprochen – eine derartige Masse der Größenordnung $m^* \sim 10^{-3} \cdot m_e$ [siehe Tabelle 3.6] angeheftet wird, trägt der Tatsache Rechnung, dass es im Mittelbereich $|y| \leq L$ gewissermaßen festgehalten wird, denn um diesen verlassen und

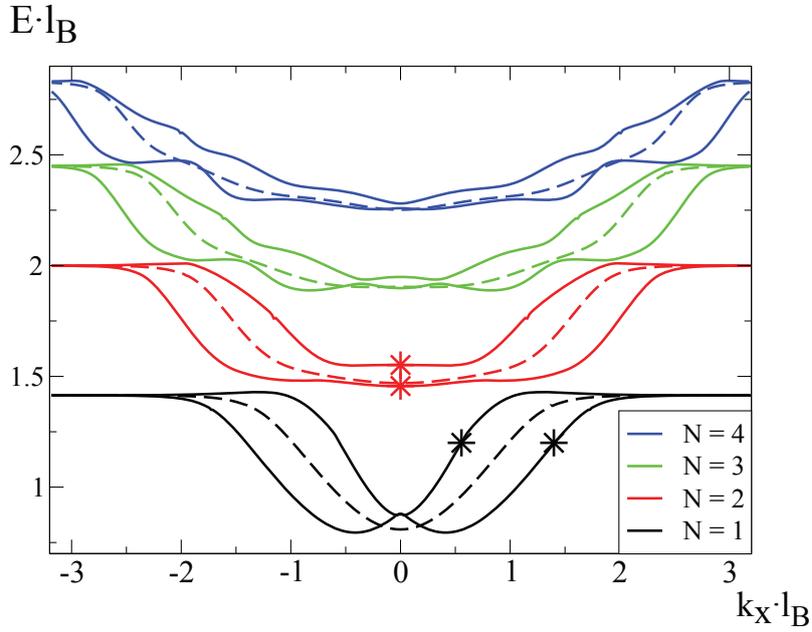


ABBILDUNG 3.13. Energiedispersion für den Fall paralleler Felder in den Außenbezirken (Konfiguration II) mit Spin-Bahn-Kopplung (ausgezogene Kurven), jedoch ohne mechanische Verzerrung. Noch ist der Kurvenverlauf symmetrisch; dies gilt natürlich auch für die zum Vergleich gestrichelt eingezeichneten Kurven ohne Spin-Bahn-Kopplung. Die durch einen Stern markierten Zustände finden in Abb. 3.19 (für $N = 2$) und Abb. 3.20 (für $N = 1$) ihre ortsauflöste Darstellung.

(genügend tief) in die Außenbereiche vordringen zu können, muss es wieder auf die Energie (3.43) des Landau-Niveaus angehoben werden. Die zunehmende Verbreiterung der Täler, die zu immer höheren Landau-Niveaus gehören, kann dabei so verstanden werden, dass die größere Energie, die dem Elektron im jeweiligen Minimum bereits zukommt, zu einer Stabilisierung der Bahnbewegung führt, da es, um aus seiner Bahn herausgeworfen zu werden, einer um so größeren Lorentzkraft bedarf.

Die hier implizit vorgenommene begriffliche Gleich- oder besser Ersetzung der Geschwindigkeitskomponente $v_x = \hbar k_x / m^*$ durch jene des Wellenzahlvektors k_x entstammt dabei natürlich einem völlig klassischen Bilde, welches seine zu erwartende Begrenzung selbstverständlich dadurch erfährt, dass das lediglich im Außenbereich vorhandene Feld $B_z = +B$ nur und genau dann auf ein sich innerhalb des Intervalls $[-L; +L]$ bewegendes Teilchen einzuwirken vermag, wenn dieses den Quantengesetzen unterworfen wird. Naturgemäß ist eine derartige Einwirkung durch die obige Setzung $L = l_B$ besonders begünstigt.

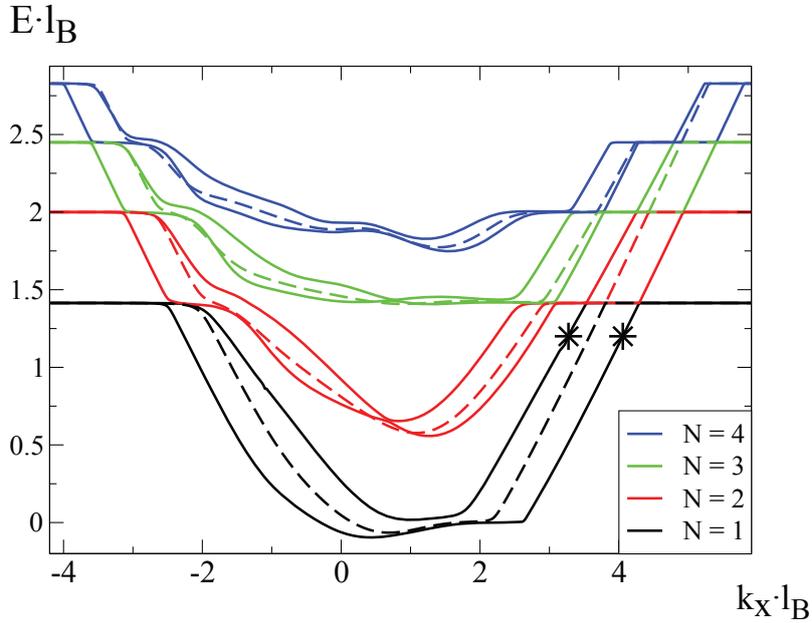


ABBILDUNG 3.14. Wie Abb. 3.13, jedoch *mit* Berücksichtigung der mechanischen Verzerrung (also analog zu Abb. 3.12). Die nun fehlende Symmetrie bezüglich $k_x = 0$ ist augenfällig. Die ortsauflöste Darstellung der beiden durch Sternchen bezeichneten Zustände erfolgt später in Abb. 3.17.

Durch die beiden Spin-Bahn-Kopplungen Δ und λ erfahren die in Abb. 3.13 gestrichelt eingezeichneten Dispersionsverläufe eine Aufspaltung und Modifikation. Während sich bei den höheren Niveaus (ab $N = 3$) gewissermaßen eine Feinstruktur abzuzeichnen beginnt, ist das recht breit aufgespaltene $N = 1$ -Niveau insofern besonderes interessant, als es hier in unmittelbarer Nähe von $k_x = 0$ zu einer Berührung, genau genommen sogar zu einer ganz geringfügigen Überlappung der beiden Bänder kommt. Da sich zum Zwecke dieser Wiedervereinigung das energetisch tiefer liegende Band nach oben krümmt, tritt hier, und zwar ohne dass ein Lochzustand $E < 0$ vorläge, eine negative effektive Masse auf, siehe Tabelle 3.6.

Die obige, bewusst anschaulich gehaltene Erklärung über die Ablenkung der Elektronen im Magnetfeld erweist sich bei einer Drehung des Koordinatensystems um 180° (um die z -Achse) als unabhängig vom Vorzeichen der x -Richtung. Sofern diese Symmetrie nicht durch andere Einflüsse, wie etwa eine mechanische Verzerrung (oder einen Polaritätswechsel des Feldes wie bei Konfiguration I) durchbrochen wird, muss also eine bezüglich des Vorzeichens von k_x symmetrische Dispersion vorliegen. Abb. 3.13 und analog auch Abb. 3.15 weisen die Gültigkeit der Beziehung $E(-k_x) = E(+k_x)$ aus.

Zustand:	$m^*/10^{-3}m_e$
erstes Landau-Niveau ohne Spin-Bahn-Kopplung	1,9
erstes Landau-Niveau mit Kopplung, oberes Band	1,0
erstes Landau-Niveau mit Kopplung, unteres Band	-0,42
zweites Landau-Niveau, wieder ohne Kopplung	11,2

TABELLE 3.6. Effektive Massen einiger niedrig liegender Zustände in der Nähe von $k_x = 0$ für den parallelen Fall (Konfiguration II) ohne mechanische Verzerrung: Aus der Bandkrümmung, d.h. dem Koeffizienten a in der dimensionslosen Darstellung $y = y_0 + a \cdot x^2$ der Abb. 3.13 folgt $m^* = \mu \cdot m_e / a$ mit der Abkürzung $\mu := \frac{\hbar}{2m_e v_F l_B} = 1,009 \cdot 10^{-3}$.

Anders wird dies, wenn nun (siehe Abb. 3.14) die mechanische Verzerrung im mittleren Bereich $y \in [-L; +L]$ eingeschaltet wird. Durch das mit ihr verbundene Vektorpotential $A_0 \neq 0$ werden die dort geltenden Wellenfunktionen (3.73) auf Grund der Verschiebung $k_x \mapsto k_x - A_0$ in (3.71) nicht mehr symmetrisch zu $k_x = 0$ sein, sondern – bei gleichem Betrage – auch von dessen Vorzeichen abhängen. Dabei handelt es sich nicht bloß um einen mehr oder minder belanglosen Phasenfaktor, denn wegen (3.74) ändert sich die (prinzipiell messbare) Laufrichtung der Welle und somit auch die Richtung des Teilchentransportes (3.78). Außerdem besitzen die pseudomagnetischen Felder, die sich durch Ableitung des im Innern von $[-L; +L]$ konstanten Vektorpotentials ergeben, an dessen Rändern, wo sie allein auftreten, eine entgegengesetzte Polarität und wirken deshalb mit dem dort beginnenden echten Magnetfeld $B_z = +B$ in unterschiedlicher Weise zusammen. Wenn man von der fehlenden bzw. vorhandenen Symmetrie einmal absieht, so ist die Ähnlichkeit, die sich aus einem Vergleich der Abbn. 3.14 und 3.15 ergibt, insbesondere für $k_x > 0$ geradezu verblüffend, wurde doch zum einen im Innenbereich ein konstantes Pseudo-Vektorpotential $-A_0$, zum anderen aber ein dort konstantes echtes Feld $B_z = -B$ vorausgesetzt. Die zugehörige Feldkonfiguration wird sogleich im nun folgenden Teilabschnitt besprochen.

3.6.3. Konfiguration III: Symmetrischer Fall mit Gegenfeld

Um ein Magnetfeld mit in den drei Bereichen symmetrisch abwechselnden Polaritäten zu beschreiben, also $B_z = +B$ für $|y| > L$ und $B_z = -B$ dazwischen, findet das Vektorpotential

$$(3.89) \quad A_x(y) = -B \cdot \begin{cases} y + 2L & \text{für } y < -L \\ -y & \text{für } y \in [-L; +L] \\ y - 2L & \text{für } y > +L \end{cases}$$

Verwendung. Hinsichtlich der Berechnung dieser Konfiguration III sei wieder auf den Anhang verwiesen; die Ergebnisse sind in den Abbn. 3.15 und 3.16 dargestellt. Es sind darin drei wesentliche Bestandteile zu erkennen, deren Vorhandensein nach den durch die bereits besprochenen Fälle gewonnenen Einsichten entweder ohne Weiteres verständlich, zum Teil sogar unumgänglich erwartet, oder doch wenigstens in gleich gearteter Denkrichtung nachvollziehbar ist. Dabei handelt es sich erstens für genügend große $|k_x|$ wieder um die bereits bekannten Landau-Niveaus, die bei

einer Bewegung innerhalb nur eines Raumbereiches auftreten und hier keiner weiteren Erklärung mehr bedürfen. Zweitens treten für einen Bereich kleiner $|k_x|$, der sich mit zunehmender Energie (Stabilisierung; siehe oben) jedoch verbreitert, wiederum recht flach verlaufende, gegenüber *ihrem* Landau-Niveau abgesenkte Teilstücke auf, die aus einer Bewegung resultieren, welche abermals (wie schon bei Konfiguration II) alle drei Raumbereiche umfasst. Weil $|k_x|$ dabei noch nicht groß genug ist, um das Teilchen bereits im mittleren, begrenzten Bereich eine Ablenkung erfahren zu lassen, die *dort* zu einer Richtungsumkehr führt, werden lediglich die (sehr) großen Kreisbahnen, die sich ohne die zwischen $[-L; +L]$ vorliegende Umpolung ergäben, etwas eingedellt. Nicht zu verkennen ist dabei eine gewisse Bevorzugung oder doch zumindest Annäherung an jene Energien, die auch den Landau-Niveaus für die homogenen Bereiche zukommen.

Anders als bei den zuvor besprochenen Konfigurationen I und II grenzen nun jedoch Bereiche entgegengesetzter Polarität unmittelbar aneinander, wodurch den Teilchen eine weitere Bewegungsmöglichkeit eröffnet wird, und zwar um die beiden Grenzen $y = \pm L$ herum, entlang derer sich aus Kreissegmenten zusammengesetzte Schlangenbahnen auszubilden vermögen. Da die x-Richtung als räumlich unbegrenzt angenommen wurde, handelt es sich um eine freie Bewegung mit beliebiger (ungequantelter) Energie; andererseits wird aber den Teilchen dadurch, dass sie in den Grenzbereichen $y \approx \pm L$ festgehalten werden – und zwar für geringe Energien besonders wirksam –, wieder eine effektive Masse beigeordnet. Somit ergibt sich als augenfälliges, drittes Merkmal in den abgebildeten Dispersionsbeziehungen ein parabolischer Verlauf $E(k_x) - E(0) \sim k_x^2$. Durch das allmählich-schrittweise Herabsteigen der Energien von den Landau-Niveaus herab deuten sich in dessen Innerem noch weitere Parabeln an.

Ein zwar, wie erwähnt, nicht von der Symmetrie, jedoch zweifellos von den drei genannten Hauptbestandteilen her ähnliches Bild wie Abb. 3.15 lag bereits mit Abb. 3.14 vor. Um die Ähnlichkeiten, aber auch die Unterschiede beider Abbildungen verstehen und einordnen zu können, ist es zunächst notwendig, sich klarzumachen, dass ein Abschreiten der Grenzen $y = \pm L$ in Konfiguration III entlang der erwähnten Schlangenlinien nicht in jeder, sondern jeweils nur in *einer* Richtung möglich ist: Teilchen mit $E > 0$ („Elektronen“) können bei $y = +L$ nur nach links ($k_x < 0$), bei $y = -L$ hingegen nur nach rechts ($k_x > 0$) laufen. Solange aber beide Grenzbereiche $y \approx \pm L$ ansonsten völlig gleichberechtigt sind, ändert dies nichts an der Symmetrie $E(-k_x) = E(+k_x)$ der Dispersionen in Abb. 3.15.

Genau diese Gleichartigkeit wird aber durch die mechanische Verzerrung im Zwischenbereich $[-L; +L]$ bzw. durch das sie beschreibende Vektorpotential A_0 gebrochen, und zwar nicht erst in Abb. 3.16, sondern auch schon in Abb. 3.14. Es wurde bereits darauf hingewiesen, dass das durch dessen Ableitung entstehende pseudomagnetische Feld, welches in der hier gemachten Idealisierung aus zwei δ -funktionalen Spitzen besteht, an beiden Grenzen von unterschiedlicher Polarität ist, und zwar bildet sich eine positive Spitze bei $y = -L$ und eine negative bei $y = +L$, die jedoch, was auf den ersten Blick erstaunen mag, in ihrer grundsätzlichen Wirkung letztlich so verschieden gar nicht sind: ergeben sie doch in beiden Fällen für Teilchen positiver Energie Reflexionen an den Grenzen $y = \pm L$ und damit abermals die Möglichkeit von Schlangenbahnen in einem wenn auch vielleicht etwas erweiterten Sinne. Zwar wird, der unterschiedlichen Polarität zufolge, in dem

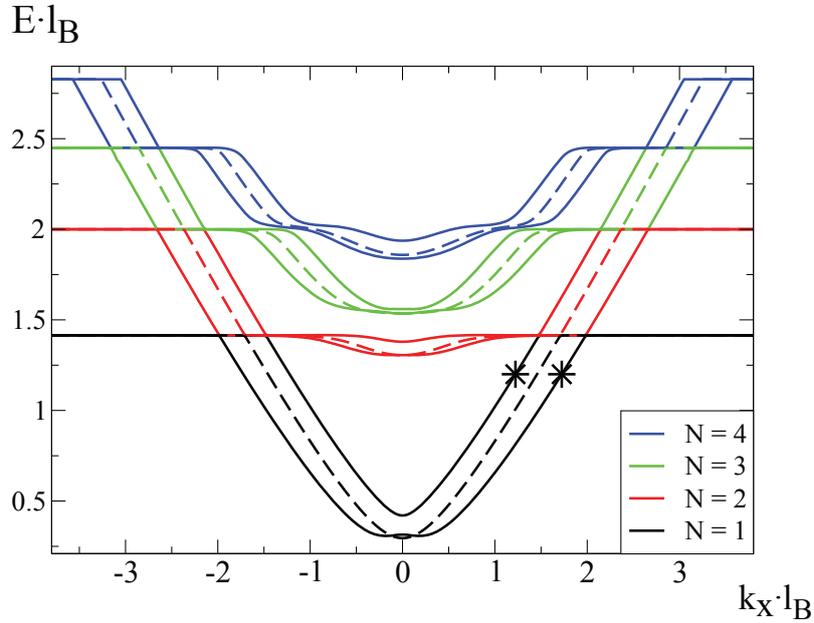


ABBILDUNG 3.15. Energiedispersion für den Fall paralleler Felder in den Außenbezirken plus Gegenfeld im Mittelbereich (Konfiguration III) ohne mechanische Verzerrung; wieder ist der Kurvenverlauf symmetrisch. Zu Vergleichszwecken sind abermals die gestrichelten Kurven ohne die Spin-Bahn-Kopplung eingezeichnet; für diesen letzten Fall wird in [73] die Existenz eines Null-Niveaus bestätigt. Mit Spin-Bahn-Kopplung gelten die ausgezogenen Kurven. Die Nullmode erfährt durch sie eine geringfügige Aufspaltung $\Delta E = 0,034$ bei $k_x = 0$, die nicht symmetrisch zu $E = 0$ liegt und eine Halbwertsbreite von $\Delta k_x \approx 0,45$ aufweist. Bezüglich der orts aufgelösten Darstellung der markierten Zustände siehe Abb. 3.18.

einen Falle (für $k_x < 0$ bei $y > +L$) der Drehsinn der Elektronenbewegung umgekehrt, in dem anderen ($k_x > 0$ bei $y < -L$) dagegen nicht, und das, weil die Krümmung proportional zur Stärke auch des Pseudo-Feldes ist, auf sehr engem, in der hier vorliegenden Idealisierung sogar unendlich kleinem Raume, doch werden, und das ist entscheidend, der nun drastisch verschiedenen Krümmungsradien wegen in beiden Fällen geschlossene Bahnen vereitelt und damit wieder solche Bewegungsformen möglich, die den schon vorstehend erwähnten Schlangenbahnen nicht unähnlich sind, nur dass sie eben nicht mehr aus Teilstücken beiderlei Vorzeichens der Krümmung bestehen, sondern durch Knicke aneinandergefügt sind.

Da die Stärke des hier in Rechnung gesetzten pseudomagnetischen Feldes derjenigen des echten in etwa gleichkommt – in dimensionslosen Größen ist $A_0 \cdot l_B = 0,92$, nur eben konzentriert auf die Grenzen $y = \pm L$ des mittleren Bereiches statt verteilt

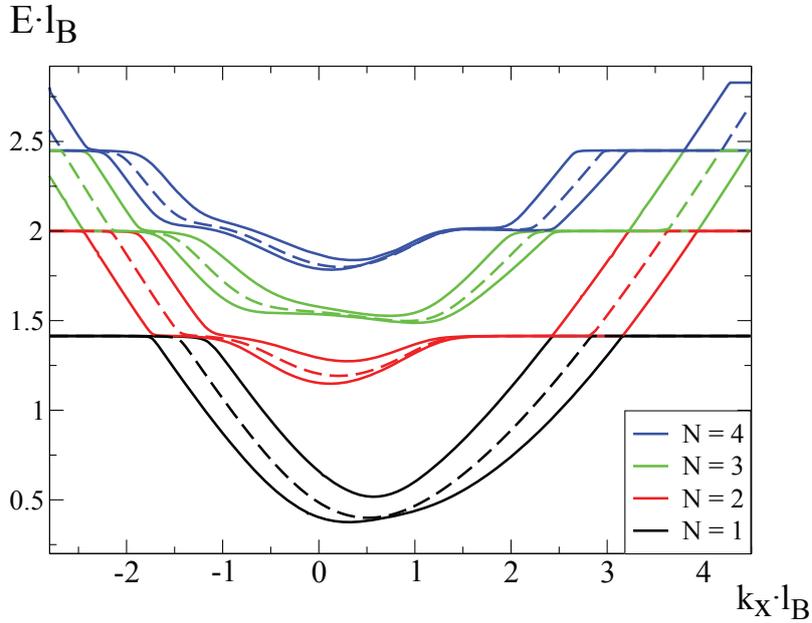


ABBILDUNG 3.16. Wie Abb. 3.15, jedoch wieder unter Berücksichtigung der mechanischen Verzerrung analog zu Abb. 3.14. Das vorliegende Bild nimmt eine Zwischenstellung bezüglich der beiden soeben Genannten ein. Die Symmetrie zu $k_x = 0$ ist auch hier wieder gestört.

auf diesen –, ist auch seine Wirkung, aufs Ganze gesehen, in etwa vergleichbar. So bestehen denn auch die Unterschiede in den Abbn. 3.15 und 3.14 mehr in einer Verschiebung, und zwar um etwa eine Einheit, die durch die Ersetzung $k_x \mapsto k_x - A_0$ in den Wellenfunktionen des mittleren Bereiches bedingt ist, als in einer Verformung, wengleich eine solche ebenfalls unverkennbar ist. Letztere ist natürlich darin begründet, dass auch unter Annahme einer gleichen Wirkung von echtem und Pseudomagnetfeld bezogen auf den Punkt K bei $y = -L$ nur ein Überschwinger, bei $y = +L$ jedoch ein Polaritätswechsel vorliegt.

In Abb. 3.16 schließlich treten nun beide Einflüsse, das echte und das pseudomagnetische Feld, im Mittelbereich der Anordnung zusammen; in gewissem Sinne ist sie folglich als die Überlagerung der Abbn. 3.14 und 3.15 anzusehen. Andererseits kann aber auch durchaus von einer Konkurrenzsituation gesprochen werden, denn während die mechanische Verzerrung auf den Dispersionsverlauf ebenfalls eine Verzerrung ausübt, sorgt demgegenüber das B -Feld für eine Stabilisierung der Parabeln bzw. der ihnen ähnelnden Bereiche. Spätestens in dieser letztgenannten Abbildung wird nämlich deutlich, dass es sich nicht um eine – bzw. einige wenige – zusammenhängende Parabeln handelt, die zusätzlich zu den Landau-Niveaus und von diesen gänzlich unbeeinflusst auftraten, sondern dass sie, und zwar stückweise,

Teil einer jeden Dispersionsbeziehung sind, die sich aus dem jeweiligen Landau-Niveau herausentwickelt und für genügend langsame Teilchen mit kleinem k_x , die, betrachtet man sie klassisch, auf stabilen Bahnen in der Mitte zu verweilen in der Lage sind, eine Absenkung ihrer Energie bedeutet. Zuvor, insbesondere in der Abb. 3.15, wurde dies bereits durch eine entsprechende Farbgebung kenntlich gemacht; desgleichen analog auch in den Abbn. 3.13 und 3.14, wobei in den beiden letzten bezüglich des in Gedanken unwillkürlich vorgenommenen Zusammenfügens der Teilstücke zu Parabeln, was den Einfluss der mechanischen Verzerrung anbelangt, eine eher umgekehrte Tendenz besteht.

Dass in all diesen Fällen wieder eine Aufspaltung durch die beiden Spin-Bahn-Kopplungen erfolgt, wird an dieser Stelle kaum noch einer Erwähnung bedürfen. Hingegen soll am Rande noch vermerkt werden, dass, wenn bei den zur Linie $y = 0$ symmetrischen Konfiguration II oder III die Parameter $V_0 = \Delta = 0$ gesetzt werden, die Energie $\pm E(k_x)$ stets spiegelbildlich zur Abszisse verläuft.

Die folgenden, räumlich aufgelösten Bilder bestätigen, erweitern und präzisieren die im Vorstehenden entwickelten Vorstellungen. Wenngleich sie auch nicht die Bahn eines einzelnen Teilchens verfolgen – quantenmechanisch gibt es eine solche gar nicht, weshalb von entsprechenden Darstellungen abgesehen wurde –, zeigen sie doch sehr wohl, wo und mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Teilchen in den verschiedenen Konfigurationen und Zuständen unterschiedlicher Energie, Laufrichtung und Wellenzahl sich aufzuhalten vermag. Hierzu sollen lediglich drei, dafür jedoch typische Fälle aufgezeigt werden.

Zum Ersten die Beschränkung auf – im Wesentlichen – den Mittelbereich $y \in [-L; +L]$ in Abb. 3.17; diese Zustände liegen jeweils auf einer Parabel, siehe Abb. 3.14, stellen also laufende Wellen dar. Zweitens die Konzentration (bei etwa gleicher Gesamtbreite) um eine der beiden Grenzen herum, wie sie Abb. 3.18 darbringt; auch hier zeichnen laufende Wellen verantwortlich. Drittens und andererseits aber eine deutlich breitere Verteilung, bedingt durch einen recht flachen Verlauf der Energie-dispersion, hier gezeigt in Abb. 3.19 für zwei Minima derselben (siehe Abb. 3.13, rot markiert. Mehr noch als $k_x = 0$ selbst bedeutet die Steigung $v_g = \frac{\partial E}{\partial k_x} = 0$, die die verschwindende Gruppengeschwindigkeit in x-Richtung anzeigt, siehe [73] und [74], das Vorliegen einer stehenden Welle; allerdings fallen hier beide Bedingungen zusammen).

Die durch ihren ausgeprägten Mangel an Symmetrie im Vergleich zu den vorigen besonders hervorstechende Abb. 3.20 stellt dazu bereits einen Übergang dar: Zwar bevölkern die ihr zugrundeliegenden Zustände einen Abschnitt der Dispersionsbeziehung, siehe Abb. 3.13, der bereits deutlich einer sich entwickelnden Parabel zu ähneln beginnt, andererseits aber noch immer vom zugehörigen Landau-Niveau beeinflusst wird, seinen Zusammenhang mit diesem also noch nicht vollends verloren hat. Demgemäß zeigen sich in der Verteilung beide dementsprechenden Anteile, verständlicherweise dominiert allerdings von der im Mittelbereich ihre stärkste Ausprägung erfahrenden laufenden Welle.

Wie bereits angekündigt, wurde in die zuletzt behandelten Abbildungen, damit sie nicht nur das zuvor besprochene anschauliche Bild von der Bewegung der Ladungsträger zu untermauern, sondern dieses auch noch weiter auszubauen geeignet sind, als zusätzliche Information die Verteilung ihrer Spinausrichtungen eingefügt. Auch diese ist, wie sämtliche dort vorgestellten Größen, jetzt als solche prinzipiell messbar, da sie – anders als im Abschnitt 3.3 und 3.4 – durch die Bereichsgrenzen

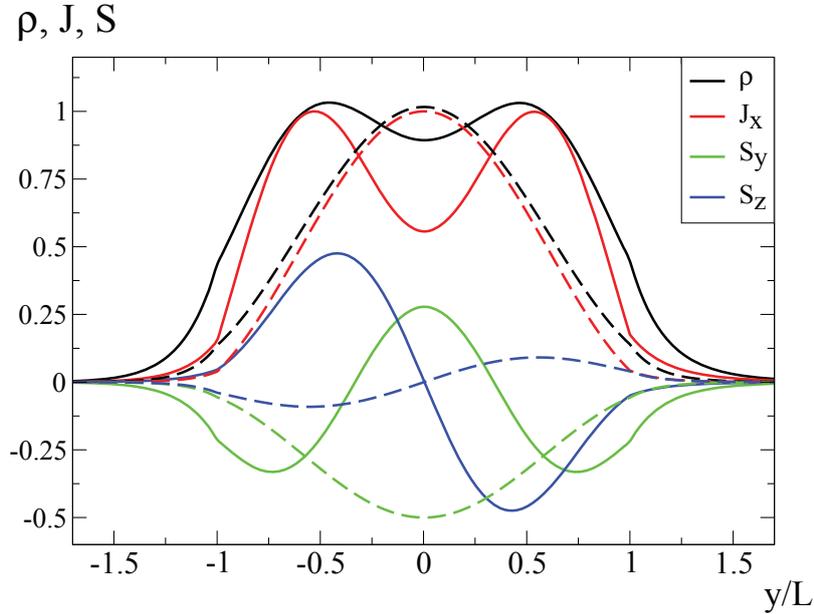


ABBILDUNG 3.17. Ortsaufgelöste Darstellung der in Abb. 3.14 markierten Zustände mit $k_x = 3,26$ (ausgezogen) und $k_x = 4,06$ (gestrichelt) bei $E = 1,20$. (Die Größe l_B wurde auch hier, wie meist schon zuvor bei derartigen Angaben, wieder unterdrückt.) Wie bereits in früheren Abbildungen (Abb. 3.6, Abb. 3.7 und Abb. 3.10) werden neben der Wahrscheinlichkeitsdichte ρ nur jene Komponenten des Stromes J_x und der Spineinstellung S_y und S_z wiedergegeben, die nicht ohnehin aus Symmetriegründen identisch zu verschwinden haben. Der besseren Vergleichbarkeit halber allerdings wurde hier wie auch im Folgenden (bis Abb. 3.20 einschließlich) eine Normierung auf das jeweilige Stromdichtemaximum vorgenommen. Sämtliche betrachteten Größen weisen außerhalb des mittleren Bereiches $[-L; +L]$ nur recht geringe und alsbald auch sehr schnell (exponentiell) abfallende Werte aus.

gewissermaßen festgepinnt wird. Unter diesem Gesichtspunkt erscheint die bereits ins Treffen geführte Abb. 3.19 als besonders interessant, weil sich hier, mehr noch als bei Abb. 3.18 und Abb. 3.20, bei ähnlicher Dichte-Verteilung zweier Zustände mit beinahe identischer Aufteilung ihrer Ströme durch eine nur unwesentliche Energieerhöhung (1,1 meV) ein fast exaktes Umklappen ihrer Spineinstellungen ergibt.

3.7. Transmission von Ladungsträgern über die Grenzen hinweg

In der Bildunterschrift zu Abb. 3.17 (und dies gilt auch für die nachfolgenden Abbildungen bis einschließlich Abb. 3.20) wurde nochmals darauf hingewiesen,

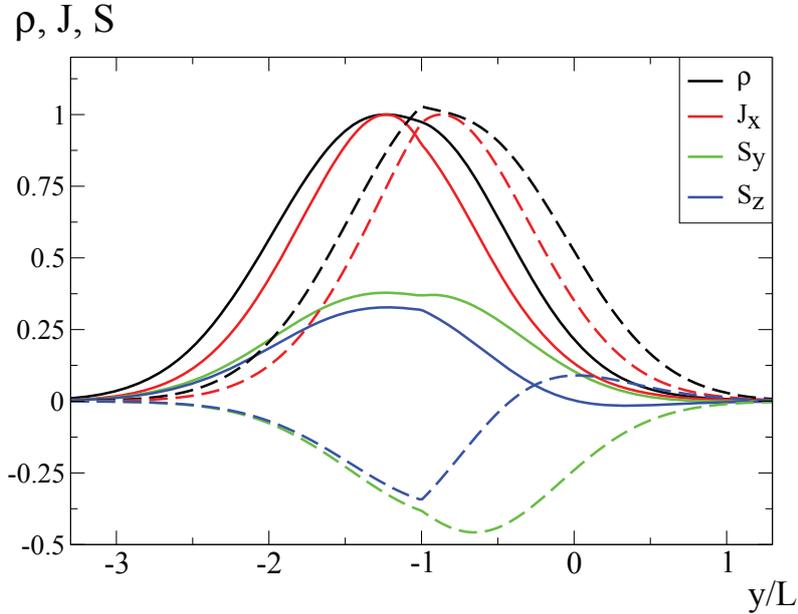


ABBILDUNG 3.18. Ortsaufgelöste Darstellung der in Abb. 3.15 markierten Zustände mit $k_x = 1,22$ (ausgezogen) und $k_x = 1,72$ (gestrichelt) bei $E = 1,20$. Die Maxima liegen jetzt etwa auf oder zumindest nahe der Grenze $y = -L$.

dass, wie bereits in Abschnitt 3.4 gezeigt wurde, aus Symmetriegründen gewisse Komponenten der Spinausrichtung und des Stromes überall und zwingend zu verschwinden hätten. Im Mittelbereich, wäre dieser allein vorhanden und überdies nicht (wie etwa in Konfiguration III geschehen) zusätzlich magnetisiert worden, ist zwar eine Stromdichte auch in y -Richtung durchaus denkbar, insofern sie mit den dort vorhandenen Wellenfunktionen – es handelt sich um die laufenden Wellen (3.75) bzw. (3.73) – nicht nur leicht in Einklang zu bringen gewesen wäre, sondern, wie es scheint, fast unvermeidlich aufzutreten hätte, siehe Gleichung (3.78). $J_y \neq 0$ wird hier offensichtlich nur durch die Rahmenbedingungen, sprich die daran angrenzenden Bezirke vereitelt, indem durch eine gleich starke Beteiligung von nach rechts und ebenso nach links laufenden Wellen [Indices plus oder minus bei $q_{y,\alpha}$ und k_y in (3.73) bzw. (3.75)] eine Kompensation erzwungen wird, und die numerischen Ergebnisse bestätigen dies. Wie auch anschaulich [und ohne eine formale Herleitung, wie sie etwa auf (3.54) führt; beachte hierzu aber auch die unmittelbar im Anschluss daran gegebenen, nicht nummerierten Formeln für die Gesamtwerte] einzusehen ist, vermögen die halbseitig unendlich ausgedehnten Außenbereiche (außer in ihren Randbezirken, siehe dazu den Schluss des Abschnittes 3.4) einen Strom in vorgegebener Richtung, welche es auch immer sein mag, *nicht* zu tragen, da bereits jedes noch so kleine Magnetfeld die ihn etwa darstellenden Ladungsträger alsbald

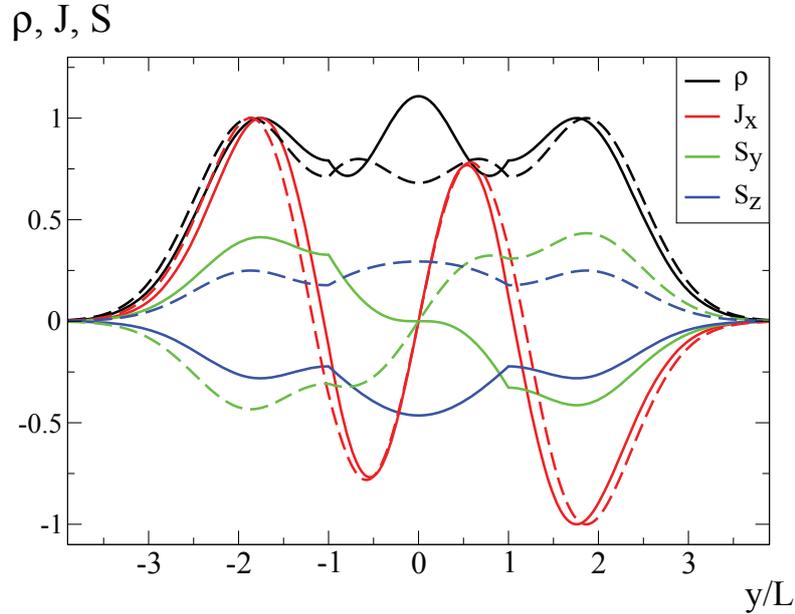


ABBILDUNG 3.19. Eine im Vergleich zum mittleren Bereich etwa dreimal breitere Verteilung liefern die in Abb. 3.13 rot markierten Zustände (bei $k_x = 0$) mit $E = 1,456$ (ausgezogen) bzw. $E = 1,552$ (gestrichelt).

ablenkt und sich nur im Kreise zu bewegen daraufhin veranlasst. Aus Kontinuitätsgründen vermag also, da die magnetisierten Bereiche ihn nicht nachzuliefern in der Lage sind, bei Betrachtung lediglich stationärer Zustände auch in den SOAS- und Normalbereichen kein Strom von $y = -L$ nach $y = +L$ oder umgekehrt zu fließen. Anderenfalls würden sich die Ladungsträger an den Bereichsgrenzen ansammeln, oder aber die Homogenität in x -Richtung wäre in Frage gestellt.

Naturgemäß gelten diese Überlegungen lediglich für unendlich breite Streifen. Anders ist dies für realistische und somit auch in x -Richtung endlich-begrenzte Geometrien: hier werden die Ströme, die entlang x fließen, an den Rändern parallel zu y geschlossen.

Will man also einen Stromtransport auch über die Grenzen hinweg, das heißt: quer zu ihnen ermöglichen, so dürfen die dann als Reservoir anzusehenden Außenbereiche, wenn diese nach wie vor als halbumendlich angenommen werden, keinem äußeren Magnetfeld ausgesetzt sein. (Der Einfachheit halber soll hier keine weitere Grenze, insbesondere kein etwaiger Übergang Graphen/Metall betrachtet oder eingeführt werden.) Dass unter dieser Voraussetzung und *bei geeigneten Bedingungen* nun ein Stromfluss möglich wird – und dann auch tatsächlich eintritt –, widerspricht nicht dem zuvor (in Abschnitt 3.4) gebrachten Symmetrie-Argument. Denn ein von außen in die zu betrachtende Anordnung eingeschossenes oder sonstwie,

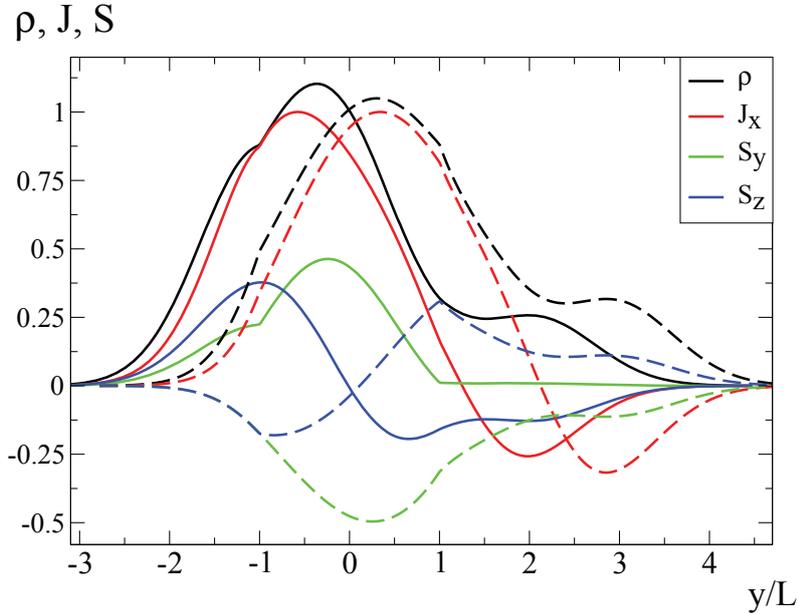


ABBILDUNG 3.20. Eine ähnliche Ausdehnung weisen auch die in Abb. 3.13 schwarz markierten Zustände mit $k_x = 0,53$ (ausgezogen) bzw. $k_x = 1,40$ (gestrichelt) bei $E = 1,20$ aus, wenngleich allerdings ohne jegliche Symmetrie zur Linie $y = 0$.

beispielsweise durch eine Differenz der elektrochemischen Potentiale, in diese hineingeleitete Teilchen unterliegt nicht mehr der bislang als gültig vorausgesetzten Zeitumkehrinvarianz. Damit aber wird diese ge- und obige Beweiskette zerbrochen. Allerdings kann man, wenn das Teilchen nunmehr von der anderen Seite, und zwar wegen der dort oben außerdem noch vorgenommenen Spiegelung an der yz -Ebene, unter dem komplementären Winkel $\pi - \phi$ einfällt, zumindest sagen, dass der Leitwert für beide Richtungen der gleiche sein muss.

So, wie in der Elektrotechnik bei der Berechnung etwa von Kettenleitern die Matrizen der entsprechenden Vierpole (siehe Vierpoltheorie) hintereinandergeschaltet werden, kann dies auch mit den Matrizen, wie sie hier [etwa in (3.30)]; weitere Beispiele finden sich im Anhang] gegeben sind, geschehen, wenn in diese die Bedingungen, das heißt die Stärke der Wechselwirkungen und Felder sowie die zugehörigen Grenzen y_i eingefügt werden. Letztlich ist dies zur Gänze als Ausdruck einer bloß mathematisch-kompakteren Umformung größerer und gegenüber (3.84) lediglich quantitativ erweiterten Gleichungssysteme zu betrachten.

Im hier vorliegenden Zusammenhang wird sie als Transfer-Matrix-Methode (TMM) bezeichnet und fand beispielsweise in [22] Verwendung.

Aus der Vielzahl der sich nun auftuenden Möglichkeiten soll exemplarisch hier bloß eine Abfolge betrachtet werden, bei der zwischen zwei als Reservoir dienende

Normalbereiche ein noch mehrfach weiter unterteilter SOAS-Bereich der Gesamtbreite $10L$ eingeschoben wurde, welcher zwei entgegengesetzt magnetisierte Bereiche $SOAS \pm B$ enthält. Es ist also

- Konfiguration IV: N / SOAS / SOAS+B / SOAS / SOAS-B / SOAS / N.

Mit dem Vektorpotential

$$(3.90) \quad A_x(y) = -B \cdot \begin{cases} 0 & \text{für } y < -3L \\ 3L + y & \text{'' } -3L \leq y \leq -L \\ 2L & \text{'' } -L < y < +L \\ 3L - y & \text{'' } L \leq y \leq 3L \\ 0 & \text{'' } y > 3L \end{cases}$$

und zwei weiteren Grenzen bei $y_i = \pm 5L$ (ohne Magnetfeldänderung) ergibt sich also die Matrizen-Kette

$$(3.91) \quad \begin{aligned} M &= \Omega_N^{-1}(-5L) \cdot \Omega_{SOAS}(-5L) \cdot \Omega_{SOAS}^{-1}(-3L) \cdot \Omega_{SOAS+B}(-3L) \cdot \dots \\ &\Omega_{SOAS+B}^{-1}(-L) \cdot \Omega_{SOAS}(-L) \cdot \Omega_{SOAS}^{-1}(+L) \cdot \Omega_{SOAS-B}(+L) \cdot \dots \\ &\Omega_{SOAS-B}^{-1}(3L) \cdot \Omega_{SOAS}(3L) \cdot \Omega_{SOAS}^{-1}(5L) \cdot \Omega_N(5L). \end{aligned}$$

Zu beachten ist hierbei, dass im mittleren SOAS-Bereich (zwischen $y_3 = -L$ und $y_4 = +L$) auch ohne B -Feld wegen des dort bereits aufgesammelten (konstanten) Vektorpotentials $-2BL$ die Komponente k_x des Wellenzahlvektors ganz ähnlich, wie dies auch zuvor schon durch die mechanische Verzerrung $-A_0$ geschah, eine entsprechend weitergehende Verschiebung zu erfahren hat. Dies gilt vor allem in (3.71) und damit, wenigstens indirekt, für fast alle Formeln des betreffenden Abschnittes 3.5.

Bei vorgegebenen Anteilen $\cos \xi$ und $\sin \xi$ der Einstellung einfallender Spins – $\xi = 0$ entspricht $s_z = \uparrow$ und $\xi = \frac{\pi}{2}$ steht für $s_z = \downarrow$ – lassen sich aus dem linearen Gleichungssystem

$$(3.92) \quad \begin{pmatrix} \cos \xi \\ r_\uparrow \\ \sin \xi \\ r_\downarrow \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} t_\uparrow \\ 0 \\ t_\downarrow \\ 0 \end{pmatrix}$$

die vier noch fehlenden Koeffizienten der Reflexion r_\uparrow und r_\downarrow und der Transmission t_\uparrow und t_\downarrow berechnen; eine Reflexion aus dem letzten Bereich (Kontakt) findet nicht statt bzw. ist gegebenenfalls zu unterbinden. Durch Betragsquadratbildung ergeben sich die Wahrscheinlichkeiten der zugehörigen Prozesse zu $R_{up} = |r_\uparrow|^2$ und $R_{down} = |r_\downarrow|^2$ mit $R_{ges} = R_{up} + R_{down}$ als dem Gesamtwert für die Reflexion und ganz entsprechend für die Transmissionen $T_{...}$; wegen der Wahrscheinlichkeitserhaltung gilt ganz selbstverständlich $R_{ges} + T_{ges} \equiv 1$. Bei der numerischen Berechnung wurden dieselben Werte zu Grunde gelegt wie im letzten Abschnitt, also $B = 0, 2T$, $b = 0$ und die Standardparameter (3.47).

Wie die Abb. 3.21 ausweist, setzt eine merkliche Transmission erst ab etwa 23 meV ein. Dies liegt natürlich an der ansonsten nicht gegebenen Überwindbarkeit des / der B -Felder und lässt sich, sieht man von einer gewissen, auch unterhalb dieser Schwelle noch vorhandenen, außer in ihrer unmittelbaren Nähe aber nur ganz geringfügigen Tunnelwahrscheinlichkeit ab, wie in Abschnitt 2.4 geschildert auch klassisch-anschaulich verstehen: Mit der Dispersion (2.18), der magnetischen

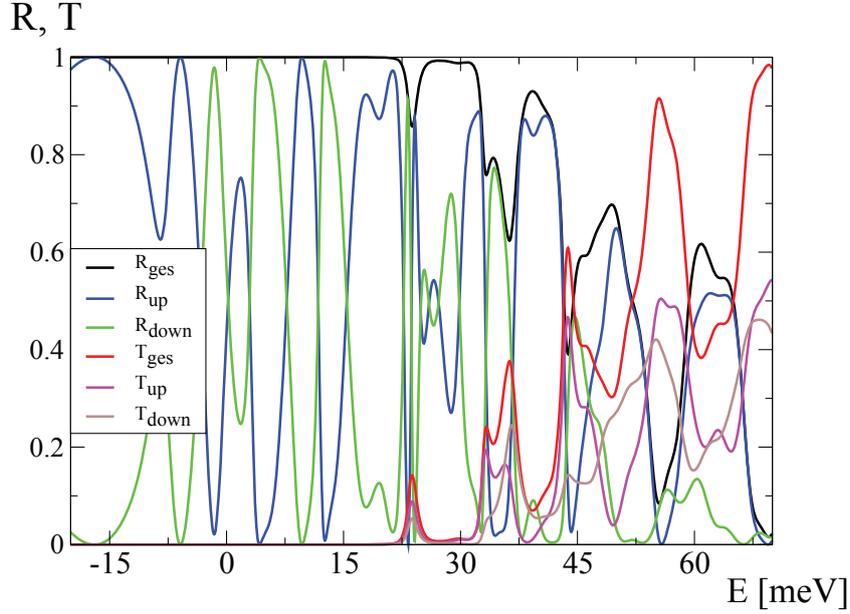


ABBILDUNG 3.21. Reflexions- und Transmissionskoeffizienten, sowohl gesamt als auch nach Spineinstellungen aufgelöst, für die als Konfig. IV bezeichnete Struktur in Abhängigkeit von der Energie der in y -Richtung ($\phi = \frac{\pi}{2}$) und mit $s_z = \uparrow$ einfallenden Teilchen.

Länge (2.37) und dem Gleichgewicht von Zentrifugal- und Lorentzkraft wird der Radius der (halben) Kreisbahn $r_0 = \frac{l_B^2 \cdot E}{\hbar v_F}$, welcher, um die magnetisierten (M-) Bereiche sicher zu durchqueren, deren Breite $2L = 2l_B$ unvermeidlich übersteigen muss. Somit also muss die Energie $E \geq 2 \triangleq 22,95$ meV mindestens das Doppelte desjenigen Werts betragen, welcher in den Abbn. 3.11ff. bereits als Einheit für deren Ordinatenachsen diente.

Der weitere Verlauf mit seinen resonanzartigen Strukturen ist demgegenüber, vor Allem auf quantitativer Ebene, nicht mehr derart unschwer zu erklären, da es nun gilt, die Überlagerung mehrerer und zum Teil recht komplizierter Effekte in ihrer Gesamtheit zu berücksichtigen. Einerseits nämlich ist die Resonanzbedingung der nicht-magnetischen Bereiche – ihre direkte Durchquerung ergäbe energetische Abstände von $\Delta E = \frac{\pi}{2} \triangleq 18,0$ meV – zumindest für den mittleren unter ihnen nicht mehr zutreffend, denn dieser wird ja, je nach Stärke der im benachbarten Bereiche zuvor erfolgten Ablenkung, nunmehr schräg durchlaufen und damit der geometrische Abstand effektiv vergrößert und der energetische verkleinert. Außerdem aber werden andererseits auch die energetischen Resonanzen (Niveaus) in den M-Bereichen selbst durch deren endliche Breite gegenüber (3.36) wirkungsvoll verändert. Insgesamt ergibt sich letztlich und durch die Anschlussbedingungen vermittelt ein mit den Konfigurationen I bis III des vorigen Abschnittes in etwa

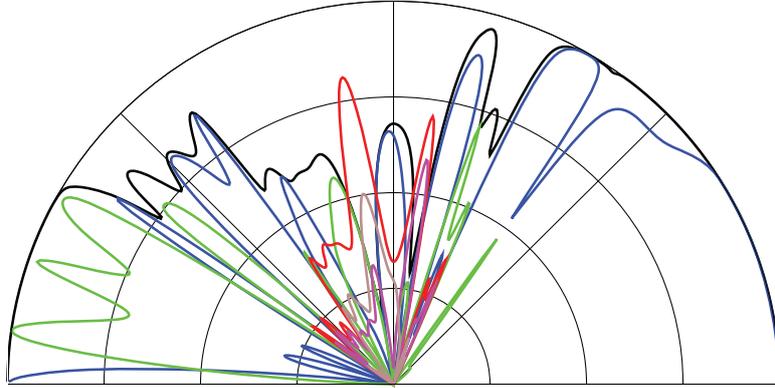


ABBILDUNG 3.22. Richtungsabhängigkeit der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten bei $E = 50$ meV. Die farbliche Zuordnung ist dieselbe wie in Abb. 3.21. Der äußerste (obere) Halbkreis bezeichnet $R = 1$ und damit Totalreflexion.

vergleichbares Bild mit laufenden und stehenden Wellen; nur mit dem Unterschied, dass Erstgenannten jetzt wegen der nur noch endlichen Breite der magnetischen Bereiche auch die Möglichkeit zukommt, diese zu durchqueren, ihre Grenzen zu überschreiten und sich damit schlussendlich auch in y -Richtung zu bewegen. Die unterschiedlich langen Wege, die dabei – energie- und winkelabhängig – in den der Spin-Bahn-Kopplung unterworfenen Gebieten zu durchlaufen sind, erklären auch die mannigfachen Wechsel in der Spineinstellung. Besonders augenfällig wird dieser an den Kurven für die Reflexion, weil hier – zumindest unterhalb der Schwelle – beide Größen (R_{up} und R_{down}) zueinander gegenläufig sind.

Komplementär dazu und in gewisser Weise ergänzend zeigt Abb. 3.22 den gleichen Sachverhalt von einem anderen Blickwinkel aus, nämlich für verschiedene Einschussrichtungen des einfallenden Teilchens. Selbst für die gemessen an der Schwelle bereits recht hohe Energie $E = 50$ meV überwiegt die Transmission gegenüber der Reflexion doch nur in einem recht engen Bereiche von etwa $\pm 10^\circ$ um die y -Achse herum (mit weiter steigender Energie verbreitert sich dieser natürlich). Auch hier kommt es wieder zu unterschiedlich langen Wegen: Mit ein wenig Vorhalt nach rechts geschossen verkürzt sich entsprechend der Polung der Felder der Weg des Teilchens im mittleren der SOAS-Bereiche, wodurch ihm – und zwar nicht nur dort, denn insgesamt verläuft sein Weg „gerader“ und damit kürzer – weitaus weniger Gelegenheit zu einem Spinumklapp geboten wird, als wenn es im Gegenteil unter gleichem Winkel von der y -Richtung abweichend nach links eingeschossen würde, wo ein deutlich längerer Weg den Umlapp nun als viel wahrscheinlicher erscheinen lässt. Derartige Oszillationen der Spineinstellung treten auch bei der Reflexion auf, welche bei stärkeren Abweichungen von der y -Richtung ($\phi = 90^\circ$)

dominiert, und der es dann, wenn diese genügend groß werden, bestimmt ist, in wenigstens partieller Reminiszenz an den magnetischen Einschluss zu gemahnen und in eine Totalreflexion einzumünden, die linker Hand am ersten, rechter Hand dagegen am zweiten, hinteren M-Bereiche vonstatten geht (die obige Herleitung der energetischen Grenze bezog sich lediglich auf einen unmittelbar senkrechten Einfall des Teilchens).

Während die Reflexion (wie bei einem Spiegel) in die Richtung des komplementären Winkels $\pi - \phi$ erfolgt, ändert die Transmission durch die hier gleich starken, einander kompensierenden Felder die Ausbreitungsrichtung nicht, und es kommt am Ende nur zu einer gewissen Parallelverschiebung; der Winkel aber bleibt. Doch auch bei beliebig anderer Wahl der beteiligten Felder und ihrer Abfolge gilt, dass, wenn überhaupt eine Transmission zustandekommt, die Richtung, in der das letztendlich geschieht – also der Ausfallswinkel –, wie bei der Brechung eines Lichtstrahls in ein anderes Medium eine eindeutige Funktion des Einfallswinkels ist. Hierbei wurde natürlich vorausgesetzt, dass die Scheibe (oder eine Abfolge solcher Scheiben) großflächig und damit von genügender Ausdehnung quer zum Strahle ist. Das wird im nächsten Kapitel, wo die betrachteten Strukturen in sämtlichen Dimensionen allseitig eng begrenzte oder sogar punktförmige sein werden, anders.

Streuung an magnetischen Störstellen

4.1. Streuamplitude und -querschnitte in 1. Bornscher Näherung

In diesem Kapitel soll der Einfluss solcher Streuer untersucht werden, die, wie der Dipol, zumindest in der Idealisierung als punktförmig anzusehen sind oder deren Ausdehnung, wenigstens im Vergleich zu dem Abstände, wo die Streuwelle gemessen wird, eine bloß geringe ist. Das Auftreten von Mehrfachstreuungen wird damit entsprechend unwahrscheinlich, und zur Beschreibung genügt folglich die *erste* Bornsche Näherung. Vom Spin und all seinen Wechselwirkungen soll in diesem Zusammenhang gänzlich abgesehen werden.

Betrachtet wird also wieder der Hamilton-Operator (2.33), der, diesmal in die Form

$$(4.1) \quad H = H_0 + H_M$$

zerlegt, eine bis auf die Störstelle reine, also undotierte Graphenschicht beschreibt. Die Lösung des zum ungestörten Anteil

$$(4.2) \quad H_0 = -i\vec{\sigma} \cdot \nabla$$

gehörigen Problems

$$(4.3) \quad (H_0 - E) \Psi^{(0)} = 0$$

wird als bereits bekannt vorausgesetzt; es handelt sich um die einlaufende Welle

$$(4.4) \quad \Psi^{(0)} = u_p \cdot \exp(i\vec{p} \cdot \vec{r})$$

mit dem Spinor

$$(4.5) \quad u_p = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \exp(i\theta_p) \end{pmatrix}.$$

Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurde gegenüber (2.24) die (globale) Phase geändert und, der Ortsdarstellung entsprechend, der Exponentialfaktor für die geradlinige Ausbreitung mit dem Wellenzahlvektor \vec{p} hinzugefügt. Dieser bestimmt über

$$(4.6) \quad \theta_p = \arctan \frac{p_y}{p_x}$$

[siehe (2.16)] nicht nur die Richtung der Ausbreitung, sondern über $E = \pm p$ auch die Energie des betreffenden Zustandes [vgl. (2.18); wie schon im vorigen Kapitel wurden die ansonsten ständig auftauchenden Konstanten $\hbar := v_F := \frac{c}{c} := 1$ gesetzt]. Deren Vorzeichen korrespondiert dabei mit jenem im Spinor (4.5), unterscheidet also Teilchen von Antiteilchen und tritt in dieser Bedeutung [außer in (4.8)] im Folgenden noch öfter auf.

Der Operator

$$(4.7) \quad H_M = \vec{\sigma} \cdot \vec{A} = \begin{pmatrix} 0 & A_- \\ A_+ & 0 \end{pmatrix}$$

erfasst die magnetische Störung über deren Vektorpotential $\vec{A} = (A_x, A_y) = (A_r, A_\phi)$. Seine Komponenten werden sowohl in kartesischer als auch polarer Darstellung dem Charakter einer örtlich begrenzten Störung entsprechend als räumlich genügend schnell abklingend vorausgesetzt und, bedingt durch das Auftreten der σ -Matrizen, in den beiden komplexen Linearkombination

$$(4.8) \quad A_\pm := A_x \pm iA_y = (A_r \pm iA_\phi) \cdot \exp(\pm i\phi)$$

zusammengefasst. Mit dem sich aus oben genanntem Grunde auf die erste Ordnung beschränkenden Ansatz

$$(4.9) \quad \Psi = \Psi^{(0)} + \Psi^{(1)}$$

geht man in die allgemeine Gleichung $(H - E)\Psi = 0$ hinein und erhält mit (4.3) und unter Vernachlässigung der Glieder höherer Ordnung die Bedingung

$$(4.10) \quad (H_0 - E)\Psi^{(1)} = -H_M\Psi^{(0)},$$

die die gesuchte Korrektur $\Psi^{(1)}$ erfüllen muss.

In Analogie zum Vorgehen bei (2.35) ergibt sich durch Anwendung des Operators $(H_0 + E)$ von links auf die vorstehende Gleichung eine Diagonalisierung des dabei auf ihrer linken Seite aufscheinenden Operators $H_0^2 - E^2 = -\nabla^2 - E^2$, dessen Inverse

$$(4.11) \quad G_E(\vec{k}) = [k^2 - (p \pm i0)^2]^{-1}$$

im Raume der Wellenzahlvektoren sogleich hingeschrieben werden kann. Dabei bedeutet $\pm i0$ [hier gilt das oben über das Vorzeichen der Energie Gesagte] die symbolische Einfügung eines Konvergenzparameters, der nach Ausführung der Integration sogleich wieder nach Null gesetzt wird. Um nämlich die Greensche Funktion G_E für die Berechnung der Korrektur

$$(4.12) \quad \Psi^{(1)}(\vec{r}) = - \iint d^2\vec{r}' \cdot G_E(\vec{r} - \vec{r}') \cdot (H_0(\vec{r}') + E) H_M(\vec{r}') \Psi^{(0)}(\vec{r}')$$

dienstbar machen zu können, muss noch ihre Rücktransformation in den realen Raum vorgenommen werden, woraus sich

$$(4.13) \quad G_E(\vec{r}) = \iint \frac{d^2\vec{k}}{(2\pi)^2} \cdot \frac{\exp(i\vec{k}\vec{r})}{k^2 - (p \pm i0)^2} = \pm \frac{i}{4} \cdot H_0^{(1)}(pr) \mapsto \pm \frac{1}{2} \cdot \frac{\exp(ipr)}{\sqrt{-2\pi ipr}}$$

ergibt. Mittels Anwendung des Residuensatzes in der Cauchy'schen Integralformel erweist sie sich als proportional zur Hankel-Funktion erster Art und von nullter Ordnung. Eine Verwechslung ihres Symbols $H_0^{(1)}(pr)$ mit irgendeinem Hamilton-Operator ist indessen ausgeschlossen, da betrachteter großer Abstände wegen (siehe Abb. 4.1b) von ihr im Folgenden lediglich das asymptotische Verhalten für $pr \gg 1$ benötigt wird. In gleicher Denkungsart zeigt sich, wie bei der Anwendung der Greenschen Funktionen G_E in (4.12) vorzugehen ist, die ja gegenüber (4.13) noch der Ersetzung $\vec{r} \mapsto \vec{r} - \vec{r}'$ harrt:

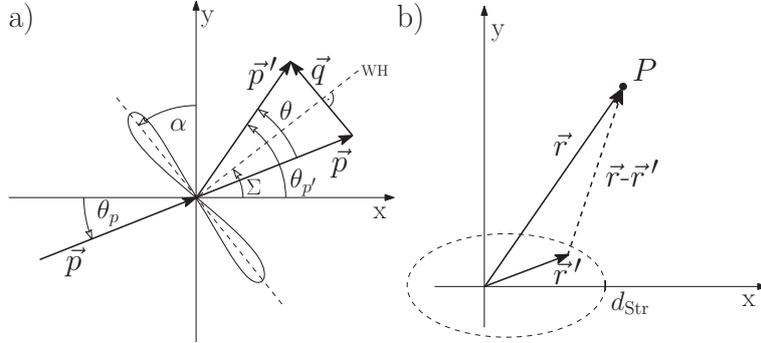


ABBILDUNG 4.1. Elementarer Streuvorgang. a) Zur Kinematik: Die ursprüngliche Welle trifft, mit Wellenzahlvektor \vec{p} unter dem Winkel θ_p einfallend, auf einen im Ursprunge befindlichen Streuer. Dieser ist hier übertrieben groß dargestellt, um seine Ausrichtung zu verdeutlichen; falls er nicht ohnehin isotrop sein sollte, wird sie durch den Winkel α gekennzeichnet. Nach erfolgter Streuung – da diese elastisch ist, gilt $|\vec{p}'| = |\vec{p}| = p$ – breitet sich die neue (gestreute) Welle mit \vec{p}' in Richtung $\theta_{p'}$ aus. Der Streuwinkel ist also $\theta = \theta_{p'} - \theta_p$ und der Streuvektor $\vec{q} = \vec{p}' - \vec{p}$. Dessen Betrag ist $q = 2p \cdot |\sin(\theta/2)|$, und er steht senkrecht zur Winkelhalbierenden WH zwischen \vec{p} und \vec{p}' , welche mit der x-Achse den Winkel $\Sigma = \theta_p + \theta/2 = \frac{1}{2}(\theta_p + \theta_{p'})$ einschließt. b) Zur Geometrie der Streuung: Die gestreute Welle werde in einem Punkt P mit Ortsvektor \vec{r} betrachtet, zu dem hin sie von verschiedenen Punkten \vec{r}' des Streuers aus gelangen kann. Dessen angenommener Kleinheit wegen (seine größte Ausdehnung vom Ursprunge aus betrage d_{Str}) gilt $|\vec{r}'| \leq d_{\text{Str}} \ll |\vec{r}| \equiv r$ und näherungsweise $\vec{r} \parallel \vec{p}'$. Somit ist in erster Näherung $|\vec{r} - \vec{r}'| \approx |\vec{r}| - \frac{\vec{p}' \cdot \vec{r}'}{|\vec{p}'|}$.

Wie die Abb. 4.1 darlegt, gilt näherungsweise $p \cdot |\vec{r} - \vec{r}'| = pr - \vec{p}' \cdot \vec{r}'$. Während der letzte (kleinere) Term bei dem im Nenner stehenden Wurzelausdruck arglos vernachlässigt werden kann, gilt dies im phasenempfindlichen Exponentialterm hingegen keineswegs, tritt doch der Besagte dort zu einem ganz ähnlichen, über die einlaufende (ungestörte) Wellenfunktion $\Psi^{(0)}(\vec{r}')$ bereits vorhandenen hinzu. Durch eine partielle Integration können beide miteinander vereinigt werden; Voraussetzung für dieses Vorgehen ist allerdings, dass das Vektorpotential \vec{A} am Rande der Schicht genügend schnell abklingt, und zwar schneller als $\frac{1}{r}$. Potentiale mit einem zu $\frac{1}{r}$ proportionalen Anteil können somit weder mit der partiellen, und wegen des zu E proportionalen Terms auch nicht mit einer direkten Integration erledigt werden; siehe dazu aber die Abschnitte 4.4 bis 4.6.

Unter der gemachten Voraussetzung allerdings wird der in H_0 enthaltene bzw. mit ihm identische Operator $-i\vec{\sigma} \cdot \nabla_{\vec{r}'}$, mittels der genannten Methode einfach auf die links von ihm stehende Näherung für die Green-Funktion $G_E(\vec{r} - \vec{r}')$ umgewälzt, wodurch statt seiner alsbald $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}'$ entsteht. Insgesamt bewirkt dies

über die Ersetzung

$$(4.14) \quad (H_0 + E) H_M u_p \mapsto (\vec{\sigma} \vec{p}' + E) H_M u_p \equiv p \cdot [A_- \cdot \exp(i\theta_p) + A_+ \cdot \exp(-i\theta_{p'})] \cdot u_{p'}$$

zweierlei: Zum Einen können, wie gesagt, im Anschluss daran die beiden Exponentialausdrücke zu $\exp(-i\vec{q} \vec{r}')$ vereinigt werden, und zum Anderen hat sich der Spinor $u_{p'}$ gegenüber (4.5) in die neue (und beliebige) Richtung $\theta_{p'}$ gedreht.

Fügt man alles zusammen, so ergibt sich schlussendlich, dass sich die Streuwelle in der Form

$$(4.15) \quad \Psi^{(1)} = \pm \frac{f^B(\theta)}{\sqrt{-ir}} \cdot u_{p'} \cdot \exp(ipr)$$

schreiben lässt, die sich als Kreiswelle nunmehr in alle Richtungen auszubreiten vermag. Der Wurzelnenner spiegelt die damit unweigerlich einhergehende Intensitätsabnahme wieder; richtungsabhängige Unterschiede in der Intensität und Phase werden dagegen von der Streuamplitude

$$(4.16) \quad f^B(\theta) = -\sqrt{\frac{p}{2\pi}} \cdot \exp(-i\theta/2) \cdot \tilde{A}(\theta)$$

erfasst. Die hierin enthaltene Größe $\tilde{A}(\theta)$ – zwecks Symmetrisierung wurde aus ihr ein Phasenfaktor $\exp(-i\theta/2)$ herausgezogen – hängt eng mit der Fourier-Transformierten des Vektorpotentials \vec{A} zusammen und wird in (4.20) weiter untersucht.

Hat man diese erst einmal gefunden, so ergeben sich leicht der differentielle Streuquerschnitt

$$(4.17) \quad \frac{d\Lambda}{d\theta} = |f^B(\theta)|^2 = \frac{p}{2\pi} \cdot |\tilde{A}(\theta)|^2$$

und daraus durch Integration der totale Streuquerschnitt

$$(4.18) \quad \Lambda_{tot} = \int_0^{2\pi} |f^B(\theta)|^2 d\theta$$

sowie der Transportquerschnitt

$$(4.19) \quad \Lambda_{tr} = 2 \int_0^{2\pi} |f^B(\theta)|^2 \cdot \sin^2(\theta/2) d\theta .$$

In Letzterem ist der Umstand berücksichtigt, dass die Vorwärtsstreuung für die Transporteigenschaften, insbesondere für die elektrische Leitfähigkeit, keine Rolle spielt und deshalb durch einen zusätzlichen Faktor $(1 - \cos \theta) \equiv 2 \cdot \sin^2(\theta/2)$ in der Berechnung zu unterdrücken ist. Der Zweidimensionalität des Problems entsprechend haben all diese „Querschnitte“ (4.17) bis (4.19) die Dimension einer Länge [m]. Da der Begriff der Streulänge aber bereits anderweitig besetzt ist, sollen weiterhin die konventionellen Begriffsbildungen Verwendung finden; allenfalls der Begriff „Streubreite“ wäre der Situation angemessen.

Die Größe

$$(4.20) \quad \tilde{A}(\theta) = \frac{1}{2} \iint d^2 \vec{r}' \cdot \exp(-i\vec{q} \vec{r}') \cdot [A_- \cdot \exp(i\Sigma) + A_+ \cdot \exp(-i\Sigma)]$$

kann sowohl in polaren als auch in kartesischen Koordinaten untersucht werden. Tut man Letzteres, so zeigt sich [Abb. 4.1] über $q_x = -q \sin \Sigma$ und $q_y = +q \cos \Sigma$, dass

sie die Projektion der Fourier-Transformierten des Vektorpotentials $\vec{A}_q = (\tilde{A}_x, \tilde{A}_y)$ mit den Komponenten

$$(4.21) \quad \tilde{A}_x = \iint d^2\vec{r}' \cdot \exp(-i\vec{q}\vec{r}') \cdot A_x(\vec{r}')$$

und analog für \tilde{A}_y auf die Richtung der Winkelhalbierenden Σ ist; es gilt nämlich

$$(4.22) \quad \tilde{A} = \vec{A}_q \cdot \vec{e}_\Sigma \equiv \tilde{A}_x \cdot \cos \Sigma + \tilde{A}_y \cdot \sin \Sigma .$$

In Polarkoordinaten wird hingegen (4.20) über

$$(4.23) \quad \vec{q}\vec{r}' = qr \cos\left(\theta_{p'} + \frac{\pi - \theta}{2} - \phi\right) = qr \sin(\phi - \Sigma)$$

zu

$$(4.24) \quad \tilde{A}(\theta) = \frac{1}{2} \iint r dr d\phi \cdot \exp(-iqr \cdot \sin(\phi - \Sigma)) \cdot [(A_r + iA_\phi) \cdot \exp(i(\phi - \Sigma)) + (A_r - iA_\phi) \cdot \exp(-i(\phi - \Sigma))].$$

Im Falle eines rotationssymmetrischen Feldes entfällt in den Komponenten des Vektorpotentials (A_r, A_ϕ) die azimutale Abhängigkeit, sodass die Integration über den Winkel ϕ , die zu einer Bessel-Funktion (erster Ordnung) führt, vorweggenommen werden kann; es wird dadurch

$$(4.25) \quad \tilde{A}(\theta) = 2\pi i \cdot \int_{r=0}^{\infty} A_\phi(r) \cdot J_1(qr) \cdot r dr .$$

Ein eventuell vorhandenes $A_r(r)$ muss hierbei ohne Einfluss auf die physikalischen Ergebnisse bleiben, da $B_z = \left(\nabla \times \vec{A}\right)_z = \frac{1}{r} \cdot (\partial_r(rA_\phi) - \partial_\phi A_r)$ ist. So kann bei Rotationssymmetrie stets

$$(4.26) \quad A_\phi = A_\phi(r) \quad \text{und} \quad A_r \equiv 0$$

mit

$$(4.27) \quad B_z = \frac{1}{r} \partial_r(rA_\phi)$$

gewählt werden.

Andererseits darf eine Eichtransformation

$$(4.28) \quad \vec{A} \mapsto \vec{A}' = \vec{A} + \nabla f$$

mit einer (fast) beliebigen ortsabhängigen Skalarfunktion f die physikalisch messbaren Größen, also (4.17) bis (4.19) und in gewisser Weise (bei Interferenzerscheinungen) auch (4.16) nicht verändern. Wie sich zeigen lässt (siehe Anhang), ist diese Eichinvarianz bereits unter sehr schwachen Bedingungen erfüllt, die allgemein angegeben werden können. So gilt zum Beispiel in kartesischen Koordinaten

$$(4.29) \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(x, y) = 0$$

und desgleichen für y . In Polarkoordinaten müssen neben der selbstverständlichen Eindeutigkeit bezüglich des Winkels, also

$$(4.30) \quad f(r, \phi + 2\pi) = f(r, \phi)$$

noch die beiden Grenzwerte

$$(4.31) \quad \lim_{r \rightarrow 0, \infty} [r \cdot f(r, \phi)] = 0$$

gelten. Letztlich handelt es sich also immer um Bedingungen der Eindeutigkeit, Stetigkeit und Endlichkeit.

Bevor das Problem des $\frac{1}{r}$ -Potentials in Angriff genommen wird, sollen die bis jetzt erhaltenen Formeln zunächst bei einigen Beispielen Anwendung finden.

4.2. Beispiele für Potentiale ohne $\frac{1}{r}$ -Anteil

In diesem Abschnitt werden die Streuquerschnitte (4.17) bis (4.19) geeigneter Vektorpotentiale ohne $\frac{1}{r}$ -Anteil berechnet, und zwar insbesondere für den eventuell auch praktisch wichtigen Fall eines magnetischen Dipols in verschiedenen Orientierungen. Begonnen werden soll jedoch mit einem für diese Zwecke eigens konstruierten Musterbeispiel, das sich ohne Schwierigkeiten sowohl mathematischer als auch konzeptioneller Art mühelos berechnen lässt:

1) Das eher fiktive Vektorpotential

$$(4.32) \quad A_\phi = \frac{1}{2} B_0 \cdot r \cdot \exp(-r^2/R^2)$$

vermeidet jegliche Ursprungssingularität und beschreibt ein parabolisches Feldprofil

$$(4.33) \quad B_z(r) = B_0 \cdot (1 - r^2/R^2) \cdot \exp(-r^2/R^2),$$

dessen Stärke mit zunehmendem Abstände vom Mittelpunkt jedoch gaußförmig abgeschwächt wird. Sein Gesamtfluss durch die Ebene des Graphen

$$(4.34) \quad \Phi_{ges} = \int B_z \cdot dA = 2\pi \cdot \int_0^\infty B_z(r) \cdot r dr$$

verschwindet identisch. Über (4.25) wird

$$(4.35) \quad \tilde{A} = \frac{i\pi}{4} q B_0 R^4 \cdot \exp\left(-\frac{1}{4} q^2 R^2\right),$$

sodass

$$(4.36) \quad \frac{d\Lambda}{d\theta} = (\pi R^2 B_0)^2 \cdot \frac{p^3 R^4}{8\pi} \cdot \sin^2(\theta/2) \cdot \exp(-2p^2 R^2 \sin^2(\theta/2))$$

und schließlich

$$(4.37) \quad \Lambda_{tot} = (\pi R^2 B_0)^2 \cdot \frac{1}{8} p^3 R^4 \cdot {}_1F_1\left(\frac{3}{2}; 2; -2p^2 R^2\right)$$

und

$$(4.38) \quad \Lambda_{tr} = (\pi R^2 B_0)^2 \cdot \frac{3}{16} p^3 R^4 \cdot {}_1F_1\left(\frac{5}{2}; 3; -2p^2 R^2\right)$$

ist; dabei bezeichnet ${}_1F_1$ die konfluente hypergeometrische Funktion.

Abb. 4.2 veranschaulicht die Ergebnisse. Genau wie in all den noch folgenden Abbildungen sei auch hier die Richtung des einfallenden Teilchenstrahles zu $\theta_p = 0$ angenommen. Eine unmittelbare Vorwärtsstreuung in dieselbe Richtung $\theta = 0$ findet nicht statt. Diese Aussage ist aber nicht so zu verstehen, als ob es überhaupt keine vorwärts fliegenden Teilchen mehr gäbe; denn selbstverständlich existiert immer noch der ursprünglich einlaufende Strahl (4.4). Jedoch kann sich kein Teilchen noch in seiner uranfänglichen Richtung fortbewegen, *nachdem* es mit der ausgedehnten Struktur (4.33) in Wechselwirkung trat. Denkbar wäre dies allenfalls über eine Mehrfachstreuung, die aber als zu unwahrscheinlich, um ins Gewicht zu fallen, ausgeschlossen wurde.

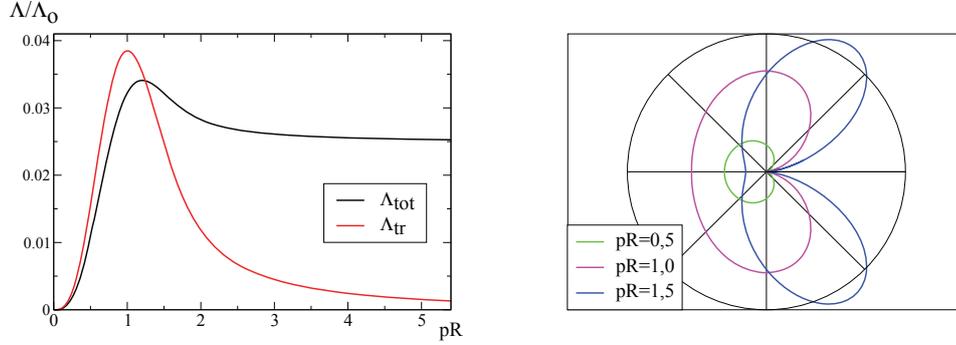


ABBILDUNG 4.2. Integrierte (links) und differentielle (rechts) Querschnitte bei der Streuung am Vektorpotential (4.32). Die Auftragung über $\Lambda_0 = (\pi R^2 B_0)^2 R$ erlaubt eine universelle Darstellung, die nur noch von pR als einzigem Parameter abhängt. Im Polardiagramm wird die Richtungsabhängigkeit für drei verschiedene repräsentative Werte aufgezeigt; der Hilfskreis dient als Orientierung und bezeichnet die Stärke $\frac{d\Lambda}{d\theta} = 0,01 \cdot \Lambda_0$. Während sich die Rückstreuung in einer nicht-monotonen Weise entwickelt, nimmt die Vorwärtsstreuung immer mehr zu.

Versteht man hingegen unter einer Vorwärtsstreuung auch und vor Allem eine solche innerhalb kleiner, aber endlicher Winkel, so ist festzustellen, dass die Streuung in einen Bereich um $|\theta| \lesssim \frac{\pi}{4}$ mit zunehmender Durchschlagskraft, sprich Impulse der Teilchen immer stärker wird. Da vom Transportquerschnitt jedoch nur die Streuung mit größerer Ablenkung in einem nennenswerten Maß erfasst wird, nimmt dieser nach Durchlaufen eines steilen Maximums bei $pR \sim 1$ wieder ab, um sich dann für genügend große Werte $pR \gg 1$ allmählich dem Grenzwert Null zu nähern. Dagegen fällt der totale Querschnitt Λ_{tot} , der sämtliche Stöße ungeachtet ihrer ablenkenden Wirkung in Rechnung stellt, kaum ab und strebt nach Durchlaufen eines nur schwach ausgeprägten Maximums sehr bald gegen einen endlichen Sättigungswert mit $\Lambda_{tot}^\infty/\Lambda_0 = \frac{1}{16 \cdot \sqrt{2\pi}} \simeq 0,025$.

2) Transversaler Dipol: Ein in die Graphenebene eingebetteter Dipol mit dem Dipolmoment m_z (senkrecht zu dieser) hat das Vektorpotential

$$(4.39) \quad A_\phi = \frac{m_z}{r^2}.$$

Es wird

$$(4.40) \quad \tilde{A} = 2\pi i \cdot m_z$$

und folglich

$$(4.41) \quad \frac{d\Lambda}{d\theta} = 2\pi m_z^2 \cdot p$$

sowie

$$(4.42) \quad \Lambda_{tot} = \Lambda_{tr} = (2\pi m_z)^2 \cdot p.$$

Es ist zu konzedieren, dass das Potential (4.39) auf diese direkte Weise eigentlich gar nicht hätte behandelt werden dürfen, da Selbiges bei der im Zusammenhang mit (4.14) geschilderten partiellen Integration an deren unterer Grenze zu stark divergiert. Stattdessen ist ein Konvergenzparameter einzufügen, der nach erfolgter Integration wieder zu Null wird. Bei entsprechend geschickter Wahl passt sich dieser aber nahtlos in das physikalische Bild ein, das heißt, er *kann*, muss aber nicht Null gesetzt werden, beschreibt doch

$$(4.43) \quad A_\phi = \frac{m_z \cdot r}{\sqrt{r^2 + h^2}^3}$$

einen Dipol gleicher Stärke, der sich in einer Höhe h über der Graphenebene befindet. Zum Zwecke einer unterschiedlichen Nomenklatur werde dieser hier als *perpendikularer Dipol* bezeichnet. Da für ihn

$$(4.44) \quad \tilde{A} = 2\pi i \cdot m_z \cdot \exp(-hq)$$

gilt, werden seine Streuquerschnitte

$$(4.45) \quad \frac{d\Lambda}{d\theta} = 2\pi m_z^2 \cdot p \cdot \exp(-4hp \cdot |\sin(\theta/2)|)$$

und

$$(4.46) \quad \Lambda_{tot} = (2\pi m_z)^2 \cdot p \cdot \hat{F}_0(hp)$$

sowie

$$(4.47) \quad \Lambda_{tr} = (2\pi m_z)^2 \cdot 2p \cdot \hat{F}_2(hp).$$

Die über

$$(4.48) \quad \hat{F}_n(x) := \frac{2}{\pi} \int_0^1 \frac{t^n \exp(-4tx) dt}{\sqrt{1-t^2}}$$

definierten Funktionen finden im Anhang ihre nähere Erläuterung. Aus dieser (oder der obigen Definition) geht hervor, dass für kleine Höhen h , für die $hp \ll 1$ gilt, als Grenzwerte für die integralen Querschnitte wieder die (auch miteinander übereinstimmenden) Ergebnisse (4.42) des transversalen Dipols herauskommen; auch die differentiellen Querschnitte (4.45) und (4.41) werden dann einander gleich.

3) Paralleler Dipol: Der Dipol – seine Stärke werde jetzt mit m_\parallel bezeichnet – liege wieder in der Höhe h über der Graphenebene, aber nunmehr parallel zu dieser, und zwar so, dass sein Nordpol um den Winkel α (nach links) gegen die y-Achse verdreht ist, siehe Abb. 4.1. Es gilt also für das Dipolmoment (in der x-y-Ebene)

$$(4.49) \quad \vec{m} = \begin{pmatrix} m_x \\ m_y \end{pmatrix} = m_\parallel \cdot \begin{pmatrix} -\sin \alpha \\ +\cos \alpha \end{pmatrix}$$

und für das Vektorpotential in Polarkoordinaten

$$(4.50) \quad \begin{pmatrix} A_r \\ A_\phi \end{pmatrix} = \frac{m_\parallel h}{\sqrt{r^2 + h^2}^3} \cdot \begin{pmatrix} \cos(\alpha - \phi) \\ \sin(\alpha - \phi) \end{pmatrix}.$$

Das Auftreten zweier Komponenten und insbesondere ihre auch azimutale Abhängigkeit vereitelt eine weitere Nutzung der Formel (4.25); stattdessen ist auf die Kombination

$$(4.51) \quad A_r \pm iA_\phi = \frac{m_\parallel h}{\sqrt{r^2 + h^2}^3} \cdot \exp(\pm i(\alpha - \phi))$$

der allgemeinere Ausdruck (4.24) anzuwenden. Dabei ergibt sich

(4.52)

$$\tilde{A} = 2\pi m_{\parallel} h \cos(\Sigma - \alpha) \cdot \int_0^{\infty} \frac{J_0(qr) \cdot r dr}{\sqrt{r^2 + h^2}^3} = 2\pi m_{\parallel} \cdot \cos(\theta/2 + \theta_p - \alpha) \cdot \exp(-hq),$$

und der differentielle Querschnitt

$$(4.53) \quad \frac{d\Lambda}{d\theta} = 2\pi m_{\parallel}^2 \cdot p \cdot \cos^2(\theta/2 + \theta_p - \alpha) \cdot \exp(-4hp \cdot |\sin(\theta/2)|)$$

erhält eine Winkelabhängigkeit, die außer bei senkrechtem Einfall $\theta_p = \alpha$ nicht mehr symmetrisch zu $\theta = 0$ ist. Auch die integralen Querschnitte

$$(4.54) \quad \Lambda_{tot} = (2\pi m_{\parallel})^2 \cdot p \cdot \left\{ \hat{F}_2(hp) + \left(\hat{F}_0(hp) - 2\hat{F}_2(hp) \right) \cdot \cos^2(\theta_p - \alpha) \right\}$$

und

$$(4.55) \quad \Lambda_{tr} = (2\pi m_{\parallel})^2 \cdot 2p \cdot \left\{ \hat{F}_4(hp) + \left(\hat{F}_2(hp) - 2\hat{F}_4(hp) \right) \cdot \cos^2(\theta_p - \alpha) \right\}$$

hängen verständlicherweise von der Ausrichtung des Dipols in Bezug auf das einlaufende Teilchen ab. Allerdings verschwindet für $hp \ll 1$ die Winkelabhängigkeit des totalen Querschnitts (4.54) und zeigt sich erst wieder mit zunehmendem Parameter hp ; beim Transportquerschnitt (4.55) ist sie dagegen stets vorhanden. Bei isotroper Verteilung vieler solcher, zur Ebene paralleler Streuer mit $\alpha \in [0; 2\pi]$ ergeben sich, wenn über diese gemittelt wird, für alle drei Streuquerschnitte die gleichen funktionalen Abhängigkeiten von hp , jedoch sind die Werte hier nur halb so groß wie zuvor beim perpendikularen Dipol [siehe (4.45) bis (4.47)]. Für den totalen Streuquerschnitt Λ_{tot} gilt diese Halbierung wegen der dann verlorengegangenen Richtungsabhängigkeit für $hp \ll 1$ sogar bei beliebiger Ausrichtung α eines einzelnen Streuers.

Mittels einer geeigneten Eichtransformation

$$(4.56) \quad f(r, \phi) = \frac{m_{\parallel}}{h} \cdot \left(1 - \frac{r}{\sqrt{r^2 + h^2}} \right) \cdot \cos(\phi - \alpha),$$

die die Bedingungen (4.30) und (4.31) erfüllt, kann $A_r = 0$ identisch zum Verschwinden gebracht werden; anders als in den vorigen Beispielen wird aber der zur Ebene parallele Dipol gemäß seiner Anisotropie nicht mehr über ein bloß von r abhängiges Potential, sondern über

$$(4.57) \quad A_{\phi}(r, \phi) = \frac{m_{\parallel}}{h} \cdot \left(\frac{r^2}{\sqrt{r^2 + h^2}^3} - \frac{1}{r} \right) \cdot \sin(\phi - \alpha)$$

beschrieben. Die Differenz in der Klammer sorgt dafür, dass dieses im Unendlichen schnell genug (wie $1/r^3$) abfällt, und man erhält genau dieselben Ergebnisse wie zuvor mit dem oben angegebenen zweikomponentigen Potential (4.50).

Abb. 4.3 stellt alle für den Dipol relevanten Ergebnisse zusammen. Ihr kann, ebenso wie einem Vergleich der Formeln (4.53) mit (4.45), entnommen werden, dass, eine gleiche Stärke $m_{\parallel} = m_z$ der Dipole vorausgesetzt, die Streuung an einem parallelen Dipol gleich welcher Ausrichtung stets eine geringere sein wird als an einem perpendikularen, dessen Kontur – gemeint ist der differentielle Querschnitt $\frac{d\Lambda}{d\theta}$ dargestellt im Polardiagramm – somit für die parallelen Dipole als Einhüllende fungiert. Bei dem in der Abbildung gewählten Wert des Parameters besitzt unter den Letztgenannten derjenige, der auf den einlaufenden Strahl hin ausgerichtet ist

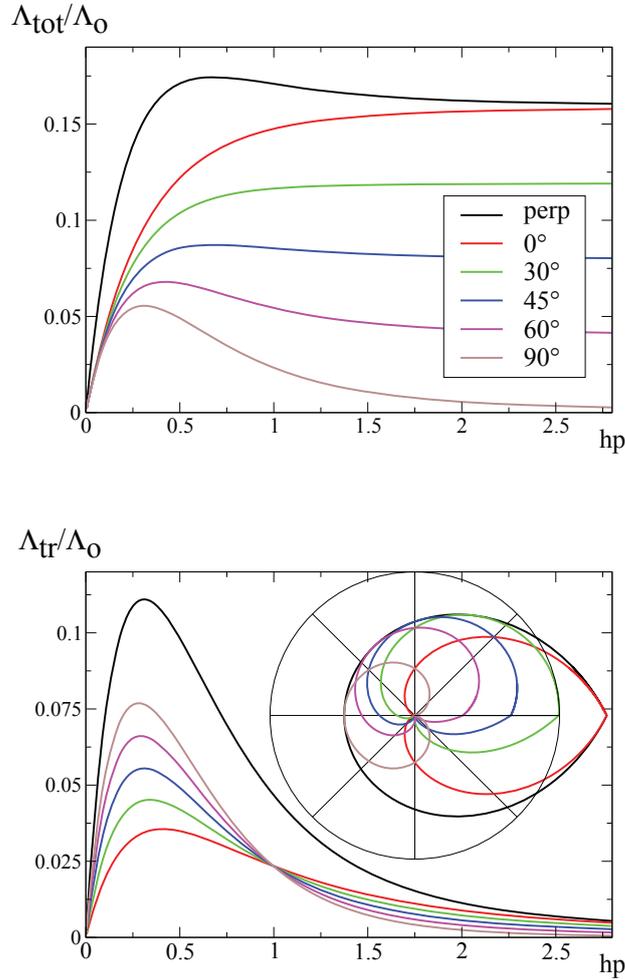


ABBILDUNG 4.3. Totale (oben), Transport- (unten) und – daselbst im Einschub – differentielle Querschnitte bei der Streuung an Dipolen verschiedener Orientierung, siehe Legende. Bei vorgegebener Ausrichtung ergeben sich wieder universelle Funktionen des Parameters hp ; die Auftragung erfolgt dabei über $\Lambda_0 = (2\pi m_i)^2 / h$ mit $i = z, \parallel$. Im Polardiagramm wurde um der Differenzierung willen mit $hp = 0,25$ ein Wert gewählt, der bereits nahe am jeweiligen Maximum der dann stark unterschiedlichen Transportquerschnitte liegt; der Hilfskreis befindet sich bei $\frac{d\Lambda}{d\theta} = 0,03 \cdot \Lambda_0$. Dort weitere Streudiagramme für über $\alpha = 90^\circ$ hinausgehende Winkel einzuzeichnen, ist hierbei nicht erforderlich und würde bloß die Zeichnung überladen, denn die entsprechenden Diagramme kämen über die Ersetzung $\alpha \mapsto 180^\circ - \alpha$ & $\theta \mapsto -\theta$ in (4.53) lediglich spiegelbildlich zur x-Achse zu liegen. Bei stetiger Veränderung des Winkels α , das heißt der Ausrichtung des zur Ebene parallelen Dipols, wird somit die Kontur, in die der zu ihr perpendikulare streut, am Ende komplett ausgefüllt. Als Mittelwert einer isotropen Verteilung paralleler Dipole ergibt sich in den integrierten Querschnitten folglich nur der halbe Wert: die Kurvenverläufe sind dieselben wie bei einer 45° -Ausrichtung.

($\alpha = 90^\circ$), die zwar insgesamt gesehen kleinste Wahrscheinlichkeit für eine Streuung überhaupt, jedoch auch die größte – und zwar nicht nur relativ, sondern auch absolut betrachtet – für eine Rückstreuung; für $\theta = \pi$ kommt er dabei dem perpendikularen gar an Wirkung gleich. Somit kommt eben dieser Ausrichtung zwar der kleinste totale, andererseits hingegen, wenigstens bis $hp \leq 0,997$, auch der größte Transportquerschnitt des parallelen Dipols zu.

Für $hp \gg 1$ sinkt die Wahrscheinlichkeit einer Wechselwirkung ohnehin stark (exponentiell) ab – es sei denn bei ausgesprochener Vorwärtsstreuung $|\theta| \lesssim \frac{1}{hp}$. Während sich folglich die Transportquerschnitte dann dem Grenzwert Null annähern, tendieren die totalen Querschnitte, diese auch erfassend, gegen einen jeweils konstanten Wert, und zwar beim perpendikularen Dipol gegen $\Lambda_{tot}^\infty/\Lambda_0 = \frac{1}{2\pi}$. Beim parallelen Dipol verkleinert sich dieser Wert noch um einen Faktor $\cos^2 \alpha$, der von dessen Ausrichtung abhängt. Für $\alpha = 0^\circ$ – in beiden Fällen liegt der Dipol senkrecht zum einfallenden Strahl – nähern sich beide Verläufe einander an; die Stöße sind dann aber kaum noch ablenkend.

Grundsätzlich ist der Verlauf der integrierten Querschnitte wie folgt zu verstehen: Bei einer Streuung in den verfügbaren zweidimensionalen Phasenraum hinein ergibt sich, den Grundprinzipien der Quantenmechanik gemäß, für die Amplitude ein Faktor $p^{2/2}$, der sich infolge kreisförmiger Ausbreitung der gestreuten Welle und, damit verbunden, aus Dimensionsgründen zu $p^{1/2}$ vermindert. Dieser erscheint denn auch ganz folgerichtig in (4.16), und die Intensität der Letztgenannten ist, solange keine weiteren Effekte hinzutreten, proportional zu p .

Wird ein an sich strukturloser Dipol (4.39) als das konzeptionell einfachste aller felderzeugenden Gebilde in die Graphenschicht mithineingebettet und kann, selbst als punktförmig zu betrachten, von daher eine Längenskala auch über seinen Daseins- oder Wirkungsort mitnichten etablieren, so ist für diesen Fall das Ergebnis damit auch schon festgelegt, siehe (4.41) bzw. (4.42).

Für Dipole aber, die sich *über*, also jenseits dieser Schicht befinden, ist dies anders: Über den Abstand $h > 0$, den sie von derselben haben, kommt eine Längenskala mit ins Spiel, an der sich die de-Broglie-Wellenlänge $\lambda_{dB} = \frac{2\pi}{p}$ des einfallenden Teilchens messen lassen muss. Solange dieses h noch klein ist, also $hp \ll 1$, werden die Ergebnisse – wie bereits oben ausgeführt – wenigstens für den perpendikularen Dipol nur unmerklich modifiziert. Beim parallelen Dipol gibt es, je nach seiner Ausrichtung, eine mehr oder minder starke Verringerung der Querschnitte; indessen bleibt auch hier die Proportionalität zu p noch ungebrochen. Dies gilt aber, wie nochmals betont werden soll, nur für im Verhältnis zur Wellenlänge λ_{dB} kleine Abstände h des Dipols. Wird hingegen $hp \gtrsim 1$, also h mit λ_{dB} vergleichbar, so liegt damit zwar auch ein Einfluss auf die Stärke der Streuung vor; dieser wurde aber bereits in den Abbildungen durch die Auftragung über $\Lambda_0 \sim 1/h$ erfasst und ist somit vom gegenwärtigen Blickwinkel aus ohne Belang:

Hier von Interesse ist vielmehr, dass auch die Struktur des Feldes (nicht die des Streuers selbst) und des zugehörigen Vektorpotentials über h mitbestimmt wird. Wenn also nun, wie vorausgesetzt, dessen effektive Ausdehnung mit der de-Broglie-Wellenlänge des Inzidenteilchens vergleichbar wird, so kommt es beim Abtasten durch Letzteres zu Interferenzen, und zwar, da die Wellenlänge nun, gegebenenfalls auch mehrfach, in die Feldverteilung hineinpasst, vor allem zu destruktiven.

Dadurch wird, spätestens bei $hp \sim 1$, der Anstieg der Wirkungsquerschnitte nachhaltig abgebremst, und die Streuwahrscheinlichkeit nimmt auf keinen Fall mehr weiter zu.

Bei Potential- und Feldverteilungen, die, auch *idealiter* nicht, von einem Punkt aus zu erzeugen sind, kommt es mathematisch gesehen weniger darauf an, welche Potenzen von r das Vektorpotential überhaupt mitbringt, als vielmehr, *wo* diese zur Wirkung gelangen, also im Fern- oder Nahbereich. Im Zusammenspiel der verschiedenen Längenskalen ist eine grundsätzliche und für alle Fälle gültige Aussage über die p -Abhängigkeit der Querschnitte somit nicht zu treffen; dies ist nur möglich, wenn, wie in (4.83), durch das Potential eine solche Skala eben nicht hinzugefügt wird.

Dagegen sorgt beispielsweise der Exponentialfaktor in (4.32) für eine Beschränkung des Potentials im Wesentlichen auf $r \lesssim R$. Unter der hier gemachten Annahme $pR \ll 1$ wird damit auf jeden Fall $qr \ll 1$, und in (4.25) gilt für die Besselfunktion $J_1(qr) \approx \frac{1}{2}qr$. Die Amplitude bringt folglich einen zusätzlichen Faktor p ins Spiel, und die Wirkungsquerschnitte [(4.36) bis (4.38)] werden allesamt proportional zu p^3 . Selbstverständlich kommt es auch hier, wenn $pR \gtrsim 1$ wird, wieder zu destruktiven Interferenzen und damit zu einer Abbremsung der Wirkungsquerschnitte resp. ihres Anstiegs.

Es ist noch anzumerken, dass die im Beispiel 1 bei Gleichung (4.34) gemachte Aussage über das Verschwinden des magnetischen Flusses auf Grund der in sich geschlossenen und bei unbegrenzter Graphenschicht diese stets in beiden Richtungen durchstoßenden Feldlinien auch für die danach betrachteten Dipolfelder eine ausnahmslose Gültigkeit besitzt. Allerdings laufen die Feldlinien beim Dipol *in* demselben und dort stark gebündelt zurück, sodass dieser, wenn er – wie beim transversalen Dipol – *innerhalb* der Graphenschicht liegt, daselbst eine Singularität bewirkt. Im übernächsten Abschnitt (Abschnitt 4.4) wird die Singularität bei $r = 0$ demgegenüber noch verschärft.

4.3. Zweilagiges Graphen und der Schrödinger-Fall

Es ist lehrreich, die in den beiden vorangegangenen Abschnitten durchgeführten Betrachtungen auch für zweilagiges Graphen (2LG) anzustellen. Für dieses wird (bspw. in [75], [76] und [77]) der Hamilton-Operator

$$(4.58) \quad H^{2LG} = \frac{1}{2m^*} \cdot \begin{pmatrix} 0 & (p_x - ip_y)^2 \\ (p_x + ip_y)^2 & 0 \end{pmatrix}$$

angegeben, der die quadratische Dispersion eines mit der effektiven Masse m^* behafteten Ladungsträgers mit seiner schon vom einlagigen Graphen her bekannten Chiralität verknüpft. Um in Selbigem die Peierls-Substitution (2.30) leichter ausführen zu können, ist es zweckmäßig, in Analogie zu den Potentialen (4.8) auch die Impulse

$$(4.59) \quad p_{\pm} := p_x \pm ip_y$$

als komplexe Linearkombinationen einzuführen. Aus den entsprechenden Eigenzuständen (4.4) lassen sie sich formal durch Anwendung der Operatoren

$$(4.60) \quad p_- = -i\partial_z \quad \& \quad p_+ = -i\partial_{\bar{z}}$$

gewinnen; dabei gehören die Differentialoperatoren

$$(4.61) \quad \partial_z = \partial_x - i\partial_y \quad \& \quad \partial_{\bar{z}} = \partial_x + i\partial_y$$

zu den komplexen Koordinaten

$$(4.62) \quad z = \frac{1}{2}(x + iy) \quad \& \quad \bar{z} = \frac{1}{2}(x - iy) .$$

Der in Anwesenheit eines magnetischen Vektorpotentials \vec{A} zuständige Hamilton-Operator

$$(4.63) \quad H = \frac{1}{2m^*} \cdot \begin{pmatrix} 0 & (p_- + A_-)^2 \\ (p_+ + A_+)^2 & 0 \end{pmatrix}$$

zerlegt sich gemäß (4.1) in

$$(4.64) \quad H_0 = \frac{-1}{2m^*} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \partial_z^2 \\ \partial_{\bar{z}}^2 & 0 \end{pmatrix}$$

und

$$(4.65) \quad H_M = \frac{-i}{2m^*} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \partial_z A_- + A_- \partial_z \\ \partial_{\bar{z}} A_+ + A_+ \partial_{\bar{z}} & 0 \end{pmatrix} .$$

In Letzterem wurden die bezüglich des Vektorpotentials quadratischen Glieder A_{\pm}^2 vernachlässigt, da diese einer Mehrfachstreuung entsprächen, die jedoch in der hier vorgenommenen *ersten* Born-Approximation bewusst unberücksichtigt geblieben ist. Sie jetzt, allerdings nur teilweise, wieder miteinzubeziehen, wäre nicht nur inkonsequent, sondern würde als Folge davon sogar die Eichinvarianz (4.28) zerstören.

Die Lösung zum ungestörten Operator (4.64) ist wieder die (ein)laufende Welle (4.4), und der (ihre freie Bewegung beschreibende) Exponentialfaktor wird über (4.59) und (4.62) zu $\exp(i\vec{p} \cdot \vec{r}) \equiv \exp(i(p_- z + p_+ \bar{z}))$. Um hier Konsistenz zu schaffen, muss jedoch der Spinor

$$(4.66) \quad u_p = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \exp(2i\theta_p) \end{pmatrix}$$

anstelle von (4.5) Verwendung finden. Dieser weist in seiner unteren Komponente kein doppeltes Vorzeichen mehr auf – die Einträge wurden durch das Hinzutreten der zweiten Graphenschicht gewissermaßen quadriert – und ist damit für Teilchen- und Lochzustände vollkommen identisch. Ihre Unterscheidung, also die Unterteilung in Leitungs- und Valenzbänder, verläuft stattdessen über das Vorzeichen der effektiven Masse m^* , die in den Hamilton-Operatoren, so auch in (4.64) auftritt. Dessen Eigenwerte sind unter Beachtung, dass $p_+ p_- = p_x^2 + p_y^2 = |\vec{p}|^2 \equiv p^2$ ist, einfach

$$(4.67) \quad E = \frac{p^2}{2m^*} .$$

Im Störoperator (4.65) wirken die Differentialoperatoren ∂_z und $\partial_{\bar{z}}$ auf alles rechts von ihnen Stehende, insbesondere auch auf die ihnen in (4.12) noch folgende Wellenfunktion $\Psi^{(0)}$. Für die Streuwelle selbst ergibt sich mittels der hierzu geeigneten Green-Funktion

$$(4.68) \quad G_E(\vec{r}) = \iint \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \cdot \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})}{(2m^*)^{-2} \cdot [k^4 - (p \pm i0)^4]} = \pm \frac{i}{2} \left(\frac{m^*}{p} \right)^2 \cdot H_0^{(1)}(pr)$$

mit ihrem asymptotischen Verhalten

$$(4.69) \quad G_E(\vec{r}') \mapsto \pm \left(\frac{m^*}{p} \right)^2 \cdot \frac{\exp(ipr)}{\sqrt{-2\pi i p r}}$$

nach (bei manchen Termen bis zu drei Mal) wiederholt ausgeführten partiellen Integrationen schließlich wieder die allgemeine Form (4.15) mit der Streuamplitude

$$(4.70) \quad f^B(\theta) = -\sqrt{\frac{p}{2\pi}} \cdot \exp(-i\theta) \cdot \cos(\theta/2) \cdot \tilde{A}(\theta) .$$

Diese unterscheidet sich vom früheren Ergebnis (4.16) für das einlagige Graphen außer in der Phase vor Allem durch das Hinzutreten des Faktors $\cos(\theta/2)$, der die Streuquerschnitte vermindert, in ihrer Richtungsabhängigkeit modifiziert, und insbesondere auch die Rückstreuung $\theta = \pi$ gänzlich unterbindet.

Welche Auswirkungen dies im Einzelnen hat, möge sogleich an den Beispielen des vorigen Abschnitts demonstriert werden, die nun allesamt dazu ein weiteres Mal durchlaufen werden. Bevor dies jedoch geschieht, sei noch darauf hingewiesen, dass auch im Schrödinger-Fall mit seiner quadratischen Dispersion (4.67), aber eben ohne Chiralität, genau dieselben Querschnitte wie für das 2LG herauskommen. Denn wie sich [siehe Anhang] leicht zeigen lässt, gilt für die Streuamplitude unter den gemachten Prämissen (abgesehen von der in diesem Zusammenhang völlig belanglosen Phase) ein ansonsten vollkommen gleichartiger Ausdruck

$$(4.71) \quad f^B(\theta) = -\sqrt{\frac{p}{2\pi}} \cdot \cos(\theta/2) \cdot \tilde{A}(\theta) .$$

Durch das Einfügen des zusätzlichen Faktors $\cos^2(\theta/2)$ in den differentiellen Querschnitt

$$(4.72) \quad \frac{d\Lambda}{d\theta} = |f^B(\theta)|^2 = \frac{p}{2\pi} \cdot \cos^2(\theta/2) \cdot |\tilde{A}(\theta)|^2$$

[an Stelle von (4.17)] sind nun also die integralen Querschnitte (4.18) und (4.19) aufs Neue zu berechnen. Bei dem Vektorpotential (4.32) des ersten Beispiels wird dadurch

$$(4.73) \quad \Lambda_{tot} = (\pi R^2 B_0)^2 \cdot \frac{1}{8} p^3 R^4 \cdot \left[{}_1F_1\left(\frac{3}{2}; 2; -2p^2 R^2\right) - \frac{3}{4} {}_1F_1\left(\frac{5}{2}; 3; -2p^2 R^2\right) \right]$$

und

$$(4.74) \quad \Lambda_{tr} = (\pi R^2 B_0)^2 \cdot \frac{3}{16} p^3 R^4 \cdot \left[{}_1F_1\left(\frac{5}{2}; 3; -2p^2 R^2\right) - \frac{5}{6} {}_1F_1\left(\frac{7}{2}; 4; -2p^2 R^2\right) \right]$$

Man erkennt die jeweils durch den zweiten Term [in der eckigen Klammer] beschriebene Reduktion besagter Querschnitte gegenüber (4.37) bzw. (4.38), die durchaus nicht unbedeutend ist: für kleine Werte des Parameters $hp \ll 1$ beträgt sie 75 bzw. 83 Prozent; das Maximum im Transportquerschnitt vermindert sich um rund 71 Prozent. Siehe dazu die Abb. 4.4.

Auch bei den Dipolen treten durch die quadratische Dispersion Herabminderungen auf, die in der gleichen Größenordnung liegen. So ergibt sich beim transversalen Dipol statt (4.42) nurmehr

$$(4.75) \quad \Lambda_{tot} = (2\pi m_z)^2 \cdot \frac{p}{2}$$

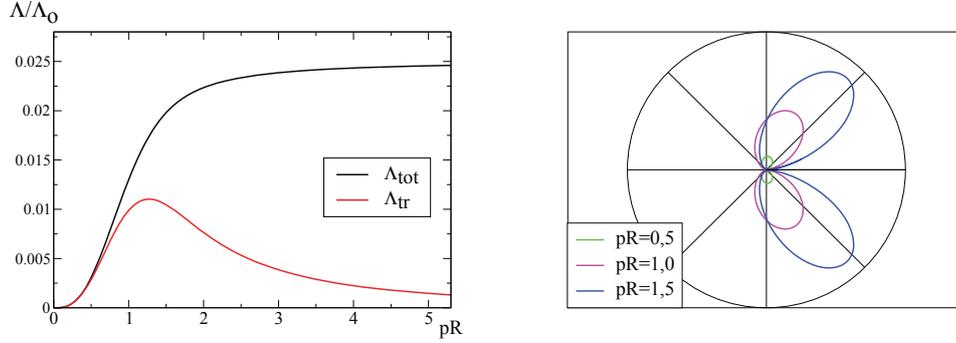


ABBILDUNG 4.4. Wie Abb. 4.2, jedoch für 2LG. Deutlich erkennbar im Polardiagramm (rechts) ist die Unterdrückung der Rückstreuung. Dadurch wird das Maximum im Transportquerschnitt nicht nur von $pR = 1,005$ auf $pR = 1,272$ verschoben, sondern fällt auch merklich geringer aus. Beim totalen Querschnitt entfällt es sogar ganz.

und

$$(4.76) \quad \Lambda_{tr} = (2\pi m_z)^2 \cdot \frac{p}{4}.$$

Bei den Dipolen mit $h > 0$ hingegen muss in den integralen Querschnitten überall dort, wo die Funktion (4.48) auftrat, die Ersetzung $\hat{F}_n(hp) \mapsto \hat{F}_n(hp) - \hat{F}_{n+2}(hp)$ vorgenommen werden, die sich aus $\cos^2(\theta/2) \equiv 1 - \sin^2(\theta/2)$ und der Erläuterung im Anhang leicht ergibt. Auf diese Weise zeitigt der perpendikuläre Dipol Resultate

$$(4.77) \quad \Lambda_{tot} = (2\pi m_z)^2 \cdot p \cdot \left[\hat{F}_0(hp) - \hat{F}_2(hp) \right]$$

und

$$(4.78) \quad \Lambda_{tr} = (2\pi m_z)^2 \cdot 2p \cdot \left[\hat{F}_2(hp) - \hat{F}_4(hp) \right],$$

die formal mit jenen eines longitudinalen Dipols gleicher Stärke im Dirac-Weyl-Fall [siehe (4.54) und (4.55)] übereinstimmen, wenn dieser senkrecht zum einfallenden Teilchenstrahle ($\alpha = \theta_p$) ausgerichtet ist.

Für den longitudinalen Dipol selbst bekommt man mit

$$(4.79) \quad \Lambda_{tot} = (2\pi m_{\parallel})^2 \cdot p \cdot \left[\left(\hat{F}_2(hp) - \hat{F}_4(hp) \right) + \left(\hat{F}_0(hp) - 3\hat{F}_2(hp) + 2\hat{F}_4(hp) \right) \cdot \cos^2(\theta_p - \alpha) \right]$$

und

$$(4.80) \quad \Lambda_{tr} = (2\pi m_{\parallel})^2 \cdot 2p \cdot \left[\left(\hat{F}_4(hp) - \hat{F}_6(hp) \right) + \left(\hat{F}_2(hp) - 3\hat{F}_4(hp) + 2\hat{F}_6(hp) \right) \cdot \cos^2(\theta_p - \alpha) \right]$$

im Schrödinger-Fall und beim 2LG Ergebnisse, die die Winkelabhängigkeit für kleine Parameterwerte, anders als zuvor, jetzt beim totalen statt beim Transportquerschnitt ausweisen, gilt doch einerseits

$$(4.81) \quad \Lambda_{tot}^{hp \ll 1} = (2\pi m_{\parallel})^2 \cdot \frac{p}{8} \cdot (1 + 2 \cos^2(\theta_p - \alpha));$$

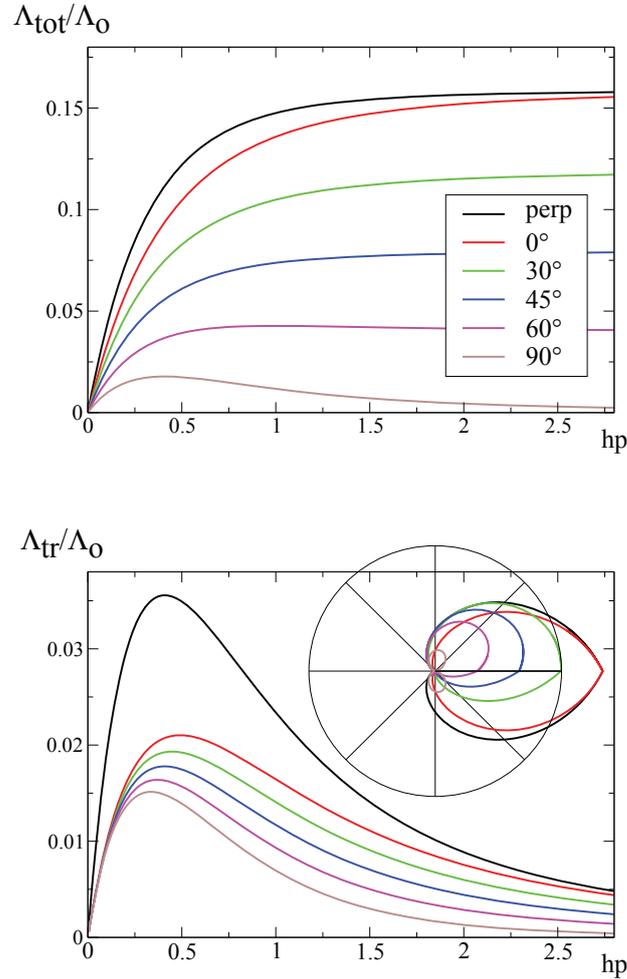


ABBILDUNG 4.5. Wie Abb. 4.3, jedoch für 2LG; siehe Text.

andererseits hingegen ist

$$(4.82) \quad \Lambda_{tr}^{hp \ll 1} = (2\pi m_{\parallel})^2 \cdot \frac{p}{8}$$

unabhängig von des Dipols Ausrichtung.

Abb. 4.5 zeigt die Ergebnisse. Die Unterdrückung der Rückstreuung durch die veränderte Dispersion ist abermals unverkennbar, und wiederum verringern sich folglich die Transportquerschnitte, insbesondere auch deren Maxima.

Hierbei soll noch folgende Besonderheit verzeichnet werden: Da die Unterdrückung der Rückstreuung beim parallelen Dipol dann am stärksten ins Gewicht fällt, wenn seine Ausrichtung $\alpha = 90^\circ$ beträgt, wo diese auch am stärksten ausgeprägt war, ist sein Transportquerschnitt von Anfang an der kleinste, und es bedarf

nicht mehr der vorwärtsschiebenden Wirkung großer Impulse p , um die beim einlagigen Graphen erst dann aufscheinende Reihenfolge zu etablieren; eine Umkehr bei $hp = 0,997$ wie in Abb. 4.3 findet demnach also nicht statt.

Die bereits ohnehin geringen Transportquerschnitte nehmen für $hp \gg 1$ weiter ab; die Grenzwerte der totalen Querschnitte (für $hp \mapsto \infty$) sind jedoch dieselben wie zuvor beim 1LG. In entsprechender Form ($pR \mapsto \infty$) gilt dies – vergleiche dazu Abb. 4.4 mit Abb. 4.2 – auch für das Potential (4.32). Eine gegebene Struktur als Streuer vorausgesetzt, scheint die Dispersion der Energie, wenn Letztere nur genügend hoch ist, folglich an Bedeutung zu verlieren.

Zusammenfassend lässt sich bei einem Vergleich der drei differentiellen Streuquerschnitte, die sich in erster Born-Näherung ergaben, nämlich (4.16), (4.70) und (4.71), feststellen, dass sie allesamt den ihnen gemeinsamen Phasenraumfaktor $\sqrt{p/2\pi}$ enthalten sowie die Größe $\tilde{A}(\theta)$, welche die Einzelheiten des jeweils streuenden Potentials mit ins Spiel bringt. Aus ihr wird bei der Symmetrisierung und bedingt durch das Auftreten der Spinoren (4.5) bzw. (4.66) ein Phasenfaktor $\exp(-iN\theta/2)$ mit N als der Anzahl der chiralen Schichten herausgezogen, der ganz im Einklang mit jener Berry-Phase steht, die bereits im Abschnitt 2.2 Erwähnung fand. Denn auch für die gestreute Welle muss sich bei der vollen Drehung einer (einlagigen) Graphenschicht eine zusätzliche Phase π ergeben; beim 2LG sind es dann entsprechend $2 \cdot \pi$.

Hingegen erfolgt die Herausbildung des Faktors $\cos(\theta/2)$, der die Rückstreuung unterdrückt, nur über die quadratische Dispersion der sich bewegenden Ladungsträger. Deren Verhalten steht damit in einem merkwürdigen Kontrast zu jenem an (ausgedehnten) elektrischen Barrieren, wie es in Abschnitt 2.3 geschildert wurde und wo die Rückstreuung im einlagigen Graphen, bedingt durch dessen Chiralität, grundsätzlich [also nicht nur bei zufälliger Erfüllung einer Resonanzbedingung (2.29)] unterbunden wurde. Wegen der Erhaltung der Helizität der Ladungsträger wurde deren Richtungsumkehr dort nämlich aus Gründen der Zeitumkehrinvarianz vereitelt, die nun aber durch Einbeziehung magnetischer Felder gebrochen ist. Dies kann in gewisser Weise als Reminiszenz an die These angesehen werden, dass ein wirksamer Trägereinschluss letztlich nicht mit elektrischen, sondern nur über magnetische Felder zu machen ist.

Letztere lassen die Rückstreuung zwar zu, diese muss aber, je nach Dispersion, nicht zwingend vorhanden sein. Hierin scheint ein echter Vorteil des eigentlichen (einlagigen) Graphen zu liegen.

Nach diesem Abstecher in die Welt der mit dem Graphen verwandten bzw. mit ihm möglicherweise konkurrierenden Materialien sei der beispielhafte Rundgang durch die Magnetfeldkonfigurationen wenigstens für den Teil zu Ende, dem nur ein verschwindender Nettofluss $\Phi_{ges} = 0$ zukommt. Mit jenen Feldern hingegen, die über einen derartigen, von Null verschiedenen Fluss verfügen, befassen sich die drei nun folgenden Abschnitte. Deren erster sei einer besonders extremen, gewissermaßen auf die Spitze getriebenen Situation gewidmet.

4.4. Ein Potential ohne Feld? Das Flussschlauch-Problem

Auf den ersten Blick könnte man meinen, dass dem bislang (im Abschnitt 4.1 wegen der Unmöglichkeit einer partiellen Integration) verworfenen Potential

$$(4.83) \quad A_\phi = \frac{\alpha_F}{r}$$

gar kein Feld zukäme, scheint doch eben dies aus (4.27) bei ihrer recht oberflächlichen Betrachtung zu folgen. Genannte Formel gilt indessen, da sich sonst ein unbestimmter Ausdruck der Form $\frac{0}{0}$ ergäbe, nicht für $r = 0$, und tatsächlich ergibt sich eine Delta-Funktion für B_z mit α_F als einem Maß für dessen Stärke. Wie aus (4.34) weiter folgt – und dabei genügt es, ein beliebig kleines $R > 0$ als obere Integrationsgrenze anzunehmen –, beträgt der gesamte Fluss

$$(4.84) \quad \Phi_{ges} = 2\pi \cdot \alpha_F ,$$

was sich durch Wiedereinfügen der ansonsten unterdrückten Konstanten $\frac{e}{c}$ und \hbar zu

$$(4.85) \quad \Phi_{ges} = \Phi_0 \cdot \alpha_F$$

umschreiben lässt. Somit stellt sich α_F als die Anzahl elementarer Flussquanten $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/e = 4,13567 \cdot 10^{-15}$ Vsec heraus, die die Schicht bei $r = 0$ durchdringen – eine Situation, die mithin als Flussschlauch oder auch als Solenoid bezeichnet wird, und die hier zunächst untersucht werden soll.

Durch die Kombination der Formeln (4.27) und (4.34), auf die bereits Bezug genommen wurde, zeigt sich überdies, dass, wie vorweggreifend schon hier Erwähnung finden soll, *jedes* im Unendlichen verschwindende Feld (und nur ein solches kann ja einem lokal begrenzten Störer überhaupt zukommen) mit einem von Null verschiedenen Fluss (4.84) *auch* über einen derartigen zu $\frac{1}{r}$ proportionalen Anteil verfügt. Hierbei wird natürlich vorausgesetzt, dass die zurücklaufenden Feldlinien, um sich zu schließen, die Graphenschicht kein zweites Mal und dann in umgekehrter Richtung durchstoßen. Die besagte Schicht wird also, wenn auch zur Vermeidung von Randeffekten als zwar immer noch genügend groß, aber eben nicht mehr als unendlich groß vorausgesetzt; sie ist jedenfalls kleiner als die typische Abmessung der in Rede stehenden, vollständigen Feldkonfiguration. Die angedeutete Verallgemeinerung befreit den hier vorliegenden Abschnitt folglich auch vom etwaigen Verdacht einer rein akademischen Betrachtung, sondern erweist ihn vielmehr als einen notwendig-vorbereitenden Schritt auf dem Wege zur Untersuchung weiterer Konfigurationen, die im Anschluss daran stattfinden soll.

In nichtrelativistischer Sichtweise wurde die besagte Problemstellung bereits im Jahre 1959 von Yakir Aharonov und David Bohm angegangen, die mit ihrer bahnbrechenden Arbeit [78] nichts weniger als die theoretischen Grundlagen jener beiden Effekte schufen, die später nach ihnen benannt werden sollten. Ihre Lösung erfuhr sie dort für den Schrödinger-Fall, also ohne die Verwendung von Spinoren.

Durch Hinzufügung der unteren Spinorkomponente nebst einigen kleineren Anpassungen, die hauptsächlich dazu dienen, Kongruenz zu den vorangehenden Abschnitten zu schaffen, können die Ergebnisse auf den relativistischen Fall, der hier betrachtet werden soll, nahtlos übertragen werden:

Unter Beachtung, dass für $r \neq 0$ stets $B_z = 0$ ist, ergibt sich ausgehend von Gleichung (2.36), die dem Potential (4.83) entsprechend in Polarkoordinaten hingeschrieben wird, mit $E = \pm p$ und bei schon geläufiger Setzung der Konstanten [$\hbar := v_F := \frac{e}{c} := 1$] eine partielle Differentialgleichung, die mit dem Ansatz

$$(4.86) \quad \Psi_A^{(m)}(r, \phi) = \exp(im\phi) \cdot f_m(r)$$

für die obere Komponente der Wellenfunktion leicht lösbar ist. Den Winkelanteil bildet, mit einer beliebigen ganzen Zahl $m \in \mathbb{Z}$, der gängige Exponentialfaktor

$\exp(im\phi)$, während die Radialfunktion $f_m(r)$ durch eine in der Physik wohlbekannte Differentialgleichung festgelegt wird:

$$(4.87) \quad \left[\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + p^2 - \frac{(m + \alpha)^2}{r^2} \right] f_m(r) = 0$$

Als deren Lösungen haben zwar prinzipiell sämtliche Zylinderfunktionen zu gelten, doch kommen hier nur die Besselfunktionen *erster* Gattung in Frage – und auch da nur solche mit einem positivem Index. Bei gleicher Schlussfolgerung hängt aber die dafür zu gebende Begründung entscheidend davon ab, ob dieser Index eine ganze Zahl ist oder etwa nicht. Im ersten Fall ergäbe sich nämlich für $n \in \mathbb{Z}$ wegen $J_{-n}(pr) = (-1)^n \cdot J_n(pr)$ ohnehin keine neue, linear unabhängige Lösung mehr, sodass man schon zu den Besselfunktionen zweiter Gattung, also den Neumann-Funktionen Zuflucht nehmen müsste, die jedoch für $r \mapsto 0$ zu stark divergieren, als dass sie einer sinnvoll-normierbaren Lösung entsprächen. Die bei negativen, nicht-ganzzahligen Indizes im Ursprung auftretende, schwächere Divergenz der Besselfunktionen erster Gattung ist zwar im Sinne ihrer Normierbarkeit durchaus hinnehmbar, doch gilt es demgegenüber zu bedenken, dass das magnetische Feld, wie oben ausgeführt, dort ebenfalls seine Singularität aufweist und damit die Wellenfunktionen aus dem Ursprunge förmlich herausdrängt.

Klassisch-anschaulich kann dies durch den magnetischen Druck beschrieben werden, der sich aus einer ansonsten dort stattfindenden Energieerhöhung ergäbe. Möglich ist natürlich auch eine mehr formal-analytische, quantenmechanische Begründung, bei der das Feld in einem vorübergehend endlichen Bereich $R > 0$ mit anschließendem Grenzübergang betrachtet wird. Auch hier kommt es zu einer Verdrängung, sodass letztlich nur

$$(4.88) \quad f_m(r) = J_{|m+\alpha|}(pr)$$

als Lösung verbleibt.

Da α von nun an selbst als Index (und ebenso häufig auch als Exponent) auftritt, wurde *dessen* Index, wie bereits in Gleichung (4.87) geschehen, selbst wiederum fortgelassen. Eine Verwechslung mit dem ebenso bezeichneten Winkel früherer Abschnitte, der die Ausrichtung eines Dipols angab, kann indessen dadurch doch nicht eintreten, da nunmehr nur noch rotationssymmetrische Beispiele behandelt werden sollen. Neben dieser bloß notationstechnisch erscheinenden Vereinfachung existiert aber ein tiefer liegender, echt physikalisch motivierter Grund dafür, hier eine derartige Unterscheidung vorzunehmen, die indes erst später, in Gleichung (4.92) und vollends durch die Abschnitte 4.5 und 4.6 klar werden wird und damit zusammenhängt, dass durch Wahl eines anderen m in Gleichung (4.86) bzw. (4.87) stets eine Verschiebung der Größe α_F um eine *ganze* Zahl ermöglicht wird.

Mit einem zu (4.86) völlig analogen Ansatz

$$(4.89) \quad \Psi_B^{(m)}(r, \phi) = \pm i \exp(i(m+1)\phi) \cdot g_m(r)$$

für die untere Komponente der Wellenfunktion, der neben dem Energie-Vorzeichen auch noch den bequemen Faktor i enthält und im Exponenten auch die Chiralität bereits explizit berücksichtigt, bestimmt sich deren Radialanteil aus (2.33) bis (2.35) über $g_m(r) = \left[\frac{m+\alpha}{pr} - \partial_{pr} \right] f_m(r)$ zu

$$(4.90) \quad g_m(r) = \delta_m \cdot J_{|m+\alpha|+\delta_m}(pr).$$

Hier ist der zusätzliche Vorzeichenfaktor $\delta_m := 2\Theta_H(m + \alpha) - 1 = \pm 1$ eingeführt worden, der mit dem Energie-Vorzeichen nichts zu tun hat. Er wird über die Heaviside-Sprungfunktion definiert und unterscheidet sich von der Festlegung über $\text{sgn}(m + \alpha)$ nur dadurch, dass sich auf diese Weise für δ_m auch dann der Wert $+1$ ergibt, wenn das Argument verschwindet.

Dies zusammenfassend lautet folglich die spinorielle Lösung

$$(4.91) \quad \Psi_m(r, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} \exp(im\phi) \cdot J_{|m+\alpha|}(pr) \\ \pm i\delta_m \cdot \exp(i(m+1)\phi) \cdot J_{|m+\alpha|+\delta_m}(pr) \end{pmatrix}$$

zu einem bestimmten m , das jedoch (aus \mathbb{Z}) völlig frei gewählt sein mag. Der Theorie linearer Differentialgleichungen zufolge fungieren als Lösungen aber nicht nur diese selbst, sondern auch alle Linearkombinationen

$$(4.92) \quad \Psi(r, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m \cdot \Psi_m(r, \phi),$$

die mit beliebigen komplexen Koeffizienten $c_m \in \mathbb{C}$ aus ihnen gebildet zu werden vermögen. Für die zunächst vielleicht etwas willkürlich anmutende Festlegung

$$(4.93) \quad c_m := (-1)^m \cdot (-i)^{|m+\alpha|} \quad \forall m \in \mathbb{Z}$$

sprechen jedoch zwei gewichtige Gründe:

Zum Einen erkennt man sogleich, dass eine Verschiebung von α um eine ganze Zahl $\mu \in \mathbb{Z}$, also $\alpha \mapsto \alpha - \mu$, außer einem Phasenfaktor

$$(4.94) \quad (-1)^\mu \cdot \exp(i\mu\phi),$$

der sich durch simple Umnummerierung fast von selbst ergibt und bei einem *einzelnen* Streuer ohnehin nicht von Belang ist, mithin an den physikalischen Ergebnissen nichts ändert. Dies gilt insbesondere dann, wenn vermittelt $\mu = \tilde{m} := [\alpha_F]$ (die eckige oder Gaußklammer bezeichnet „das größte Ganze von“) über

$$(4.95) \quad \alpha = \alpha_F - \tilde{m}$$

eine Beschränkung von α auf das Intervall $[0; 1[$ vorgenommen wurde.

Zweitens aber, und das ist von entscheidender Wichtigkeit, erlaubt die soeben getroffene Wahl der Koeffizienten im asymptotischen Verhalten der sich auf diese Weise ergebenden Wellenfunktion (4.92) eine Aufteilung in eine einlaufende und in eine gestreute Welle vorzunehmen, die ganz im Sinne der hier zu behandelnden Streuproblematik liegt, ergibt sich doch, dass in diesem Falle

$$(4.96) \quad \Psi(r, \phi) \mapsto \Psi^\infty(r, \phi) := \Psi^{\text{einl.}}(r, \phi) + \Psi^{\text{Streu}}(r, \phi)$$

mit

$$(4.97) \quad \Psi^{\text{einl.}}(r, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \cdot \exp(-i\pi|\alpha|) \cdot \exp(-i\alpha\phi) \cdot \exp(ipr \cos \phi)$$

und

$$(4.98) \quad \Psi^{\text{Streu}}(r, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \exp(i\phi) \end{pmatrix} \cdot \frac{(\mp 1) \cdot \exp(-i(\tilde{m} + 1/2)\phi)}{\sqrt{-2\pi i pr}} \cdot \frac{\sin(\pi\alpha)}{|\sin(\phi/2)|} \cdot \exp(ipr)$$

für große r wird.

Dass in der einlaufenden Welle (4.97) ihres vorletzten Faktors wegen für $\alpha \notin \mathbb{Z}$ die Phase nicht mehr eindeutig bestimmt ist, mag zwar unschön erscheinen, ist aber unter dem aktuellen Aspekt keineswegs gravierend, denn es braucht, was diese

anbelangt, ja nur ein schmales Bündel betrachtet zu werden, und somit ist jener Teil der Wellenfunktion (mitsamt seiner Phase) lediglich links vom Streuer, äußerstenfalls also für $\phi \in [\frac{\pi}{2}; \frac{3\pi}{2}]$ von Interesse. Die angesprochene Problematik ist bekannt; nachdem sie bereits in [78] ihre erste Erwähnung fand, wurde sie im Anschluss daran des Öfteren wieder aufgegriffen und – vor Allem in [79] – ausführlich diskutiert. Hier möge es genügen zu betonen, dass der besagte Mangel, besser eine Unzulänglichkeit, lediglich in der asymptotischen Abspaltung (4.97) auftritt, nicht hingegen in der eigentlichen Wellenfunktion [(4.92) mit (4.91) und (4.93)] selbst zu finden ist.

Was nun den anderen Teil der Aufspaltung, also die Streuwelle (4.98) anbelangt, so ist natürlich klar, dass eine solche für $\alpha_F = 0$ überhaupt nicht aufzutreten vermag. Erstaunlich ist hingegen, dass dem für jede ganze Zahl $\alpha_F \in \mathbb{Z}$ von Flussquanten ebenfalls so ist – eine Art Resonanzbedingung, auf die noch mehrfach zurückzukommen sein wird.

Aus einem Vergleich mit (4.15) als der allgemeinsten Darstellung der sich in alle Richtungen ausbreitenden Streuwelle liest man (unter allfälliger Umbenennung des Azimutwinkels) sogleich die Streuamplitude

$$(4.99) \quad f_{\frac{1}{r}}(\theta) = \frac{-1 \cdot \exp(-i(\tilde{m} + 1/2)\theta)}{\sqrt{2\pi p}} \cdot \frac{\sin(\pi\alpha)}{|\sin(\theta/2)|}$$

ab. Es soll hier, nicht nur durch den fehlenden Index B, sondern auch mit den unmittelbar folgenden Worten betont werden, dass dies Ergebnis keine Bornsche *Näherung* darstellt, sondern ein ganz und gar exaktes ist, denn zu dessen Herleitung wurde keine Störungsreihe betrachtet, deren Anfang (4.9) hier etwa über (4.10) hätte berechnet werden müssen, sondern lediglich am Ende, der Definition eines Streuvorganges und seiner typischen Messanordnung entsprechend, das asymptotische Verhalten einer exakten Lösung [(4.92) mit (4.93) und (4.91)] für große Entfernungen $pr \gg 1$ ausgewertet wurde.

Für ein α_F , das von vornherein im Intervall $[0; 1[$ liegt, ergibt sich, dass (wie man mit $\tilde{m} = 0$ sofort sieht) der Phasenfaktor genau jener ist, der einlagigem Graphen von Rechts wegen stets zukommt; vergleiche hierzu (4.16) und die Diskussion am Ende des vorigen Abschnittes. Doch auch wenn α_F außerhalb des genannten Bereiches liegt, ergibt sich zusammen mit dem periodischen Vorzeichenwechsel von $\sin(\pi\alpha)$ über die bereits erwähnte Verschiebung (4.95) nur ein Phasenfaktor (4.94), sodass in den physikalischen Eigenschaften nicht bloß das ganzzahlige α selbst, sondern auch dessen Hinzufügung zu einem bereits vorhandenen, gebrochenen, gänzlich ohne Auswirkung bleibt. Umgekehrt kann also α , was den Flussschlauch-Anteil betrifft, stets und o.B.d.A. in diesem Bereich gewählt werden. Davon wird in den beiden nachfolgenden Abschnitten noch Gebrauch gemacht werden.

Auf jeden Fall ergibt sich der differentielle Streuquerschnitt zu

$$(4.100) \quad \frac{d\Lambda}{d\theta} = \frac{1}{2\pi p} \cdot \left[\frac{\sin(\pi\alpha)}{\sin(\theta/2)} \right]^2.$$

Dass dieser für $\theta \mapsto 0$ divergiert, ist allerdings kein Alleinstellungsmerkmal der Quantenmechanik, denn bekanntlich ergibt sich ein solches Verhalten auch bei der klassischen Herleitung der Rutherford-Streuung am Coulomb-Felde eines Atomkerns, wenn Letzterer als punktförmig betrachtet wird.

Der physikalisch wichtigere Transportquerschnitt hingegen konvergiert; er berechnet sich über (4.19) und ergibt sich zu

$$(4.101) \quad \Lambda_{tr} = \frac{2}{p} \cdot \sin^2(\pi\alpha).$$

Seine Zunahme mit kleiner werdendem p ist – auch klassisch gesehen – völlig verständlich, da langsamere Teilchen von einem (hier strukturlosen) Magnetfeld nunmal leichter abzulenken sind.

4.5. Potentiale mit einem $\frac{1}{r}$ -Anteil

Wie hier nochmals ausdrücklich betont werden soll, stellen die im letzten Abschnitt gefundenen Wellenfunktionen (4.91) bzw. (4.92) die *exakten* Lösungen zum Hamilton-Operator

$$(4.102) \quad H_0 = \vec{\sigma} \cdot \left(-i\nabla + \frac{\alpha_F}{r} \cdot \vec{e}_\phi \right)$$

dar und können folglich dazu benutzt werden, um in einer wiederum analog zu den Gleichungen (4.9) und (4.10) durchzuführenden Störungsrechnung Verwendung zu finden. Auf diese Weise ergibt sich dann die Streuung am nunmehr noch verbleibenden Restpotential

$$(4.103) \quad A_\phi^{(R)}(r) = A_\phi(r) - \frac{\alpha_F}{r}$$

mit

$$(4.104) \quad \alpha_F = \lim_{r \rightarrow \infty} (r \cdot A_\phi(r)).$$

Der Index F wurde hier wieder hinzugesetzt, um deutlich zu machen, dass $A_\phi^{(R)}$ vollständig von seinem Flussschlauch-Anteil zu befreien ist; eine etwa vorhandene radiale Komponente A_r bleibt dagegen unverändert. Im Störoperator $H_M^{(R)}$ sind alsdann die entsprechend reduzierten Potentiale zu verwenden, ansonsten wird er völlig analog zu dem früheren [Gleichung (4.7)] aufgebaut.

Da die Lösungen zum ungestörten Operator (4.102), also die Wellenfunktionen [(4.92) mit (4.93) und (4.91)], im Vergleich zu den ebenen Wellen (4.4) des Abschnitts 4.1 von erhöhter Kompliziertheit sind, soll die Berechnung der gesuchten Korrektur in erster Born-Approximation nun in einer formal etwas anderen Weise vonstatten gehen: Die Störwelle

$$(4.105) \quad \Psi^{(1)}(\vec{r}) = - \iint d^2\vec{r}' \cdot G_E(\vec{r}, \vec{r}') \cdot H_M^{(R)}(\vec{r}') \Psi^{(0)}(\vec{r}')$$

folgt aus der niedrigsten Ordnung der Lippmann-Schwinger-Gleichung, und in der zugehörigen Green-Funktion

$$(4.106) \quad G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \int_0^\infty \frac{kdk}{2\pi} \cdot \sum_{m,\pm} \frac{\Psi_{m,\pm}(\vec{r}) \cdot \Psi_{m,\pm}^\dagger(\vec{r}')}{E(k) - (E + i0)}$$

ist über alle Drehimpulse m und über beide Energie-Vorzeichen zu summieren; ein diesbezüglicher Index wurde an die Funktionen (4.91) zusätzlich angebracht. Man beachte auch die Reihenfolge, mit der sie und ihre Adjungierten dort in Erscheinung treten und die allein geeignet ist, aus dem vorgegebenen Spinor $\Psi^{(0)}$ einen neuen zu generieren und diesen dann in eine beliebig andere Richtung weisen zu lassen.

Was die Energien des Nenners anbelangt, so ist $E(k) = k > 0$ und $E = \pm p$. Wie man bereits unschwer auch an der schon durchgeführten Integration über den Azimutwinkel des Wellenzahlvektors \vec{k} erkennt, wurde hierbei natürlich wieder eine vollkommen isotrope Energiedispersion [siehe (2.18)] angenommen.

Leider ist die Auswertung der Summation über m mittels des aus [68] zu entnehmenden Additionstheorems

$$(4.107) \quad \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \exp(im\theta) \cdot J_m(pr) \cdot J_{m+\nu}(pr) = \exp(-i\nu(\theta - \pi)/2) \cdot J_\nu(qr) \quad \forall \nu \in \mathbb{Z}$$

hier nicht möglich, da dieses nur dann gilt, wenn beide in der Summe auftretenden Besselfunktionen stets ganzzahlige Indizes tragen; für diesen Sonderfall aber wird uns (4.107) schon recht bald sehr gute Dienste leisten. Infolgedessen ist zunächst die Integration über k durchzuführen.

Wie dies geschieht, wird in dem Anhang, der zu diesem Abschnitt gehört, geschildert, und zwar der Vollständigkeit und besseren Übersichtlichkeit halber sowohl für den Schrödinger- als auch für den Dirac-Weyl-Fall. Für Letzteren, auf den hier allein fokussiert werden soll, lautet die Asymptotik der gesuchten Green-Funktion

$$(4.108) \quad G_E(\vec{r}, \vec{r}') \mapsto \frac{\pm p}{2} \cdot \frac{\exp(ipr)}{\sqrt{-2\pi i pr}} \cdot \sum_m (-i)^{|m+\alpha|} \exp(im(\phi - \phi')) \left(\begin{array}{c} 1 \\ \pm \exp(i\phi) \end{array} \right) \cdot \dots$$

$$\cdot \left(J_{|m+\alpha|}(pr') \mp i\delta_m \cdot \exp(-i\phi') \cdot J_{|m+\alpha|+\delta_m}(pr') \right).$$

Eingesetzt in (4.105) und mit der Störung $H_M^{(R)}$, wie sie bereits erläutert wurde, ergibt sich schließlich für die Streuung der Wellen ein Ergebnis der Form (4.15), wie es der sich in alle Richtungen ausbreitenden Streuwelle gar nicht anders zukommen kann und aus dem man dann die Streuamplitude

$$f^{(R)}(\theta) = \frac{-i}{2} \sqrt{\frac{p}{2\pi}} \cdot \sum_{m,\mu} \exp(im\theta) \cdot (-1)^\mu (-i)^{|m+\alpha|+|\mu+\alpha|} \cdot \int_{r=0}^{\infty} \int_{\phi=0}^{2\pi} r dr d\phi \cdot \exp(i(\mu - m)\phi) \cdot \dots$$

$$\left[\delta_\mu \cdot (A_r - iA_\phi)^{(R)} \cdot J_{|\mu+\alpha|+\delta_\mu}(pr) \cdot J_{|m+\alpha|}(pr) - \delta_m \cdot (A_r + iA_\phi)^{(R)} \cdot J_{|\mu+\alpha|}(pr) \cdot J_{|m+\alpha|+\delta_m}(pr) \right]$$

in ihrer allgemeinsten Form (allerdings noch ohne den Anteil des Fluss Schlauches) herausliest. Bei der von nun an gemachten Beschränkung auf isotrope Verhältnisse (4.26) lässt sich diese wie folgt zusammenfassen:

$$(4.109) \quad f_{iso}^{(R)}(\theta) = -\sqrt{\frac{p}{2\pi}} \cdot \sum_{\mu} \exp(i\mu\theta) \cdot (-1)^{\mu+|\mu+\alpha|} \cdot \delta_\mu \cdot \int_0^{\infty} 2\pi r dr \cdot A_\phi^{(R)}(r) \cdot J_{|\mu+\alpha|}(pr) \cdot J_{|\mu+\alpha|+\delta_\mu}(pr)$$

Für den Spezialfall $\alpha = 0$ ist, wie hier bemerkt werden soll, eine weitere Vereinfachung leicht möglich und ergibt dann über das Additionstheorem (4.107) wieder die bereits früher (im Abschnitt 4.1) auf anderem Wege hergeleitete Formel (4.16). Damit erweist sich im Übrigen auch die Gleichwertigkeit beider Ansätze (4.12) und (4.105) mit ihren jeweiligen Green-Funktionen (4.13) bzw. (4.106).

Für $\alpha_F \neq 0$ wird von der Verschiebung (4.95) in das Intervall $[0; 1[$ Gebrauch gemacht, was im Folgenden stets vorausgesetzt werde. Dadurch erleichtert sich die Aufspaltung der Summe über μ in (4.109) in zwei Teilsommen, von denen eine noch

einer Umnummerierung unterworfen wird. Über die wie folgt definierten Teilsommen

$$(4.110) \quad S_{A_\phi}(p, \alpha, \theta) := p \cdot \sum_{\mu \geq 0} \exp\left(i\left(\mu + \frac{1}{2}\right)\theta\right) \cdot A_\alpha^\mu$$

mit den Elementen

$$(4.111) \quad A_\alpha^\mu := 2\pi \cdot \int_0^\infty A_\phi^{(R)}(r) \cdot J_{\mu+\alpha}(pr) \cdot J_{\mu+\alpha+1}(pr) \cdot r dr$$

lässt sich die Streuamplitude alsdann in der Form

$$(4.112) \quad f_{iso}^{(R)}(\theta) = \frac{-1 \cdot \exp(-i\theta/2)}{\sqrt{2\pi p}} \cdot \exp(-i\pi|\alpha|) \cdot [S_{A_\phi}(p, \alpha, \theta) - S_{A_\phi}(p, -\alpha, -\theta)]$$

darstellen. Dabei können die A_α^μ , die selbst nicht von θ abhängen, als Entwicklungskoeffizienten einer komplexen Fourier-Reihe betrachtet werden, die dem Potential entsprechend zu berechnen und für Selbiges charakteristisch ist.

So ist es beispielsweise möglich, falls $\alpha = 0$ ist – zwei Beispiele anderer Art finden sich dazu im nächsten Abschnitt – und die Verhältnisse natürlich weiterhin isotrop, die bereits gefundene Größe (4.25) mittels (4.107) mit $\nu = 1$ in

$$(4.113) \quad \tilde{A}(\theta) = \exp(i\theta/2) \cdot \sum_{\mu \in \mathbb{Z}} \exp(i\mu\theta) \cdot A_{\alpha=0}^\mu$$

umzuschreiben, woraus sich der Transportquerschnitt sodann zu

$$(4.114) \quad \Lambda_{tr}^{\alpha=0} = p \cdot \sum_{\mu \in \mathbb{Z}} A_0^\mu \left(A_0^\mu - A_0^{\mu+1}\right) \equiv 2p \cdot \sum_{\mu \geq 0} A_0^\mu \left(A_0^\mu - A_0^{\mu+1}\right) + p \cdot (A_0^0)^2$$

ergibt. Die letzte Umformung geschah unter Beachtung von $A_0^{-\mu} = -A_0^{\mu-1}$ und wird später von Nutzen sein.

Indessen gilt es, für ein (gegebenenfalls entsprechend verschobenes) $\alpha \neq 0$ zu beachten, dass außer der hier in erster Näherung für das Restpotential (4.103) berechneten Streuwelle (4.105) auch die exakte Lösung [(4.92) mit (4.93) und (4.91)] bzw. deren Asymptotik (4.96) einen am Flussschlauch (4.83) selbst gestreuten Anteil (4.98) aufweist. Fügt man die beiden Amplituden [(4.112) und (4.99)], die den genannten Anteilen zukommen, zusammen, so erhält man – bis auf einen unwesentlichen Phasenfaktor der Form (4.94), siehe oben – die gesamte Streuamplitude

$$(4.115) \quad f_{iso}^{(ges)}(\theta) = f_{iso}^{(R)}(\theta) + f_{\frac{1}{r}}(\theta) = \frac{-1 \cdot \exp(-i\theta/2)}{\sqrt{2\pi p}} \cdot \dots \cdot \left\{ \exp(-i\pi|\alpha|) \cdot [S_{A_\phi}(p, \alpha, \theta) - S_{A_\phi}(p, -\alpha, -\theta)] + \frac{\sin(\pi\alpha)}{|\sin(\theta/2)|} \right\}.$$

Der Auffassung vom schwächsten Gliede einer Kette zufolge ist dies, obwohl der letzte Term hier ein exakter ist, in Summe doch „nur“ die erste Bornsche Näherung.

Aus ihr berechnet sich über eine Betragsquadratbildung der (für $\theta \mapsto 0$ divergierende) differentielle Streuquerschnitt

$$(4.116) \quad \frac{d\Lambda}{d\theta} = \frac{1}{2\pi p} \cdot \left| \exp(-i\pi|\alpha|) \cdot [S_{A_\phi}(p, \alpha, \theta) - S_{A_\phi}(p, -\alpha, -\theta)] + \frac{\sin(\pi\alpha)}{|\sin(\theta/2)|} \right|^2$$

und über (4.19) durch Integration der Transportquerschnitt

$$(4.117) \quad \Lambda_{tr} = p \cdot \left[\sum_{\mu \geq 0} \left\{ A_{\alpha}^{\mu} (A_{\alpha}^{\mu} - A_{\alpha}^{\mu+1}) + A_{-\alpha}^{\mu} (A_{-\alpha}^{\mu} - A_{-\alpha}^{\mu+1}) \right\} + A_{\alpha}^0 A_{-\alpha}^0 \right] + \dots$$

$$+ 2 \cdot (A_{\alpha}^0 + A_{-\alpha}^0) \cdot \sin^2(\pi\alpha) + \frac{2}{p} \cdot \sin^2(\pi\alpha).$$

Selbstverständlich wird für fehlendes Restpotential $A_{\phi}^{(R)}(r) \equiv 0$ daraus wieder (4.101). Andererseits ergibt sich auch für $\alpha = 0$ ebenfalls ein bereits früher erhaltenes Ergebnis, nämlich (4.114). Jedoch verändern sich dessen Glieder für $\alpha \neq 0$, und außerdem tritt der vorletzte Summand als Interferenzterm hinzu. Dieser beschreibt die gleichzeitige, kombinierte Streuung an Schlauch *und* Restpotential.

Diesen Abschnitt beschließend soll nicht unerwähnt bleiben, dass es sogar *zwei* Möglichkeiten gibt, den Wert Null für α zu erzielen, obwohl α_F selbst davon verschieden ist: Zum Einen wird bei der allmählich-stetigen Erhöhung des Flusses (4.84) [beispielsweise über die Feldstärke, das heißt Flussdichte; oder aber die von dieser erfüllte Fläche] in den Streuquerschnitten [z.B. (4.101) und gemäß (4.95) auch in (4.117)] ganz offensichtlich eine periodische Oszillation eintreten, eben der schon vorstehend erwähnte Resonanzeffekt. Zum Anderen jedoch kann eine Kompensation oder wenigstens Neutralisation des Fluss-Anteils bei beliebiger Stärke des Restpotentials (die im Allgemeinen *auch* über α_F bestimmt wird) auch durch einen zusätzlichen (äußeren) Gegen-Fluss vorgenommen werden. Dabei braucht diese keineswegs vollständig zu sein; vielmehr genügt es vollauf, durch das Extra-Solenoid den nicht-ganzzahligen Anteil zum Verschwinden zu bringen – gegebenenfalls durch eine entsprechende *Erhöhung* auf eine ganze Zahl.

Doch ganz gleichgültig, welche der soeben aufgezählten Möglichkeiten zur Realisierung der Bedingung $\alpha = 0$ nun letztlich herangezogen wurde, ist in sämtlichen Fällen eine geschlossene Berechnung, die dann wieder über die Formel (4.25) gangbar wird, selbstverständlich einfacher und deshalb vorzuziehen. Davon wird bei den beiden Beispielen, die im folgenden Abschnitt noch zu besprechen sein werden, bei passender Gelegenheit dann auch Gebrauch gemacht.

4.6. Zwei Beispiele

Im Gegensatz zu der ihm ansonsten nicht unähnlichen Feldverteilung (4.33) weist das reine Gaußprofil

$$(4.118) \quad B_z(r) = B_0 \cdot \exp(-r^2/R^2),$$

das hier als Erstes untersucht werden soll, keinen Polaritätswechsel auf. Damit verfügt es über einen Nettofluss (4.84) mit

$$(4.119) \quad \alpha_F = \frac{1}{2} B_0 R^2,$$

und sein Vektorpotential ist

$$(4.120) \quad A_{\phi}(r) = \frac{\alpha_F}{r} \cdot [1 - \exp(-r^2/R^2)].$$

Aus dem ganz offensichtlichen Restpotential

$$(4.121) \quad A_{\phi}^{(R)}(r) = -\frac{\alpha_F}{r} \cdot \exp(-r^2/R^2)$$

ergeben sich die Elemente

(4.122)

$$A_\alpha^\mu = -\frac{2\pi\alpha_F}{p} \cdot \frac{(pR/2)^{2(\mu+\alpha+1)}}{\Gamma(\mu+\alpha+2)} \cdot {}_2F_2\left(\mu+\alpha+1, \mu+\alpha+\frac{3}{2}; \mu+\alpha+2, 2(\mu+\alpha+1); -p^2R^2\right)$$

zur Berechnung des Transportquerschnittes (4.117). Man beachte den Unterschied zwischen α_F , das hier *nur* noch die Stärke des Restpotentials bezeichnet und damit unverändert bleiben muss, während demgegenüber α eine Verschiebung in das Intervall $[0; 1]$ erleidet.

Für ein dadurch verschwindendes (oder auch kompensiertes, siehe oben) α führt

$$(4.123) \quad \tilde{A}(\theta) = -2\pi i \cdot \frac{\alpha_F}{q} \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{1}{4}q^2R^2\right)\right]$$

über (4.16) und (4.19) zu

(4.124)

$$\Lambda_{tr}^{\alpha=0}(p) = \frac{(2\pi\alpha_F)^2}{2p} \cdot \left[1 - 2 \exp\left(-\frac{1}{2}p^2R^2\right) \cdot I_0\left(\frac{1}{2}p^2R^2\right) + \exp(-p^2R^2) \cdot I_0(p^2R^2)\right],$$

worin I_0 die modifizierte Besselfunktion erster Gattung und von nullter Ordnung bezeichnet. Diese Formel mag als Stützpunkt und Kontrolle der numerischen Berechnung von Nutzen sein; siehe Abb. 4.6, linkes Teilbild.

Allerdings soll eine solche nicht nur an diesem, sondern vor Allem auch an dem nächsten, praktisch leichter zu realisierenden und daher wichtigeren Beispiel einer homogen magnetisierten Kreis-Scheibe vom Radius R durchgeführt werden. Die Feldverteilung

$$(4.125) \quad B_z(r) = \begin{cases} B_0 > 0 & \text{für } r \leq R \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

besitzt ersichtlich denselben Nettofluss wie jene des vorherigen Beispiels. Somit gilt also wieder (4.119), und aus dem Restpotential

$$(4.126) \quad A_\phi^{(R)}(r) = -\frac{\alpha_F}{r} \cdot \frac{R^2 - r^2}{R^2} \cdot \Theta_H(R - r)$$

folgen die Elemente

$$(4.127) \quad A_\alpha^\mu = -\frac{2\pi\alpha_F}{p} \cdot \frac{(pR/2)^{2(\mu+\alpha+1)}}{\Gamma(\mu+\alpha+2) \cdot \Gamma(\mu+\alpha+3)} \cdot \dots \cdot {}_2F_3\left(\mu+\alpha+1, \mu+\alpha+\frac{3}{2}; \mu+\alpha+2, \mu+\alpha+3, 2(\mu+\alpha+1); -p^2R^2\right).$$

Für den Sonderfall $\alpha = 0$ ergibt die Berechnung über

$$(4.128) \quad \tilde{A}(\theta) = -2\pi i \cdot \frac{\alpha_F}{q} \cdot (J_0(qR) + J_2(qR) - 1)$$

den zwar etwas kompliziert anmutenden, auf die Reihe (4.117) bezogen aber vergleichsweise harmlosen Ausdruck

(4.129)

$$\Lambda_{tr}^{\alpha=0}(p) = \frac{(2\pi\alpha_F)^2}{2p} \cdot \left[1 - 2 \cdot \{J_0^2(pR) + J_1^2(pR)\} + {}_2F_3\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}; 1, 2, 3; -4p^2R^2\right)\right].$$

Auch diese Ergebnisse finden ihre Darstellung in der bereits genannten Abb. 4.6.

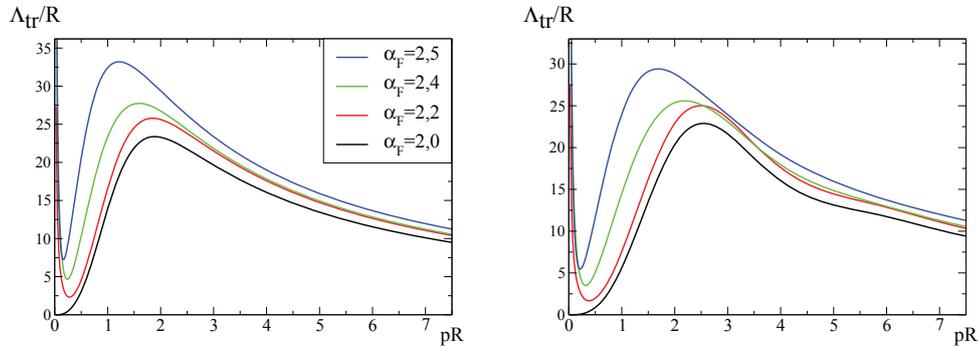


ABBILDUNG 4.6. Entwicklung des Transportquerschnittes bis zur maximalen Streuwirkung des Flussschlauchanteils bei $\alpha_F = 2,5$ ausgehend von ihrem völligen Fehlen bei $\alpha_F = 2,0$, gezeigt für das Gaußprofil (4.118) [linkes Teilbild] als auch für die abrupt begrenzte Scheibe (4.125) [rechts]. Unterschiede und Gemeinsamkeiten werden im Text erläutert. Für $\alpha = 0$ ist die Übereinstimmung der nur in diesem Falle gültigen Formeln (4.124) bzw. (4.129) mit den Ergebnissen des allgemeinen Ausdrucks (4.117) in beiden Fällen eine überragende.

Instruktiv ist es, die Übereinstimmungen, aber auch Unterschiede zu betrachten, die sich in den beiden Teilbildern dort auftun: Bei fehlendem Flussschlauchanteil, also für $\alpha = 0$, ergibt sich ebenso wie bei dem durch seine flächenhafte Ausdehnung und die Rotationssymmetrie mit den beiden hier betrachteten Fällen verwandten Potential (4.32) für $pR \ll 1$ wieder eine Proportionalität zu p^3 – diese ist auch aus (4.124) und (4.129) herauszulesen – im Transportquerschnitt mit anschließendem Maximum und nachfolgendem Abfall. Für $\alpha \neq 0$ entwickelt sich gemäß dem Anteil (4.101) in (4.117) die Streuung am Flussschlauch, die für $p \mapsto 0$ divergiert. Jedoch wird auch die Streuung am jeweiligen Restpotential (4.121) bzw. (4.126) durch den Vorfaktor α_F immer stärker. Außerdem verändert sich Letzteres dergestalt, dass sein Maximum eben nicht nur stärker ausfällt, sondern auch bereits bei stets geringeren Werten des Parameters pR eintritt, es also, bildlich gesprochen, zu dem durch den Flussschlauchanteil bedingten Pol bei $p = 0$ herübergezogen wird. Zusätzlich entwickelt und vergrößert sich im Zwischenbereich auch noch der Interferenzterm.

Was nun die Lage des relativen Maximums anbelangt, so ergibt sich aus einem Vergleich der Felder (4.118) und (4.125), dass, während das Feld im zweiten Falle bei $r = R$ abrupt endet, dies bei der zuerst genannten Konfiguration nicht der Fall ist. Zumindest effektiv gesehen besitzt diese somit ein größeres R . (Wie sich ein solches R_{eff} zweckmäßig definieren ließe, braucht hier nicht erörtert zu werden.) Aufgetragen über dasselbe R jedoch wird der Kurvenverlauf im ersten Fall entsprechend zusammengestaucht und das Maximum demgemäß schon früher erreicht: für $\alpha_F = 2,0$ bereits bei $pR = 1,89$ statt bei $pR = 2,54$.

Beschränkt man den Vergleich auf diesen Fall, bei dem $\alpha = 0$ ist, so kann auch das Feld (4.33) in diesen miteinbezogen werden. Durch den Faktor r im Potential (4.32) [bei (4.126) versagt das nämliche Argument durch die Heaviside'sche Sprungfunktion] ist das effektive R nochmals etwas größer, sodass nunmehr $pR \approx 1$ die Lage des Maximums im Transportquerschnitt bestimmt; siehe Abb. 4.2.

Als ein weiterer, wenn auch nicht sogleich augenfälliger Unterschied in den Abb. 4.6 ist zu vermerken, dass der Abfall nach dem Maximum im linken Teilbilde glatt verläuft, während rechts noch eine Struktur enthalten ist. Auch diese erklärt sich durch die abrupte Feldänderung bei $r = R$: Das einfallende Teilchen vermag nämlich, wenn seine de-Broglie-Wellenlänge λ_{dB} genügend klein ist (praktisch etwa ab $pR \gtrsim 4$), die mit (4.125) verbundene Kante abzutasten; auf diese Fourier-Aspekte wurde ja bereits in Abschnitt 4.1 hingewiesen.

Möglicherweise erst auf den zweiten Blick enthüllt sich, dass jene Struktur nur in den Fällen deutlich ausgeprägt ist, in denen die Streuung am Flussschlauch-Anteil entweder gar nicht vorhanden ($\alpha_F = 2, 0$) oder aber eine nur geringe ($\alpha_F = 2, 2$) ist. Nähert sich Letztere (mit $\alpha_F = 2, 4$) hingegen dem Maximum oder erreicht es (bei $\alpha_F = 2, 5$) sogar, so verliert die besagte Struktur mehr und mehr von ihrer Ausprägung; es ist gewissermaßen so, als ob der Flussschlauch-Anteil, indem er nach außen hinausgreift, die Wogen zu glätten versuchte. Denn selbst strukturlos und damit bar jeder Längenskala reicht sein Potential (4.83), wenn es denn überhaupt [siehe (4.101)] zu einer Wirkung gelangt, ja beliebig weit. Dies erweist die Realität von α_F und seiner Periodizität, den dieser Anteil auch in Feldverteilungen hat, die eine Singularität von der Art, wie sie in Abschnitt 4.4 zunächst vorausgesetzt wurde, gar nicht aufweisen. In diesem Zusammenhang bedarf es wohl keiner besonderen Erwähnung mehr, dass es sich bei der in Rede stehenden Struktur des Ausläufers nicht um eine direkte Folge des Anteils (4.101) in (4.117) handelt, denn dieser ist zu $\frac{1}{p}$ proportional und deshalb bei $pR \gtrsim 4$ längst abgeklungen.

4.7. Rückschauender Vergleich, Voraussetzungen und Folgerungen

Im vorliegenden Kapitel, das mit diesem Abschnitt seinen Abschluss finden soll, wurden verschiedene Streuer untersucht. Dabei traten unterschiedliche Abhängigkeiten vom Impuls p des einlaufenden Teilchens in den Wirkungsquerschnitten zutage, und zwar zumindest bei kleinen Werten (also für $pR \ll 1$ bzw. $hp \ll 1$) desselben die Folgenden, die hier noch einmal zusammengestellt sein mögen: Bei den kreisförmigen Anordnungen des ersten Beispiels in Abschnitt 4.2 und, lässt man einmal für den Fall, dass $\alpha = 0$ ist, die Wirkung des Flussschlauches außer Betracht, dann auch in den beiden letzten Beispielen ergaben sich Proportionalitäten zu p^3 , bei den Dipolen (in verschiedener Orientierung) zu p selbst, und beim Fluss bzw. Flussschlauchanteil waren die Wirkungsquerschnitte proportional zu $\frac{1}{p}$.

Letzteres – übrigens ein exaktes Ergebnis und keine Näherung – korrespondiert mit der klassischen Vorstellung von der Ablenkung in einem konstantem Felde, als dessen Verdichtung für $R \mapsto 0$ man den Schlauch ja anzusehen vermag. Das Kräftegleichgewicht zwischen Lorentz- und Zentrifugalkraft liefert dann mit dem Bahnradius r für die Krümmung $\frac{1}{r} = \frac{eB}{mv} \sim \frac{1}{p}$.

Doch anders als bei einem klassischen Teilchen erfolgt die Ablenkung hier nicht in eine bestimmte Richtung, also je nach Stoßparameter [das heißt dem Abstand, in dem das einfallende Teilchen, ohne eine Wechselwirkung zu erleiden, am Zentrum

des Streuers vorbeilief] unter einem bestimmten Winkel θ – ja, sie hängt nicht einmal von der Polarität des streuenden Feldes ab. Denn alle Querschnitte, seien sie nun integraler oder eben vor Allem auch differentieller Natur, hängen vom *Quadrat* der Feldstärke B_0 oder des Dipolmomentes m_i ab, und auch beim Flussschlauch ist das Vorzeichen von α ohne Belang [siehe (4.100) und (4.101)]. Anders als in Kapitel 3 muss hier unbedingt dem Wellencharakter des Inzidenzteilchens Beachtung geschenkt werden – aus quantenmechanischer Sicht gibt es keinen Stoßparameter. In Abschnitt 3.7 des letzten Kapitels war dies ohne Bedeutung, da die Hindernisse dort nur in Form (eindimensional) unendlich ausgedehnter Grenzen auftraten. Diese ließen die Breite des Wellenpaketes belanglos erscheinen, denn wenn überall dasselbe passiert, ist Letztere zu vernachlässigen. Hier hingegen ist beispielsweise nicht entscheidbar, ob ein Teilchen etwa rechts am Streuer vorbeiläuft und dabei (dadurch) nach links abgelenkt wird, oder ob es gleich dorthineilt.

Aus dem soeben Gesagten ergibt sich, dass, wie es auch tatsächlich der Fall war, in allen der hier als Streuer betrachteten Fälle mit Ausnahme des parallelen Dipols (und auch dort immerhin für $\alpha = 0^\circ$ und 90°) stets eine Symmetrie $\pm\theta$ der differentiellen Streuquerschnitte vorgelegen haben musste – darunter auch solche Streuer, die die genannte Symmetrie zwar nicht schon kraft ihrer eigenen Geometrie oder durch ihre Ausrichtung zum Strahle zu brechen vermochten, wohl aber durch ihre Polarität, insbesondere also der parallele Dipol mit $\alpha = 0^\circ$ ebenso wie, durch die Polung des Feldes, das Potential (4.32) und natürlich der Fluss (4.83) mit seinen Erweiterungen (4.118) und (4.125).

Was passiert nun bei einer Umpolung der gerade genannten Felder, zu denen gegebenenfalls auch noch der transversale Dipol (4.39) zu rechnen wäre?

Es ist anschaulich unmittelbar evident, dass gleichbedeutend mit dem Übergange $B_0 \mapsto -B_0$ oder $\alpha_F \mapsto -\alpha_F$ auch die Graphenschicht selbst herumgedreht werden könnte, und zwar, damit sich sonst nichts ändert, bei einer durch die x-Achse vorgegebenen Einstrahlrichtung um 180° und um eben diese. Die physikalisch messbaren Ergebnisse müssen dann genau die gleichen sein, wie man zum Beispiel leicht für alle von dieser Formel erfassten Fälle aus dem gemeinsamen Vorzeichenwechsel von α und θ in (4.116) erkennt.

Für die Wellenfunktionen selbst hingegen kann und wird dies anders sein, denn die eingebaute Drehung, die Chiralität des Graphen, wirkt sich nun, bei dessen veränderter Lage, in entgegengesetztem Sinne aus – zumindest dann, wenn man die Betrachtung auf nur einen der beiden K -Punkte beschränkt. Anders als bei der Inversion (3.7) in Abschnitt 3.1 werden nämlich nun, wie Abb. 2.1 unschwer zu entnehmen ist, lediglich die beiden K -Punkte miteinander vertauscht, während die Atome A und B auf den ihnen angestammten Plätzen verbleiben. Auf die Wellenfunktionen (3.3) wirkt also, da der echte (physikalische) Spin im hier vorliegenden Kapitel keine Erfassung fand – vergleiche dazu die in der Tabelle 2.1 aufgeführten Größen – demnach nur die Matrix τ_x . Ein Faktor i , der die Spinoreigenschaften bei der Drehung berücksichtigt, kann eingeschoben werden, muss es aber nicht, da die Wellenfunktionen für die Punkte K und K' , zwischen denen ein (beispielsweise durch Streuung bewirkter) Übergang ohnehin ausgeschlossen wurde, lediglich eine voneinander getrennte Betrachtung erfuhren. Das heißt im Ergebnis: die hier für K berechneten Wellenfunktionen, etwa (4.15), gelten dann für den Punkt K' und umgekehrt.

Den obigen Gedanken weiterverfolgend und in Kombination mit der Verschiebung (4.95) gesehen, der die Größe α um ganzzahlige Werte, insbesondere um den Wert 1, unterworfen werden kann, gelangt man zur Äquivalenz der Ergebnisse für den Flussschlauch bei der Ersetzung

$$(4.130) \quad \alpha \mapsto -\alpha \triangleq 1 - \alpha .$$

Unter Beachtung der Tatsache, dass α_F selbst, ohne dass es verschoben werden könnte, auch die Stärke eines etwaigen Restpotentials angibt, lässt sich die Symmetrie (4.130) auch auf jene Beispiele anwenden, die in Abb. 4.6 ihre Darstellung fanden. Setzt man die dort begonnene Reihe nämlich in Gedanken mit den Werten $\alpha_F = 2, 6$, $\alpha_F = 2, 8$ und $\alpha_F = 3, 0$ fort, so kommt durch sie nichts qualitativ Neues mehr hinzu: Zwar wächst, wie bereits erwähnt dieses Faktors wegen, das relative Maximum in seiner Höhe weiter an, verschiebt sich dabei aber jetzt nach rechts, um wieder zu jenen Werten pR auf der Abszissenachse zurückzufinden, die es schon vorher bei $\alpha_F = 2, 4$, $\alpha_F = 2, 2$ und $\alpha_F = 2, 0$ innehatte. Hierbei verschlechtert sich allerdings die numerische Konvergenz.

Selbstverständlich gehört zu einer jeden Näherung, und eine solche stellen die in den Abschnitten 4.1, 4.3 und 4.5 in erster Born-Approximation hergeleiteten Streuamplituden und -querschnitte fraglos dar, auch eine Angabe darüber, wann ihre Anwendung statthaft ist. Wenigstens im Nachhinein und bevor dieses Kapitel endgültig abgeschlossen wird, sollen hier noch die Voraussetzungen, unter denen die benutzte Störungstheorie Gültigkeit besitzt, dargelegt und an den vorliegenden Beispielen erörtert werden.

Will man der in (4.9) mit $\Psi^{(1)}$ abgebrochenen Reihe zwecks Steigerung ihrer Genauigkeit ein weiteres Glied $\Psi^{(2)}$ hinzufügen, so ist dieses analog zu (4.12) zu berechnen, nur dass jetzt alle Operatoren, die dort auf $\Psi^{(0)}$ einwirken, je *zwei* Mal zur Anwendung kommen – der Abwechslung halber unter Beteiligung einer weiteren Ortskoordinate \vec{r}'' , über die dann auch zu integrieren ist. Als wichtige Bedingung dafür, dass $\Psi^{(2)}$ und damit erst recht auch alle weiteren Glieder $\Psi^{(n>2)}$ gegen $\Psi^{(1)}$ von vernachlässigbarer Kleinheit sind, ergibt sich

$$(4.131) \quad p\tilde{A}(\theta) \ll 1$$

zumindest für $pR \lesssim 1$. Denn der unterschiedlichen Asymptotik der Hankel-Funktion $H_0^{(1)}$ für kleine bzw. große Argumente geschuldet ist für Letztere, also $pR \gg 1$, die rechte Seite der Ungleichung durch \sqrt{pR} zu ersetzen. Dabei bezeichnet R die typische Ausdehnung des streuenden Potentials und somit neben der bereits bisher, etwa in (4.32) so benannten Größe selbst, beispielsweise auch die Höhe h der Dipole. Durch Quadratur und unter allfälliger Beachtung der gerade aufgezeigten Fallunterscheidung folgt hieraus sogleich

$$(4.132) \quad \begin{aligned} p\Lambda_i \ll 1 & \quad \text{für} \quad pR \lesssim 1 \\ & \quad \text{bzw.} \\ \Lambda_i \ll R & \quad \text{für} \quad pR \gg 1 . \end{aligned}$$

Beim zuerst genannten Beispiel bleibt Letztere zwar noch ohne nennenswerte Konsequenzen: die Unterschiede – es handelt sich lediglich um leicht veränderte Potenzen bei pR – sind allenfalls von gradueller, jedoch nicht von prinzipieller Art, und in der nachfolgenden Darstellung wird zunächst nicht weiter auf sie eingegangen. Beim Dipol ist dies jedoch anders.

Mit Λ_i ist zunächst und eigentlich der differentielle Querschnitt (4.17) gemeint; aus Bequemlichkeits- oder Zweckmäßigkeitsgründen – vor Allem, um bei der Abschätzung die sonst noch vorhandene Winkelabhängigkeit zu eliminieren – kann jedoch stattdessen auch von einem der beiden integrierten Querschnitte Gebrauch gemacht werden.

Die genannte Bedingung soll nun auf die Beispiele des Abschnitts 4.2 Anwendung finden; bei Aufbringung der felderzeugenden Gebilde auf 2LG [siehe Abschnitt 4.3] ergeben sich genau dieselben Folgerungen.

Im ersten Beispiel mit dem Potential (4.32) lautet die Bedingung, mit der man immer auf der sicheren Seite liegt,

$$(4.133) \quad \pi R^2 B_0 \cdot (pR)^2 \ll 1,$$

und welche auch stets erfüllbar ist: entweder durch genügend kleine Werte des Parameters pR oder aber für genügend schwache Flüsse, die sich hier, innerhalb und außerhalb von R kompensieren und jeweils den e-ten Teil von $\pi R^2 B_0$ betragen. Um übrigens die Flussdichte B_0 in der SI-Einheit Tesla einsetzen zu können, ist hier (und anderen Orts) die Ersetzung $B_0 \mapsto \frac{e}{h} \cdot B_0$ vorzunehmen. So ergibt sich beispielsweise, wenn der gesamte in Abb. 4.2 (oder Abb. 4.4) gezeigte Bereich korrekte und damit (fast) exakt gültige Resultate darstellen soll, für das bereits recht hohe, weil experimentell auf so kleinem Raume keineswegs leicht zu realisierende Feld mit einer Flussdichte von $B_0 = 20$ mT die Forderung, dass $R \ll 20$ nm sein sollte – eine Bedingung, die durchaus zu erfüllen ist. Weniger rigorose Abschätzungen, die entweder auf das Maximum des Transportquerschnittes [1. Fall in (4.132)] oder auf den Grenzwert des totalen Querschnittes [2. Fall dortselbst] Bezug nehmen, liefern für die obere Vergleichsgrenze deutlich höhere Werte von rund 250 nm.

Was nun die Dipole anbetrifft, so ist es kaum möglich, die bei ihnen zum Zwecke der Gültigkeit der ersten Born'schen Näherung zu erfüllenden Bedingungen *nicht* einzuhalten. Denn wie man zunächst, und zwar am einfachsten beim transversalen Dipol, zu erkennen vermag, ist hier

$$(4.134) \quad 2\pi m_i \cdot p \ll 1$$

zu fordern; in wengleich weniger strenger Form oder doch als Grenzfall folgt dies, von den differentiellen Querschnitten ausgehend, ebenso für den perpendicularen wie auch für den parallelen Dipol. Mit $h > 0$ gilt für die beiden Letztgenannten jedoch noch eine weitere Bedingung, die sich – winkelunabhängig – aus den integralen Querschnitten erschließt. Je nachdem, ob man dazu (analog dem ersten Beispiel) den totalen oder den Transportquerschnitt heranzieht – bei der Fallunterscheidung und in den Formeln (4.132) ist dort „ h “ statt „ R “ zu lesen –, ergibt sich $2,5m_i \ll h$ bzw.

$$(4.135) \quad m_i \ll h .$$

Für Einzelatome resp. -moleküle, deren magnetisches Moment sich in der Größenordnung eines Bohr'schen Magnetons bewegt,

$$(4.136) \quad m_i \sim 1\mu_B = 9,27401 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2 \triangleq 1,41 \cdot 10^{-15} \text{ m}$$

(zur Umrechnung ist hier nicht nur mit dem Faktor $\frac{e}{h}$, sondern auch noch mit der durch 4π dividierten magnetischen Feldkonstante $\frac{\mu_0}{4\pi} = 10^{-7} \frac{\text{Vs}}{\text{Am}}$ zu multiplizieren) ist besagte Bedingung ersichtlich jenseits jeder praktischen Relevanz. Gleiches gilt auch für die vorige Bedingung (4.134), verlangt doch Selbige bloß, dass $p \ll 74$ keV

einzuhalten ist, was aber angesichts (2.19) mit $t \approx 3\text{eV}$ keinerlei weitere Einschränkung mehr bedeutet. Bei Clustern oder – besser noch – nadelförmigen Whiskern mag dies anders aussehen; jedoch sind selbst für $m_i = 1000 \cdot \mu_B$ immer noch beide Bedingungen auf das Hervorragendste erfüllt.

Deutlich schwieriger dagegen wird die Sachlage bei den Potentialen mit einem $\frac{1}{r}$ -Anteil. Keineswegs liegt das an dem auch in (4.116) aufscheinenden und für $\theta \mapsto 0$ (ebenso wie auch für $p \mapsto 0$) divergierenden Anteil (4.100) für die Streuung am Flussschlauche selbst, da es sich bei diesem, wie gesagt, um ein exaktes Resultat handelt. Um besagten Anteil, sofern er für $\alpha_F \notin \mathbb{Z}$ vorhanden ist, aus der zu bestimmenden Bedingung für die Näherung tunlichst auszublenden, ist also lediglich noch das jeweilig vorhandene Restpotential in Betracht zu ziehen.

Alternativ dazu kann man, um seinen Einfluss wenigstens nicht allzu stark zum Tragen kommen zu lassen, auch die Transportquerschnitte betrachten; dann gilt vergrößernd wieder (4.132) mit $\Lambda_i = \Lambda_{tr}$, welche aber in Abb. 4.6 (auch unter geflissentlicher Außerachtlassung des vom Flussschlauch dominierten Bereichs $pR \lesssim 0,5$) nicht erfüllt ist. Hätten dort statt der tatsächlich benutzten α_F -Werte die entsprechenden, um jeweils zwei Einheiten verminderten Größen Verwendung gefunden, so sähe die Sache ganz anders aus: Um den Faktor α_F^2 herunterskaliert wäre die Streuung am Restpotential für $\alpha_F = 0,2$ und $\alpha_F = 0,4$ genügend klein gewesen, wobei der letztgenannte Wert bereits als Grenze anzusehen ist, sodass $\alpha_F = 0,5$ zwar noch qualitativ richtige, in ihrer Genauigkeit aber bereits zweifelhafte Resultate erbrächte. (Für $\alpha_F = 0$ ergäbe sich selbstredend überhaupt keine Streuung.)

Der ersten Möglichkeit folgend, die ein Wenig genauer ist, ergibt sich hingegen, dass die Elemente (4.111) die Bedingung $pA_\alpha^\mu \ll 1$ für $\alpha = \pm[\alpha_F]$ und alle $\mu \in \mathbb{N}_0$ erfüllen müssen. Wie man (4.122) bzw. (4.127) entnimmt, heißt das, dass in den beiden Beispielen, die der Abb. 4.6 zu Grunde liegen, entweder $pR \ll 1$ oder aber $\alpha_F \ll 1$ sein muss. Die genannte Abbildung ist also auch von diesem Standpunkt aus, und zwar in derselben Differenzierung wie vorhin, mit gewissen Vorbehalten zu genießen. Obwohl jedoch die Kurven ab $pR \gtrsim 1$ für beide Parametersätze grundsätzlich, das heißt bis auf den Maßstab, im Prinzip gleich aussehen, war es mir neben dem Fall eines ganzzahligen $\alpha_F \neq 0$ auch darum zu tun, den bei etwa $pR \sim 0,5$ einsetzenden Übergang von der Streuung am Flussschlauch zu jener am Restpotential etwas deutlicher hervortreten zu lassen.

Ergänzend soll hier schließlich auch noch eine Abschätzung der Widerstandszunahme vorgenommen werden, die, durch die Streuer bedingt, unter den soeben dargelegten Bedingungen der Störungstheorie zu erwarten ist. Bekanntlich gilt für die spezifische Leitfähigkeit σ eines Systems in zwei Dimensionen (für den Fall dreier Dimensionen siehe [80])

$$(4.137) \quad \sigma = \frac{e^2}{\pi\hbar} \cdot k_F l_e$$

mit der mittleren freien Weglänge $l_e = [n_{imp} \cdot \Lambda_{tr}]^{-1}$, die neben dem Transportquerschnitt auch noch durch die Anzahldichte n_{imp} jener Streuer festgelegt wird, welche diesen aufweisen. Ersetzt man weiters den Fermi-Wellenzahlvektor k_F durch

den Impuls p der eingeschossenen Teilchen, so wird schließlich die durch die magnetischen [oder sonstigen] Streuer bewirkte Zunahme des spezifischen Widerstandes

$$(4.138) \quad \Delta\rho_{imp} = \frac{\pi\hbar}{e^2} \cdot \frac{n_{imp} \cdot \Lambda_{tr}}{p} .$$

Diese ist dann zu beziehen auf die auch am Neutralitätspunkt noch verbleibende endliche und somit minimale Leitfähigkeit des reinen Materials. Rein heuristisch und von der Größenordnung her lässt sich Letztere leicht anhand eines intuitiv-anschaulichen Arguments verstehen, das ebenfalls von Nevill F. Mott stammt und demzufolge die mittlere freie Weglänge l_e nicht kleiner sein kann als die Fermi-Wellenlänge λ_F , da eine zunächst hypothetisch angenommene stärkere Lokalisierung durch destruktive Interferenzen sogleich wieder verlorenginge. Empirisch (siehe etwa: [5], [6], [75]) zeigt sich, dass der maximale spezifische Widerstand reiner Proben $\rho_{max} = 1/\sigma_{min} = \frac{1}{4}R_Q \approx 6,45 \text{ k}\Omega$ etwa gleich einem Viertel des Quantenwiderstandes $R_Q := \frac{2\pi\hbar}{e^2} = 25,813 \text{ k}\Omega$ ist.

Setzt man für das Verhältnis beider, nämlich

$$(4.139) \quad \frac{\Delta\rho_{imp}}{\rho_{max}} \equiv \frac{2n_{imp} \cdot \Lambda_{tr}}{p} \stackrel{!}{=} 10^{-3}$$

die Messbarkeitsgrenze mit einem Promill an (auf den genauen Wert kommt es dabei, unter Anderem auf Grund der Trennbarkeit von anderen Effekten und insbesondere auch wegen der Grundsätzlichkeit des Argumentes nicht an), so erkennt man, dass, bezogen auf die Beispiele ohne Flussschlauchanteil, zumindest unter den oben dargelegten Voraussetzungen der ersten Born-Approximation, höchstwahrscheinlich aber auch sonst eine solche Messbarkeit überhaupt nicht gegeben ist. Selbst unter den hierfür optimalen Bedingungen ergäbe sich nämlich bei den oben angegebenen Parametern $B_0 = 20 \text{ mT}$ und $R = 20 \text{ nm}$ (und damit $p = 33 \text{ meV}$) für das Potential (4.32) ein massiver Überlapp der einzelnen Scheibchen, da ihre auf die Fläche bezogene Anzahldichte $n_{imp} \geq 2,25 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-2}$ übersteigen müsste. Auch für atomare Dipole mit ihrer kleineren Ausdehnung ist die Messbarkeitsbedingung (4.139) schlichtweg unerfüllbar, da sich nunmehr sogar $n_{imp} \geq 1,8 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-2}$ ergäbe.

Es müssen also zum Nachweis andere und mehr spezifische Methoden herangezogen werden, die bereits auf einen einzelnen Streuer zu reagieren und dessen Charakteristika zu registrieren in der Lage sind. Insbesondere rastertunnelmikroskopische Messungen (STM = scanning tunneling microscopy) erscheinen hierzu geeignet.

Im Umkehrschluss folgt daraus, dass unbeabsichtigte Kontaminationen mit magnetischen Störstellen – bei diesen können geschlossene Feldlinien und damit $\alpha_F = 0$ vorausgesetzt werden, denn das Umgekehrte dürfte nicht so einfach zu realisieren sein, als dass es ungewollt geschähe –, was ihren Einfluss auf die (globale) Leitfähigkeit einer Probe anbelangt, insgesamt zu vernachlässigen sind, zumal durch konkurrierende Effekte, vor Allem ionisierte Störstellen des Substrates und eine kaum vermeidbare Kräuselung der Graphenschicht selbst, eine weitaus stärkere Änderung ihres Widerstands hervorgerufen wird.

Zusammenfassende Diskussion und Ausblick

Da mit dem letzten Abschnitt des gerade zurückliegenden Kapitels bereits ein solcher, dieses zumindest ansatzweise zusammenfassenden Charakters dargeboten wurde, kann ich mich, bezogen auf dieses, hier etwas knapper fassen und mehr auf Kapitel 3, welches nicht nur vom seinem Umfange her als der Hauptteil dieser Arbeit anzusehen ist, verlegen. Trotzdem soll auch Kapitel 4, dieses wenigstens in groben Umrissen zusammenfassend, hier skizziert werden:

Zunächst wurde (in Abschnitt 4.1, und zwar ohne Berücksichtigung eines Spins und seiner Wechselwirkungen) die allgemeine Streutheorie für solche Störstellen im Graphen entwickelt, deren Feldlinien, ihrer geschlossenen Natur zufolge, bereits *innerhalb* desselben in sich selbst zurücklaufen und deshalb auch noch keinen Anlass bieten, einen magnetischen Netto-Fluss mit in Betracht zu ziehen; die Eichinvarianz der so erhaltenen Formeln (4.16) bis (4.19) wurde nachgewiesen. Diese wurden sodann (in Abschnitt 4.2) auf diverse Streuer, insbesondere auch Dipole in unterschiedlicher Lage angewendet. A priori klar ist, dass mit zunehmender Höhe h derselben – wenn die Streuer weiter weg sind vom Geschehen – ihre sämtlichen Streuquerschnitte kleiner werden müssen, doch ist der Einfluss des Impulses p bzw. des Parameters hp subtiler, insofern als in Abhängigkeit von diesem ein Maximum des Transportquerschnitts bei etwa $hp \sim 1$ durchlaufen wird. Dies bedeutet folglich, dass der Energiebereich $E = p \sim 1/h$, in dem jedweder Dipol (vorgegebener Stärke) sich am effektivsten auf die elektrische Leitung und andere Transportphänomene auszuwirken befähigt ist, umgekehrt proportional zu seiner Höhe über der Graphenschicht sein wird. Dies gilt prinzipiell ganz genauso auch für den Schrödinger-Fall und das 2LG. Zu Vergleichszwecken wurden nämlich (in Abschnitt 4.3) die entsprechenden Berechnungen auch für diese Fälle durchgeführt, Unterschiede und deren Ursachen dabei diskutiert. Wie sich herausstellte, entsprechen die dann erhaltenen Querschnitte genau jenen, die sich, basierend auf [26] für *elektrische* Dipole (und andere Streuer) im 1LG ergäben. Die im Abschnitt 4.2 angegebenen Ergebnisse für die magnetischen Dipole stellen aber gerade mit ihrer im 1LG nicht mehr unterdrückten Rückstreuung [vergleiche hierzu die Formeln (4.70) und (4.16) oder die Polardiagramme in den Abbn. 4.5 und 4.3] demgegenüber etwas prinzipiell Neues dar. Letztlich besteht die zugrundeliegende Ursache darin, dass im Falle elektrischer (elektrostatischer) Störstellen wegen der dann vorhandenen Zeitumkehrinvarianz die Ladungsträger (zumindest, wenn diese masselos sind; siehe diesbezüglich auch Abschnitt 2.3) nicht zurückgestreut werden können, wohingegen im Falle magnetischer Streuer, die die Zeitumkehrinvarianz brechen, eine solche Rückstreuung durchaus auftreten kann, je nach Dispersion (1LG, 2LG, Schrödinger) aber nicht muss.

Durch die Betrachtung des Flusschlauchproblems (in Abschnitt 4.4) wurde sodann der Weg freigemacht für die in Abschnitt 4.5 erfolgende Behandlung auch

solcher Probleme, deren Potential über einen derartigen, zu $\frac{1}{r}$ proportionalen Anteil verfügt, welcher durch einen von Null verschiedenen Gesamtfluss bedingt wird. Abschnitt 4.6 bringt dafür zwei konkrete Beispiele; insbesondere die abrupt begrenzte Kreisscheibe dürfte von praktischer Relevanz sein. Auf die Möglichkeit einer messenden Überprüfung mittels STM wurde schon (in Abschnitt 4.7) hingewiesen. Dort wurden auch die Grenzen der Näherungen betrachtet, die ohne einen Flussschlauchanteil wohl folgenlos bleiben dürften, ebenso wie die Auswirkungen auf den Widerstand einer Graphenschicht, insbesondere, was Kontaminationen durch unbeabsichtigte Streuer anbetrifft.

Die in Kapitel 4 über das Vektorpotential echter Magnetfelder insgesamt gemachten Aussagen gelten auch für eine durch Versetzung oder Fehlstellen bewirkte Verzerrung, die durch ein entsprechendes Pseudopotential beschrieben werden kann. Dabei ist die komplexe Konjugation zu beachten, die beim anderen K -Punkt K' nach Abschnitt 2.7 erforderlich wird, jedoch bewirkt die formale Zeitumkehr, die damit einhergeht, über eine Umpolung der Potentiale letztlich (siehe dazu wieder Abschnitt 4.7) *keine* Änderung in den sich ergebenden Streuquerschnitten.

Im zentralen Kapitel 3 dieser Arbeit wurden, vom Hamilton-Operator (3.2) in seiner allgemeinsten Form ausgehend, zunächst (in Abschnitt 3.1) jene Symmetrien betrachtet und erfasst, die die Lösungen bei Vorliegen aller hier in Frage kommenden Wechselwirkungen, das heißt insbesondere echter und pseudomagnetischer Felder, dem Zeeman-Terme sowie beider Arten der Spin-Bahn-Kopplung, notwendig zu erfüllen haben. Sodann wurde eine Beschränkung auf abschnittsweise konstante Bedingungen, die, wenn Letztere genügend fein abgestuft werden, als Näherung auch für kompliziertere Fälle stets machbar und statthaft sein sollte, sowie eine bei niedrigen Energien völlig gerechtfertigte Entkopplung der beiden K -Punkte voneinander vorgenommen. Auch in dieser, vom rechentechnischen Standpunkte her bereits genügend vereinfachten Form handelt es sich bei dem zugehörigen Hamilton-Operator (3.15) immerhin um ein in physikalischer Hinsicht gegenüber Kapitel 4, insbesondere durch die nun erfolgte Einbeziehung des echten (physikalischen) Spins und seiner Wechselwirkungen doch beträchtlich verfeinertes Modell.

Die sich aus ihm ergebende Differentialgleichung vierter Ordnung (3.25) lässt sich trotzdem in geschlossener Form lösen, und die beiden Lösungstypen wurden in Abschnitt 3.2 angegeben. Eine derselben (3.28) wurde zwar in Abschnitt 3.3 als unvereinbar mit den Randbedingungen eines beliebig ausgedehnten *homogenen* Bereiches verworfen, war aber später noch – bei anderen Bedingungen – von Nutzen. Aus der zu stellenden Bedingung (3.29) wurden dagegen die mit der zweiten Wellenfunktion (3.27) verträglichen Energien (3.36) extrahiert; siehe Abb. 3.1. Die nun erfolgten Verschiebungen und dadurch bedingten Aufspaltungen gegenüber den reinen Landau-Niveaus (3.43) sollten zur Aufhebung entsprechender Entartungen im Quanten-Hall-Effekte führen, könnten aber möglicherweise nur schwierig nachzuweisen sein, treten sie doch lediglich bei kleinen Feldern vernehmlich in Erscheinung, wo der QHE selbst, bedingt durch seine Vielzahl von Plateaus, sie dann allerdings weniger gut aufzulösen gestattet. Mit größer werdendem Felde hingegen werden die Aufspaltungen, die durch den Einfluss der Spin-Bahn-Kopplungen bedingt sind, nicht nur relativ gesehen kleiner, sondern auch absolut, und erst bei nochmals höheren Feldstärken (über 10 Tesla, siehe Abb. 3.4) erfolgt wieder eine Zunahme, die indessen dann jedoch allein auf den Zeeman-Effekt zurückzuführen

ist. Dagegen müssten sich die aufgehobenen Entartungen im Schubnikow-de-Haas-Effekt und seinen Oszillationen durchaus zeigen, und auch ein Nachweis mit Hilfe kapazitätsspektroskopischer Methoden sollte denkbar sein.

Durch die Betrachtung etlicher Sonderfälle, insbesondere des Rashba-Falles sowie die Entwicklung der Nullmoden konnten Aufschlüsse über die Zugehörigkeiten (Zuordnungen zu den ursprünglichen Landau-Niveaus) und damit auch über die Entartungsgrade dieser Niveaus gewonnen werden. Gerade durch den Spin, welcher hierbei eine wichtige Rolle spielt und in Abschnitt 3.4 deshalb einer eingehenden Betrachtung unterzogen wurde, sollten sich Möglichkeiten zur Messbarmachung und des experimentellen Nachweises auftun. Wie nämlich die beiden letztgenannten Abschnitte (Abschnitt 3.3 und vor Allem Abschnitt 3.4) in detaillierter Weise dartun, sind, wenn man sie unter diesem Oberbegriff zu subsumieren bereit ist, drei Arten von Phasenübergängen vorherzusagen:

- Im Niedrigfeldbereich kommt es durch die Aufspaltungen, die durch die beiden Spin-Bahn-Kopplungen bedingt sind, bei gewissen Übergangsfeldstärken B_{tr} zur Möglichkeit des Überkreuzens von Niveaus, die ursprünglich *verschiedenen* Landau-Niveaus zugeordnet waren.
- Im Hochfeldbereich geschieht etwas ähnliches bei den kritischen Feldstärken B_{cr} mit jenen Niveaus, die einem *gemeinsamen* Landau-Niveau angehörten. (Durch entsprechende Parameterwahl kann der Wert von B_{cr} in einen weniger hohen und damit experimentell leichter zugänglichen Bereich verlegt werden, siehe dazu Tabelle 3.3.)

In beiden Fällen (siehe Abb. 3.8 und Abb. 3.9) kommt es unter geeigneten Bedingungen zu einem deutlichen Umschlagen der Spinausrichtung im jeweils höchsten (ganz oder teilweise) besetzten Niveau, welches mittels spinpolarisierter Rastertunnelmikroskopie (SP-STM = spin-polarized STM) nachzuweisen wäre. Auch bezüglich der summarischen Spinausrichtung (3.57), also der über den gesamten Bereich einer bis jetzt völlig einheitlichen Probe integrierten und über all ihre besetzten Bänder aufsummierten Spins (ihrer z -Komponenten), welche sich nach außen hin als deren Magnetisierung bemerkbar zu machen imstande ist, steht in diversen magnetooptischen Methoden (z.B. MOKE = magnetooptischer Kerr-Effekt) ein Messmittel zur Verfügung.

- Bei $B_{\Delta} = \Delta/b$ (zum Zwecke der experimentellen Erreichbarkeit muss Δ gegenüber den beiden hier benutzten Werten deutlich herunterskaliert werden) kommt es zu einem Phasenübergang von fundamentalerer Art. Seiner Wichtigkeit gemäß und der Tatsache entsprechend, dass er nicht von selbst verständlich ist, sei es gestattet, ihm hier noch einige weitere erläuternde Worte zu widmen:

Falls man allein aus dem Blickwinkel der zusammen- bzw. einander entgegenwirkenden Energien und naiv nach dem Majoritätsprinzip hätte entscheiden wollen, welcher Art die beiden Phasen, zwischen denen er sich abspielt, denn wohl seien, so wäre die folgende Argumentation eine ganz und gar naheliegende gewesen: Für $B < B_{\Delta}$ wäre die Situation zumindest in etwa noch vergleichbar mit jener, die bereits (mit $B = 0$) im feldfreien Falle vorlag, sodass sich immer noch ein, wenn auch in gewisser Weise verallgemeinerter, QSH-Zustand einzustellen hätte. Dass dieser auch bei $B \neq 0$ und folglich fehlender Zeitumkehrsymmetrie möglich ist, wurde in [72] nachgewiesen; denn die Zeitumkehrinvarianz schützt zwar den QSH-Zustand, ist aber für ihn keineswegs eine zwingend notwendige Voraussetzung. Für

$bB > \Delta$ wäre dagegen das qualitativ gleiche Ergebnis wie bei $\Delta = 0$, somit also eine QAH-Phase zu erwarten.

Während die soeben ein Wenig leichtfertig gezogene Schlussfolgerung *auf den ersten Blick* von der gerade erwähnten Arbeit [72] bestätigt zu werden scheint, indem diese einen derartigen Phasenübergang QSH \rightarrow QAH unter bestimmten Umständen tatsächlich ausweist, zeigt ihre genauere Durchsicht, dass sie dies Ergebnis nur von einem anderen und dabei leicht einschränkenden Modell ausgehend erhält: Neben den beiden Spin-Bahn-Kopplungen Δ und λ wird dort zwar ein weiterer, zu s_z proportionaler Term in Rechnung gestellt. Dieser als Austauschfeld („exchange field“) bezeichnete Term verhält sich also in Bezug auf den Spin ganz analog wie der Zeeman-Term (3.1), doch wird die *orbitale* Wirkung eines entsprechenden Magnetfeldes dabei gänzlich außer Acht gelassen. Durch die Betrachtung topologischer Größen zeigen die Autoren dann, dass besagter Übergang QSH \rightarrow QAH genau dann eintritt, wenn bB und/oder λ – gegebenenfalls beide in ihrem Zusammenwirken oder eben auch einzeln – eine genügende (kritische) Größe erreichen: für $\lambda = 0$ ist dies $bB = \Delta$ und für $bB = 0$, wie bekannt (siehe Abschnitt 2.5), $\frac{1}{2}\lambda = \Delta$.

Durch die Einbeziehung des orbitalen Feldes über die Peierls-Substitution (2.30) in (3.15) ergab sich hier jedoch ein etwas anderes Ergebnis, nämlich insofern, als dass der Übergang zwischen *zwei* (wenn auch verschiedenen) QSH-Phasen stattfindet. Verbunden damit sei die Warnung ausgesprochen, dass man wegen der tief im Relativistischen gründenden und deshalb doch ziemlich ungewohnten Eigenschaften des Graphen nicht, wie es einer voreilig forsch-naiven Haltung wohl entspräche, die Einzeleffekte bloß summarisch zu addieren brauchte, um das einer komplex zusammengesetzten Situation angemessene Gesamtbild zu erhalten. Insofern ist auch die im Zusammenhang mit der Bedingung (3.58) gemachte Bemerkung, λ falle gewissermaßen aus der energetischen Konkurrenz heraus, lediglich, wie wohl aus dem Kontext zu entnehmen sein dürfte, auf die *Lage* des Phasenüberganges gemünzt, nicht aber auf seine Art bezogen.

Der Phasenübergang selbst kann ebenso wie in den beiden anderen vorgenannten Fällen wiederum durch eine simple Erhöhung bzw. Veränderung der magnetischen Feldstärke B ausgelöst oder auch gesteuert werden. Aufgrund der Richtungsumkehr des Spinstromes am Probenrande gesellt sich nun aber zu den bereits geschilderten Nachweismethoden, insbesondere der spinpolarisierten STM, noch eine weitere, die durch Transportexperimente ähnlich wie beim QHE gegeben ist. Indem ein Teilchen- bzw. Ladungsstrom durch einen Paarkontakt getrieben wird, ruft dieser in einem zweiten einen Strom von Spins hervor, der seine Richtung dann in Abhängigkeit von der Stärke des angelegten Magnetfeldes ändert. [40] zeigt die prinzipielle Anordnung auf, während [81] mit seinen experimentellen Einzelheiten den Weg zur Realisierung einer derartigen Vierpunktmessung weist.

Weitere, wenn auch vielleicht nicht ganz so spektakuläre Möglichkeiten, Messungen an den hier behandelten Systemen vorzunehmen, ergeben sich aus den Verteilungen der Teilchendichten, -ströme und Spineinstellungen, wie sie im Zusammenhang mit den beiden zuerst genannten Übergängen berechnet wurden; siehe dazu die Abbn. 3.7 und 3.10. Dass solche in einer Situation, die ansonsten völlig homogen ist, nicht (dauerhaft) festzulegen sein dürften, wurde bereits im Haupttext eingeräumt. Und auch ein Ausweg wurde gewiesen: Indem nämlich (in Abschnitt 3.5 und der Übersicht halber) die an sich bereits bekannten Wellenfunktionen für Bereiche, in denen kein Magnetfeld vorliegt, nochmals zusammengestellt wurden,

konnten dann, in Abschnitt 3.6, lineare magnetische Strukturen, das heißt solche Anordnungen, bei denen das Magnetfeld entlang der y-Richtung in vorgegebener Weise wechselt, untersucht, diskutiert und gedeutet werden – Letzteres in einer geradezu erstaunlich klassischen Weise.

Für drei verschiedene Konfigurationen wurden mit und ohne Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung bzw. mechanischer Verzerrungen die Dispersionsbeziehungen berechnet. Da eine Ausbreitung der Teilchen – bzw. der ihnen zugeordneten Materiewellen – hier lediglich in x-, aber nicht in y-Richtung möglich ist, könnten diese als Wellenleiter fungieren. Je nach deren konkreter Ausgestaltung ergeben sich dabei Möglichkeiten, die Ausbreitung bezüglich einer Raumrichtung, einer bestimmten Spineinstellung oder eines gewissen Energiebereichs zu fördern oder auch zu unterdrücken. So kommt etwa bei Konfiguration I mit ihren antiparallelen Feldern in den Außenbereichen – zumindest für nicht zu kleine $|k_x|$ – eine Ausbreitung der *Teilchenzustände* (i.e.S.) nur in positiver x-Richtung in Frage.

Eine Blockade bestimmter Energien oder eines bestimmten Spins ergibt sich dagegen in Konfiguration II mit ihren nunmehr parallelen Feldern: Man betrachte etwa die (wenn auch nur geringe) Energielücke bei $E \approx 1,43$ in Abb. 3.13 zwischen den Zuständen für $N = 1$ und $N = 2$. Andererseits ist bei $E = 1,50$ nur eine der beiden Kombinationen – und damit eine bevorzugte Spineinstellung – zur Ausbreitung geeignet. Desweiteren zeigt Abb. 3.19 für die beiden im Sinne des Stromtransportes stationären Zustände, die den in Abb. 3.13 durch Sternchen rot markierten Minima zukommen, bei fast identischer Verteilung der Stromdichten ein sehr deutliches Umschlagen der Spins. Dabei ist hervorzuheben, dass durch die räumliche Trennung der hier einander kompensierenden positiven und negativen Stromdichten J_x (für entgegengesetzt gelagerte Fälle siehe die Abbn. 3.17 oder 3.18) keinerlei elastische Rückstreuungen zu erwarten sind. Zumindest dürften diese sehr stark unterdrückt sein, denn trotz dazwischen gar nicht oder doch nur geringfügig abflauernder Teilchendichte beträgt ihr gegenseitiger Abstand, gemessen an den zugehörigen Maxima, auf der magnetischen Längenskala l_B jedes Mal rund eine Einheit. Da die in Rede stehenden Verteilungen, für die die drei letztgenannten Darstellungen die charakteristischen Beispiele abgeben, durch das Vorhandensein verschiedener Bereiche nunmehr ihre räumliche Lokalisierung erfahren, können an ihnen auch orts aufgelöste Messungen vorgenommen werden.

Konfiguration IV (in Abschnitt 3.7) erlaubt schließlich auch die Transmission senkrecht zu ihren Grenzen. Herausgegriffen wurde sie gewissermaßen exemplarisch aus einem Baukasten, der, wenn bei ihm zusätzlich auch noch die Breite der Streifen, die Stärke der jeweils herrschenden Magnetfelder und nicht zuletzt auch die der dort vorliegenden Dotierungen einer genügend fein abgestuften und im Grenzfalle stetigen Veränderung unterworfen werden, es gestattet, Vieles zusammensetzen und zumindest in y-Richtung schier beliebige Profile zu entwerfen. Auf diese Weise sollte nicht nur eine – neben der Energie – insbesondere vom Spin abhängige Ausbreitung im Sinne einer Filterung durch die Anordnung, sondern auch eine gezielte Beeinflussung und Manipulation desselben (unter Anderem im Hinblick auf spintronische Anwendungen) als realisierbar erscheinen.

Ergänzender Anhang

Um der leichteren Lesbarkeit willen wurden einige Ergänzungen, insbesondere auch solche mehr rechentechnischer Art, sowie Herleitungen, die für das Verständnis des Haupttextes nicht zwingend erforderlich sind, diesem aber zweifellos dienlich sein werden, in die nun folgenden Anhänge verlagert.

6.1. Ergänzungen zu Abschnitt 3.2

Die vollständige Berechnung aller Komponenten einer Spinor-Wellenfunktion, zum Beispiel (3.27) aus dem Gleichungssystem (3.20) erfordert – neben einem geeigneten Ansatz – die Verwendung der Rekursionsbeziehungen (siehe [68]):

$$(6.1) \quad \left(\frac{1}{2}\eta - \partial_\eta \right) D_p(\eta) = D_{p+1}(\eta)$$

$$(6.2) \quad \left(\frac{1}{2}\eta + \partial_\eta \right) D_p(\eta) = p \cdot D_{p-1}(\eta)$$

Die Operatoren $\frac{1}{2}\eta + \partial_\eta =: a$ und $\frac{1}{2}\eta - \partial_\eta = a^+$ können deshalb in Analogie zu (2.43f) als Leiteroperatoren angesehen werden, welche die Kommutatorrelation $[a, a^+] = 1$ erfüllen. Entsprechende Beziehungen für die anderen Argumente von D_p verschafft man sich leicht aus (6.1) und (6.2).

Um die umgekehrte Polung des Magnetfeldes $B_z = -B$ in die Kalkulation miteinzubringen, ist in (3.17) und (3.18) die Ersetzung $B \mapsto -B$ vorzunehmen, und statt (3.19) ist nun

$$(6.3) \quad \eta := \sqrt{2B} \cdot \left(y + \frac{K}{B} \right)$$

als Variable zu benutzen. De facto werden hierdurch die Vorzeichen von A_0 und k_x in ihrer Wirkung ausgetauscht, was letztlich erst die Erfüllung der Relationen (3.12) und (3.13) beim Übergang von (3.27) und (3.28) nach (3.31) und (3.32) gewährleistet.

In (3.20) ist $\frac{1}{2}\eta$ durch $-\frac{1}{2}\eta$ zu ersetzen, also $a \rightarrow -a^+$ und $a^+ \rightarrow -a$ zu transformieren, sowie die Spinindizes \uparrow und \downarrow bei den Elementen $\tilde{\nu}_{\dots}$ der Matrix zu vertauschen. Letztlich ergibt sich, dass die Gleichung (3.25) nunmehr für $\Psi_{A\downarrow}(\eta)$ statt für $\Psi_{B\uparrow}(\eta)$ gilt. Mit bis auf den Spinindex des Koeffizienten identischen Ansätzen für $\Psi_{B\uparrow}(\eta) = \tilde{\nu}_{\downarrow-} \cdot D_p(\eta)$ und $\Psi_{B\uparrow}(\eta) = \tilde{\nu}_{\downarrow-} \cdot D_{-(p+1)}(-i\eta)$ ergibt sich

$$(6.4) \quad \Psi_{SOAS-B}^{(reell)'}(\eta) = \begin{pmatrix} D_{p+1}(\eta) \\ \tilde{\nu}_{\downarrow-} \cdot D_p(\eta) \\ -i(\nu_{\downarrow-p-1}) \cdot D_p(\eta) \\ \frac{-i(\nu_{\downarrow-p-1})p}{\Lambda \tilde{\nu}_{\uparrow-}} \cdot D_{p-1}(\eta) \end{pmatrix}$$

und

$$(6.5) \quad \Psi_{SOAS-B}^{(imag)'}(\eta) = \begin{pmatrix} -i(p+1) \cdot D_{-(p+2)}(-i\eta) \\ \tilde{\nu}_{\downarrow-} \cdot D_{-(p+1)}(-i\eta) \\ \frac{-i(\nu_{\downarrow-p-1})}{\Lambda} \cdot D_{-(p+1)}(-i\eta) \\ \frac{(\nu_{\downarrow-p-1})}{\Lambda \tilde{\nu}_{\uparrow-}} \cdot D_{-p}(-i\eta) \end{pmatrix}.$$

Diese Formen fanden Verwendung in den numerischen Berechnungen und unterscheiden sich von (3.31) und (3.32) nur durch den zusätzlich eingefügten Faktor $\frac{-i(\nu_{\downarrow-p-1})}{\Lambda \tilde{\nu}_{\uparrow-}}$. Dabei wurde von der Beziehung (3.26) Gebrauch gemacht und außerdem ein Vorzeichenwechsel der äußeren Komponenten von (6.5) vorgenommen, um dem gegenüber (3.32) veränderten Argument in den Zylinderfunktionen Rechnung zu tragen, die sich wegen ihres um eine Einheit abweichenden Index anders transformieren als die den beiden mittleren Komponenten gemeinsame Funktion $D_{-(p+1)}$.

Für nicht-ganzzahlige Werte des Index $p \notin \mathbb{Z}$ sind nun auch die beiden Zylinderfunktionen $D_p(\eta)$ und $D_p(-\eta)$ linear unabhängig voneinander, und unter Verzicht auf die imaginären Argumente kann statt (3.28) die Wellenfunktion

$$(6.6) \quad \Psi_{SOAS+B}^{(reell-alt)}(\eta) = \begin{pmatrix} p \cdot D_{p-1}(-\eta) \\ \tilde{\nu}_{\uparrow-} \cdot D_p(-\eta) \\ \frac{-i(\nu_{\uparrow-p})}{\Lambda} \cdot D_p(-\eta) \\ \frac{-i(\nu_{\uparrow-p})}{\Lambda \tilde{\nu}_{\downarrow-}} \cdot D_{p+1}(-\eta) \end{pmatrix}$$

sowie analog (für $B_z = -B$) statt (3.32) bzw. (6.5) auch

$$(6.7) \quad = \Psi_{SOAS-B}^{(reell-alt)}(\eta) = \begin{pmatrix} -D_{p+1}(-\eta) \\ \tilde{\nu}_{\downarrow-} \cdot D_p(-\eta) \\ \frac{-i(\nu_{\downarrow-p-1})}{\Lambda} \cdot D_p(-\eta) \\ \frac{i(\nu_{\downarrow-p-1})p}{\Lambda \tilde{\nu}_{\uparrow-}} \cdot D_{p-1}(-\eta) \end{pmatrix}$$

benutzt werden. Die Verwendung dieser beiden alternativen Formen mag unter gewissen Umständen für die Praxis vorteilhafter sein; siehe weiter unten in den Ergänzungen zu Abschnitt 3.6.

Zuletzt soll noch der Fall fehlender Rashba-Wechselwirkung erörtert werden. Für $\lambda = \Lambda = 0$ entkoppeln die beiden Spinrichtungen in (3.20) und man gewinnt die entsprechenden Wellenfunktionen entweder durch direkte Rechnung – die Gleichungen (3.23) und (3.24) werden dann homogen – oder dadurch, dass man die als Lösung vorhandenen Wellenfunktionen (3.27f) folgender Überlegung unterwirft: Für $\Lambda = 0$ muss in (3.26) eine der beiden Klammern auf der linken Seite identisch verschwinden. Ist dies die erste, also $p = \nu_{\uparrow}$, so verschwinden damit auch die beiden unteren Komponenten in den Wellenfunktionen (3.27) und (3.28). Aus formaler Sicht geht dies völlig in Ordnung, wenn man in (3.26) durch Λ (nicht Λ^2) dividiert und dann den Grenzübergang $\Lambda \rightarrow 0$ bei festem Wert p durchführt. Man erhält dann

$$(6.8) \quad \Psi_{SOAS+B,\uparrow}^{(reell;\lambda=0)}(\eta) = \begin{pmatrix} -p \cdot D_{p-1}(\eta) \\ \tilde{\nu}_{\uparrow-} \cdot D_p(\eta) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

und

$$(6.9) \quad \Psi_{SOAS+B,\uparrow}^{(imag;\lambda=0)}(\eta) = \begin{pmatrix} -i \cdot D_{-p}(-i\eta) \\ \tilde{\nu}_{\uparrow-} \cdot D_{-(p+1)}(-i\eta) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

(Die Bezeichnung „SOAS“ als Index wurde beibehalten, da die intrinsische trotz fehlender Rashba-Wechselwirkung noch immer eine Spin-Bahn-Kopplung darstellt.) Andererseits werden durch Multiplikation der Wellenfunktionen mit Λ deren obere Komponenten zum Verschwinden gebracht und durch das Fortlassen gemeinsamer Faktoren wird nun für $p = \nu_{\downarrow} - 1$ aus (3.27) und (3.28)

$$(6.10) \quad \Psi_{SOAS+B,\downarrow}^{(reell;\lambda=0)}(\eta) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \tilde{\nu}_{\downarrow-} \cdot D_p(\eta) \\ -D_{p+1}(\eta) \end{pmatrix}$$

und

$$(6.11) \quad \Psi_{SOAS+B,\downarrow}^{(imag;\lambda=0)}(\eta) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \tilde{\nu}_{\downarrow-} \cdot D_{-(p+1)}(-i\eta) \\ i(p+1) \cdot D_{-(p+2)}(-i\eta) \end{pmatrix}.$$

Durch die an den Wellenfunktionen (6.8) bis (6.11) angebrachten Indizes \uparrow und \downarrow für die Spins soll deren sich für $\lambda \rightarrow 0$ vollziehende Entkopplung nochmals betont werden. Da der dabei auftretende Index p jeweils nur noch eines einzigen Wertes – dieser wurde oben angegeben – fähig ist, sind dies insgesamt, wie es sein muss, auch genau vier Wellenfunktionen und nicht etwa mehr, als es im Vorhinein waren. Anzumerken bleibt noch, dass für $\lambda = \Delta = b = V_0 = A_0 = 0$ im homogenen Fall unbegrenzter Ausdehnung des Abschnitts 3.3 wegen der dann verlangten Ganzzahligkeit der Indizes $\nu = n \in \mathbb{N}_0$ und des dabei gültigen Zusammenhangs (3.33) (die Kennzeichnung des Spins entfällt, da wegen $b = 0$ dieser hier keine Auswirkung mehr hat) die von Null verschiedenen Komponenten der Wellenfunktionen (6.8) mit $p = n \in \mathbb{N}_0$ für $s_z = \uparrow$ bzw. (6.10) mit $p + 1 = n \in \mathbb{N}_0$ für $s_z = \downarrow$ die früheren Ergebnisse (2.46) mit (2.47) aus Kapitel 2 (dort wurde $\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}\eta$ als Variable benutzt) genau reproduzieren. So wird für den Normalbereich, wenn auf diesen noch ein Magnetfeld einwirkt, aus (6.8)

$$(6.12) \quad \Psi_{N+B,\uparrow}^{(reell)}(\eta) = \begin{pmatrix} -\tilde{\nu}_0 \cdot D_{\nu_0-1}(\eta) \\ D_{\nu_0}(\eta) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit den Abkürzungen $\tilde{\nu}_0 := \frac{E}{\sqrt{2B}}$ und $\nu_0 := \tilde{\nu}_0^2$ und aus (6.9) [unter Hinzunahme eines Faktors i – ähnliche Freiheiten seien auch im Folgenden erlaubt]

$$(6.13) \quad \Psi_{N+B,\uparrow}^{(imag)}(\eta) = \begin{pmatrix} D_{-\nu_0}(-i\eta) \\ i\tilde{\nu}_0 \cdot D_{-(\nu_0+1)}(-i\eta) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

oder alternativ dazu verwendbar

$$(6.14) \quad \Psi_{N+B,\uparrow}^{(reell-alt)}(\eta) = \begin{pmatrix} \tilde{\nu}_0 \cdot D_{\nu_0-1}(-\eta) \\ D_{\nu_0}(-\eta) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Bei negativer Polung des Feldes $B_z = -B$ ganz ähnlich

$$(6.15) \quad \Psi_{N-B,\uparrow}^{(reell)}(\eta) = \begin{pmatrix} D_{\nu_0}(\eta) \\ \tilde{\nu}_0 \cdot D_{\nu_0-1}(\eta) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

und

$$(6.16) \quad \Psi_{N-B,\uparrow}^{(imag)}(\eta) = \begin{pmatrix} -i\tilde{\nu}_0 \cdot D_{-(\nu_0+1)}(-i\eta) \\ D_{-\nu_0}(-i\eta) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

bzw.

$$(6.17) \quad \Psi_{N-B,\uparrow}^{(reell-alt)}(\eta) = \begin{pmatrix} D_{\nu_0}(-\eta) \\ -\tilde{\nu}_0 \cdot D_{\nu_0-1}(-\eta) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Die Umpolung der Spineinstellung erfolgt einfach durch Vertauschung der beiden oberen Komponenten *als Gruppe* (also ein „Durchrutschen“ derselben) mit den beiden unteren.

Somit lassen sich für alle relevanten Fälle mit Magnetfeld die Matrizen Ω analog zu (3.30) leicht aufschreiben. Alle anderen Parameter (außer B) können bei Bedarf problemlos gleich Null gesetzt werden; nötigenfalls ist mit einer (oder mehreren) der im Nenner stehenden Größen $\tilde{\nu}_\dots$ zu erweitern. Eine gegebenenfalls erforderliche Umpolung des B -Feldes ist, falls man nicht anderweitig über geeignete Lösungen verfügt, mittels (3.12f) leicht vorzunehmen. In den das Kapitel 3 beschließenden Abschnitten 3.6 und 3.7 wurde, wie dort näher ausgeführt ist, für die numerischen Berechnungen $b = 0$ gesetzt. Dadurch vereinfacht sich (3.29) zu

$$(6.18) \quad p = p^\pm = \nu - \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + (\Lambda\tilde{\nu}_-)^2} \equiv \frac{1}{2B} \cdot \left[(E - V_0)^2 - \Delta^2 - B \pm \sqrt{B^2 + \lambda^2 (E - V_0 - \Delta)^2} \right]$$

und die Matrix (3.30) schreibt sich explizit wie folgt:

$$(6.19) \quad \Omega_{SOAS+B}(y) = \begin{pmatrix} -p^+ \cdot D_{p^+-1}(\eta) & -p^- \cdot D_{p^--1}(\eta) & & \\ \tilde{\nu}_- \cdot D_{p^+}(\eta) & \tilde{\nu}_- \cdot D_{p^-}(\eta) & & \\ \frac{-i(\nu-p^+)}{\Lambda} \cdot D_{p^+}(\eta) & \frac{-i(\nu-p^-)}{\Lambda} \cdot D_{p^-}(\eta) & \cdots & \\ \frac{i(\nu-p^+)}{\Lambda \tilde{\nu}_-} \cdot D_{p^++1}(\eta) & \frac{i(\nu-p^-)}{\Lambda \tilde{\nu}_-} \cdot D_{p^-+1}(\eta) & & \\ & -i \cdot D_{-p^+}(-i\eta) & & -i \cdot D_{-p^-}(-i\eta) \\ & \tilde{\nu}_- \cdot D_{-(p^++1)}(-i\eta) & & \tilde{\nu}_- \cdot D_{-(p^-+1)}(-i\eta) \\ \frac{-i(\nu-p^+)}{\Lambda} \cdot D_{-(p^++1)}(-i\eta) & \frac{-i(\nu-p^-)}{\Lambda} \cdot D_{-(p^-+1)}(-i\eta) & & \\ \frac{(\nu-p^+)(p^++1)}{\Lambda \tilde{\nu}_-} \cdot D_{-(p^++2)}(-i\eta) & \frac{(\nu-p^-)(p^-+1)}{\Lambda \tilde{\nu}_-} \cdot D_{-(p^-+2)}(-i\eta) & & \end{pmatrix}$$

Bei umgekehrter Polung des Magnetfeldes ist stattdessen

$$(6.20) \quad \Omega_{SOAS-B}(y) = \begin{pmatrix} D_{p^++1}(\eta) & D_{p^--1}(\eta) & & \\ \tilde{\nu}_- \cdot D_{p^+}(\eta) & \tilde{\nu}_- \cdot D_{p^-}(\eta) & & \\ \frac{-i(\nu-p^+-1)}{\Lambda} \cdot D_{p^+}(\eta) & \frac{-i(\nu-p^--1)}{\Lambda} \cdot D_{p^-}(\eta) & \cdots & \\ \frac{-i(\nu-p^+-1)p^+}{\Lambda \tilde{\nu}_-} \cdot D_{p^+-1}(\eta) & \frac{-i(\nu-p^--1)p^-}{\Lambda \tilde{\nu}_-} \cdot D_{p^--1}(\eta) & & \\ -i(p^++1) \cdot D_{-(p^++2)}(-i\eta) & -i(p^--1) \cdot D_{-(p^--2)}(-i\eta) & & \\ \tilde{\nu}_- \cdot D_{-(p^++1)}(-i\eta) & \tilde{\nu}_- \cdot D_{-(p^--1)}(-i\eta) & & \\ \frac{-i(\nu-p^+-1)}{\Lambda} \cdot D_{-(p^++1)}(-i\eta) & \frac{-i(\nu-p^--1)}{\Lambda} \cdot D_{-(p^--1)}(-i\eta) & & \\ \frac{(\nu-p^+-1)}{\Lambda \tilde{\nu}_-} \cdot D_{-p^+}(-i\eta) & \frac{(\nu-p^--1)}{\Lambda \tilde{\nu}_-} \cdot D_{-p^-}(-i\eta) & & \end{pmatrix}.$$

Zu beachten ist, dass die Variable η in beiden Fällen unterschiedlich definiert wird, da nämlich gilt

$$(6.21) \quad \eta = \sqrt{2 \cdot |B_z|} \cdot \left(y - y_{0i} - \frac{B_z}{B_z^2} \cdot (k_x - A_0) \right).$$

6.2. Ergänzungen zu Abschnitt 3.5

Ohne Magnetfeld gilt

$$(6.22) \quad \Omega_{SOAS}(y) = \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} \exp(-i\theta_+) & \exp(i\theta_+) & \exp(-i\theta_-) & \exp(i\theta_-) \\ w_+ & w_+ & w_- & w_- \\ -iw_+ & -iw_+ & iw_- & iw_- \\ -i \exp(i\theta_+) & -i \exp(-i\theta_+) & i \exp(i\theta_-) & i \exp(-i\theta_-) \end{pmatrix} \cdot D_\theta(y)$$

mit der Abkürzung

$$(6.23) \quad N_\alpha(y) = \frac{\exp(iq_{y,\alpha}y)}{\sqrt{w_\alpha} \cdot \sin \theta_\alpha}$$

in der Diagonalmatrix

$$(6.24) \quad D_\theta(y) := \begin{pmatrix} N_+(+y) & & & \\ & N_+(-y) & & \\ & & N_- (+y) & \\ & & & N_- (-y) \end{pmatrix},$$

im Normalbereich hingegen

$$(6.25) \quad \Omega_N(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} \exp(-i\phi) & \exp(i\phi) & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \exp(i\phi) & \exp(-i\phi) \end{pmatrix} \cdot \frac{D_\phi(y)}{\sqrt{\sin\phi}}$$

mit

$$(6.26) \quad D_\phi(y) := \begin{pmatrix} \exp(ik_y y) & & & \\ & \exp(-ik_y y) & & \\ & & \exp(ik_y y) & \\ & & & \exp(-ik_y y) \end{pmatrix}.$$

Die im Hauptteil geforderte Normierung auf die Geschwindigkeit wurde in beiden Fällen vorgenommen.

Einige Worte betreffend *Doppelbrechung*, *Polarisation* und *Energielücke*: Wie man aus dem „Brechungsgesetz“ (Gleichung 3.82) unschwer erkennt, kann eine Doppelbrechung beim Übergang in den SOAS-Bereich hinein lediglich dann eintreten, wenn die vorgegebene Energie E außerhalb *beider* durch (3.80) definierten Intervalle liegt, das heißt, dass sich die Wellen (bzw. Teilchen) aufgrund ihrer unterschiedlichen „Polarisation“ α dann in zwei verschiedenen Richtungen weiterbewegen.

Falls die Energie in eines (und nur eines) der beiden Intervalle fällt, die sich für $\alpha = \pm 1$ ergeben, so wird der Zustand mit dem zugehörigen α , zumindest nach genügender Eindringtiefe, allmählich verlöschen müssen und sich nur der andere wirklich in den SOAS-Bereich hinein auszubreiten vermögen. Indem die jeweils andere Polarisation blockiert wird, bleibt für einen ganzen Energiebereich nur eine bestimmte Polarisation übrig, die allerdings, wie bereits oben erläutert, nicht dahingehend zu verstehen ist, dass es sich um eine festgelegte Einstellung des Spins handeln würde, sondern lediglich um eine bestimmte Überlagerung der beiden vorhandenen (und realisierten) Möglichkeiten.

Ein Übertritt in einen – genügend breiten – SOAS-Bereich wird lediglich dann in jedem Falle vereitelt, wenn die Energie des betreffenden Teilchenzustandes von beiden Intervallen (3.80) umfasst wird. Dies ist allerdings nur möglich unter der Bedingung $\Delta > \lambda/2$; dann umschließen die Intervalle einander mit gemeinsamer (rechter) Grenze $V_0 + \Delta$. Das enger gezogene Intervall geht dabei von $V_0 + \lambda - \Delta$ bis $V_0 + \Delta$, stellt also mit seiner Breite $2\Delta - \lambda$ genau jene Energielücke (siehe Abschnitt 2.5) dar, innerhalb derer, von schwächer werdenden, evaneszenten Wellen abgesehen, keine Ausbreitung mehr erfolgen kann. Die stets gegenwärtige Möglichkeit $E = V_0 + \Delta$ selbst (mit $v_{F,\alpha}^{\text{eff}} = 0$ für beide $\alpha = \pm 1$) ist dabei natürlich als ein Grenzfall anzusehen, der für jedes beliebige λ Gültigkeit besitzt.

6.3. Ergänzungen zu Abschnitt 3.6

Die Konfigurationen II und III lassen sich ganz entsprechend, wie für die erste im Hauptteil geschehen, nach demselben Verfahren durchrechnen. Gegenüber Konf. I ist bei Konf. II auch für den Bereich $y > L$ die Wellenfunktion bei positivem Magnetfelde, zwecks Konvergenz also (6.12) zusammen mit ihrem Spin- \downarrow -Partner,

zu benutzen. In der sich dadurch ergebenden 4×4 -Matrix

$$(6.27) \quad \begin{pmatrix} \left(\begin{array}{c} D_0 e^{-i\theta_+} - D_1 w_+ \\ \overline{D}_0 e^{-i\theta_+} + \overline{D}_1 w_+ \end{array} \right) & Q_+ \left(\begin{array}{c} D_0 e^{i\theta_+} - D_1 w_+ \\ \overline{D}_0 e^{i\theta_+} + \overline{D}_1 w_+ \end{array} \right) & \left(\begin{array}{c} D_0 e^{-i\theta_-} - D_1 w_- \\ \overline{D}_0 e^{-i\theta_-} + \overline{D}_1 w_- \end{array} \right) & Q_- \left(\begin{array}{c} D_0 e^{i\theta_-} - D_1 w_- \\ \overline{D}_0 e^{i\theta_-} + \overline{D}_1 w_- \end{array} \right) \\ Q_+ \left(\begin{array}{c} D_1 e^{i\theta_+} - D_0 w_+ \\ -\overline{D}_1 e^{i\theta_+} - \overline{D}_0 w_+ \end{array} \right) & Q_+ \left(\begin{array}{c} D_1 e^{-i\theta_+} - D_0 w_+ \\ -\overline{D}_1 e^{-i\theta_+} - \overline{D}_0 w_+ \end{array} \right) & \left(\begin{array}{c} -D_1 e^{i\theta_-} + D_0 w_- \\ \overline{D}_1 e^{i\theta_-} + \overline{D}_0 w_- \end{array} \right) & Q_- \left(\begin{array}{c} -D_1 e^{-i\theta_-} + D_0 w_- \\ \overline{D}_1 e^{-i\theta_-} + \overline{D}_0 w_- \end{array} \right) \end{pmatrix},$$

deren Determinante, um die Dispersionsrelation $E(k_x)$ zu erhalten, ebenfalls verschwinden muss, sind als Argumente der Zylinderfunktionen in der zweiten und vierten Zeile die entsprechenden negativen Werte $-\eta_{gr}$ zu nehmen, was durch Überstreichungen kenntlich gemacht wurde, also $\overline{D}_0 := D_{\nu_0}(-\eta_{gr})$ und $\overline{D}_1 := \tilde{\nu}_0 \cdot D_{\nu_0-1}(-\eta_{gr})$. Ohne Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung reduziert sich die Bedingungsungleichung auf die Determinante

$$(6.28) \quad \det \begin{pmatrix} (D_0 e^{-i\theta} - D_1) & Q_0 (D_0 e^{i\theta} - D_1) \\ Q_0 (\overline{D}_0 e^{-i\theta} + \overline{D}_1) & (\overline{D}_0 e^{i\theta} + \overline{D}_1) \end{pmatrix} = 0.$$

Die Betrachtung der Grenzwerte $k_x \propto \eta_{gr} \mapsto \pm\infty$ ist nicht ganz einfach. Sie soll aber – und zwar der Einfachheit halber für den spinlosen Fall – wenigstens angedeutet werden. Durch Auflösen der Determinantengleichung (6.28) zu

$$(6.29) \quad (Q_0^2 D_0 \overline{D}_1 + D_1 \overline{D}_0) \cdot e^{i\theta} - (Q_0^2 D_1 \overline{D}_0 + D_0 \overline{D}_1) \cdot e^{-i\theta} + (Q_0^2 - 1) \cdot (D_0 \overline{D}_0 - D_1 \overline{D}_1) = 0$$

erkennt man, dass die Zylinderfunktionen stets als Zweier-Produkte mit Argumenten entgegengesetzten Vorzeichens auftreten. Dabei verschwinden die Produkte mit gleichen Indices, also $D_0 \overline{D}_0$ und $D_1 \overline{D}_1$ wie $1/\eta_{gr}$; die gemischten Produkte hingegen, je nachdem welcher Grenzfall betrachtet wird, entweder wie $1/\eta_{gr}^2$ oder aber sie gehen gegen einen konstanten, das heißt von η_{gr} unabhängigen Wert:

$$(6.30) \quad \lim_{\eta_{gr} \mapsto +\infty} D_0 \overline{D}_1 = \lim_{\eta_{gr} \mapsto -\infty} D_1 \overline{D}_0 = \frac{\sqrt{2\pi\nu_0}}{\Gamma(1-\nu_0)}$$

Damit auch dieser verschwindet, die Gleichung (6.29) also identisch erfüllt wird, muss $\nu_0 = N \in \mathbb{N}_0$ sein; dies ergibt gerade die Energien der Landau-Niveaus. Denn in den Außenbereichen, wo die Zylinderfunktionen und ν_0 als deren Index allein auftreten, ist $V_0 = A_0 = \Delta = 0$; eine Abweichung könnte allenfalls noch der Zeeman-Term [siehe (3.21f)] bewirken, der jedoch vernachlässigt wurde. Praktisch werden die Landau-Niveaus (3.43) schon ab $|k_x \cdot l_B| \gtrsim 1 + \nu_0$ erreicht.

Für den antiparallelen Fall I ist hingegen zu berücksichtigen, dass der Quotient D_1/D_0 in (3.87) sich für beide Grenzübergänge $k_x \propto \eta_{gr} \mapsto \pm\infty$ völlig verschieden verhält: Für $\eta_{gr} \mapsto +\infty$ geht er unabhängig von ν_0 immer gegen Null, sodass beliebige Energien möglich sind. Es muss nur eine Art Resonanzbedingung $2q_{y,0}L + \theta = \pi k$ mit einer ganzen Zahl $k \in \mathbb{Z}$ erfüllt sein; in führender Ordnung muss also $E^2 \sim k_x^2$ übereinstimmen. Andererseits geht D_1/D_0 für $\eta_{gr} \mapsto -\infty$ nur dann gegen Null, wenn wieder $\nu_0 = N \in \mathbb{N}_0$ ist. Man beachte, dass bei beschränkter Energie (3.43) und unbegrenzt nach unten wachsendem k_x die Größen $q_{y,0}$ und θ rein imaginär werden.

Der symmetrische Fall (Konfiguration III) soll hier allgemeiner als im Hauptteil behandelt werden, und zwar insofern, als dass die magnetische Feldstärke nicht überall vom gleichen Betrage zu sein hat, sondern im mittleren Bereich – bei entgegengesetzter Polung – von beliebiger Stärke $B_M =: \beta B$ sein kann, was durch einen

dimensionslosen Faktor β erfasst werde. Statt (3.89) ist dann das Vektorpotential

$$(6.31) \quad A_x(y) = -B \cdot \begin{cases} y + (1 + \beta)L & \text{für } y < -L \\ -\beta y & \text{'' } y \in [-L; +L] \\ y - (1 + \beta)L & \text{'' } y > +L \end{cases}$$

zu benutzen und an Wellenfunktionen die folgende Auswahl: in den Außenbereichen wieder die Funktionen (6.14) und (6.12) mit dem Argument $\eta = \eta_{+B} := \sqrt{2B} \cdot (y - y_1 - \frac{k_x}{B})$, wobei für $y < -L$ die Konstante $y_1 = -(1 + \beta)L$ [in (6.14)], für $y > +L$ hingegen $y_3 = +(1 + \beta)L$ [in (6.12)] zu wählen ist, und im mittleren Bereich die vier Funktionen der Matrix $\Omega_{SOAS-B}(y)$, siehe Gleichung (6.20), mit dem Argument $\eta = \eta_{-B} := \sqrt{2\beta B} \cdot (y - \frac{A_0 - k_x}{\beta B})$. Aufgrund der verschiedenen starken Magnetfelder sind an den beiden Bereichsgrenzen insgesamt vier verschiedene Werte für η auseinanderzuhalten, die in die Stetigkeitsbedingungen eingehen, und zwar $\eta_{B,\pm L} := -\sqrt{2B} \cdot (\frac{k_x}{B} \pm \beta L)$ und $\eta_{\beta,\pm L} := \eta_{-B}(y = \pm L)$. Mit den Abkürzungen $D_0^T := D_{\nu_0}(-\eta_{B,-L})$ und $D_1^T := \tilde{\nu}_0 \cdot D_{\nu_0-1}(-\eta_{B,-L})$ sowie $\overline{D}_0^T := D_{\nu_0}(\eta_{B,+L})$ und $\overline{D}_1^T := \tilde{\nu}_0 \cdot D_{\nu_0-1}(\eta_{B,+L})$ ergibt sich die Dispersion $E(k_x)$ im Prinzip aus folgender Determinantengleichung:

$$(6.32) \quad \det \begin{pmatrix} \tilde{\nu}_- D_1^T \cdot D_{p^+}(\eta_{\beta,-L}) - D_0^T \cdot D_{p^++1}(\eta_{\beta,-L}) & \dots \\ p^+ D_1^T \cdot D_{p^+-1}(\eta_{\beta,-L}) - \tilde{\nu}_- D_0^T \cdot D_{p^+}(\eta_{\beta,-L}) & \dots \\ \tilde{\nu}_- \overline{D}_1^T \cdot D_{p^+}(\eta_{\beta,+L}) + \overline{D}_0^T \cdot D_{p^++1}(\eta_{\beta,+L}) & \dots \\ p^+ \overline{D}_1^T \cdot D_{p^+-1}(\eta_{\beta,+L}) + \tilde{\nu}_- \overline{D}_0^T \cdot D_{p^+}(\eta_{\beta,+L}) & \dots \\ \tilde{\nu}_- D_1^T \cdot D_{-(p^++1)}(-i\eta_{\beta,-L}) + i(p^+ + 1) D_0^T \cdot D_{-(p^++2)}(-i\eta_{\beta,-L}) & \dots \\ D_1^T \cdot D_{-p^+}(-i\eta_{\beta,-L}) + i\tilde{\nu}_- D_0^T \cdot D_{-(p^++1)}(-i\eta_{\beta,-L}) & \dots \\ \tilde{\nu}_- \overline{D}_1^T \cdot D_{-(p^++1)}(-i\eta_{\beta,+L}) - i(p^+ + 1) \overline{D}_0^T \cdot D_{-(p^++2)}(-i\eta_{\beta,+L}) & \dots \\ \overline{D}_1^T \cdot D_{-p^+}(-i\eta_{\beta,+L}) - i\tilde{\nu}_- \overline{D}_0^T \cdot D_{-(p^++1)}(-i\eta_{\beta,+L}) & \dots \end{pmatrix} = 0$$

Der Übersichtlichkeit halber wurden die zweite und vierte Spalte nicht ausgeschrieben. Genau wie in Gleichung (6.20) selbst muss hier lediglich die Ersetzung $p^+ \mapsto p^-$ vorgenommen werden.

Leider scheint die Berechnung in Mathematica (Version 7) insofern nicht ganz unproblematisch zu sein, als in den mit ihrer Hilfe sich ergebenden Lösungen für E ein Imaginärteil der Größenordnung 10^{-2} mit enthalten ist, der einer physikalischen Grundlage (zerfallende Zustände) vollkommen entbehrt. Deshalb wird von der im Zusammenhang mit den Gleichungen (6.6) und (6.7) angedeuteten Möglichkeit Gebrauch gemacht, und es ergibt sich stattdessen

$$\det \begin{pmatrix} \tilde{\nu}_- D_1^T \cdot D_{p^+}(\eta_{\beta,-L}) - D_0^T \cdot D_{p^++1}(\eta_{\beta,-L}) & \dots \\ (\nu - p^+ - 1) [p^+ D_1^T \cdot D_{p^+-1}(\eta_{\beta,-L}) - \tilde{\nu}_- D_0^T \cdot D_{p^+}(\eta_{\beta,-L})] & \dots \\ \tilde{\nu}_- \overline{D}_1^T \cdot D_{p^+}(\eta_{\beta,+L}) + \overline{D}_0^T \cdot D_{p^++1}(\eta_{\beta,+L}) & \dots \\ (\nu - p^+ - 1) [p^+ \overline{D}_1^T \cdot D_{p^+-1}(\eta_{\beta,+L}) + \tilde{\nu}_- \overline{D}_0^T \cdot D_{p^+}(\eta_{\beta,+L})] & \dots \\ \tilde{\nu}_- D_1^T \cdot D_{p^+}(-\eta_{\beta,-L}) + D_0^T \cdot D_{p^++1}(-\eta_{\beta,-L}) & \dots \\ (p^+ + 1 - \nu) [p^+ D_1^T \cdot D_{p^+-1}(-\eta_{\beta,-L}) + \tilde{\nu}_- D_0^T \cdot D_{p^+}(-\eta_{\beta,-L})] & \dots \\ \tilde{\nu}_- \overline{D}_1^T \cdot D_{p^+}(-\eta_{\beta,+L}) - \overline{D}_0^T \cdot D_{p^++1}(-\eta_{\beta,+L}) & \dots \\ (p^+ + 1 - \nu) [p^+ \overline{D}_1^T \cdot D_{p^+-1}(-\eta_{\beta,+L}) - \tilde{\nu}_- \overline{D}_0^T \cdot D_{p^+}(-\eta_{\beta,+L})] & \dots \end{pmatrix} = 0.$$

Allerdings sind, wie dort bereits angedeutet, die Funktionen $D_p(\pm\eta)$ für ganzzahligen Index nicht mehr linear unabhängig voneinander, sodass sich waagrechte (Landau-ähnliche) Niveaus als Artefakte ergeben, die in die Darstellungen der numerischen Ergebnisse selbstverständlich nicht miteinfließen dürfen und deshalb aus den Datensätzen extrahiert wurden.

Die angegebene Methodik kann aber, da auf diesem Wege auch die Reproduktion der einfacheren Dispersionsrelation für den spinlosen Fall [73] ebenso sicher gelingt wie in den Fällen I und II, wo man sich dieses Kniffes nicht zu bedienen braucht, als wenn auch etwas mühsam, so doch unbedingt zuverlässig erachtet werden. Denn ohne Berücksichtigung des Spins und seiner Wechselwirkungen sowie für $\beta = 1$ und auch ohne die Einbeziehung einer mechanischen Verzerrung folgt

$$(6.33) \quad \begin{pmatrix} D_{\nu_0}^2(-\eta_-) - \nu_0 D_{\nu_0-1}^2(-\eta_-) & D_{\nu_0}(-\eta_-) D_{\nu_0}(\eta_-) + \nu_0 D_{\nu_0-1}(-\eta_-) D_{\nu_0-1}(\eta_-) \\ D_{\nu_0}(-\eta_+) D_{\nu_0}(\eta_+) + \nu_0 D_{\nu_0-1}(-\eta_+) D_{\nu_0-1}(\eta_+) & D_{\nu_0}^2(-\eta_+) - \nu_0 D_{\nu_0-1}^2(-\eta_+) \end{pmatrix}$$

als die zur Bestimmung von $E(k_x)$ maßgebliche Matrix, deren Determinante natürlich wieder zu verschwinden hat. Hierbei fand die Bezeichnung $\eta_{\pm} := \sqrt{2B} \cdot (L \pm \frac{k_x}{B})$ Verwendung; außerdem ist (6.17) statt (6.16) eingeflossen.

6.4. Ergänzungen zu Abschnitt 4.1

In Polarkoordinaten lautet die Eichtransformation (4.28) wie folgt:

$$(6.34) \quad A_r \mapsto A_r + \frac{\partial f}{\partial r}$$

$$(6.35) \quad A_\phi \mapsto A_\phi + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial f}{\partial \phi}$$

Dadurch ergäbe sich im Ausdruck (4.24) ein Zusatzterm

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{A} &= \iint r dr d\phi \cdot \exp(-iqr \cdot \sin(\phi - \Sigma)) \cdot \left[\left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) \cdot \cos(\phi - \Sigma) \right] - \dots \\ &\quad - \iint dr d\phi \cdot \exp(-iqr \cdot \sin(\phi - \Sigma)) \cdot \left[\left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \right) \cdot \sin(\phi - \Sigma) \right] \\ &= \int_0^{2\pi} [r \cdot f(r, \phi) \cdot \exp(-iqr \cdot \sin(\phi - \Sigma))]_0^\infty \cdot \cos(\phi - \Sigma) d\phi - \dots \\ &\quad - \int_0^\infty [f(r, \phi) \cdot \exp(-iqr \cdot \sin(\phi - \Sigma)) \cdot \sin(\phi - \Sigma)]_0^{2\pi} dr, \end{aligned}$$

der unter den angegebenen Bedingungen (4.30) und (4.31) aber identisch verschwindet, wie man nach den hier mittels partieller Integration vorgenommenen Umformungen sogleich erkennt, bei denen sich die verbleibenden, also noch zu integrierenden Terme gegenseitig wegheben.

Auch in kartesischen Koordinaten kann der Beweis in ganz ähnlicher Art geführt werden.

Unter vollkommen analogen Voraussetzungen, nämlich Eindeutigkeit des Winkels

$$(6.36) \quad f(r, \phi) \cdot g(r, \phi) \cdot A_\phi(r, \phi) = f(r, \phi + 2\pi) \cdot g(r, \phi + 2\pi) \cdot A_\phi(r, \phi + 2\pi)$$

sowie Verschwinden der beiden Grenzwerte

$$(6.37) \quad \lim_{r \rightarrow 0, \infty} (r \cdot f(r, \phi) \cdot g(r, \phi) \cdot A_r(r, \phi)) = 0$$

lässt sich zeigen, dass

$$(6.38) \quad \int_{r=0}^{\infty} \int_{\phi=0}^{2\pi} r dr d\phi \cdot f(r, \phi) \cdot \left(\nabla \vec{A}(r, \phi) + \vec{A}(r, \phi) \nabla \right) \cdot g(r, \phi) = \\ \int_{r=0}^{\infty} \int_{\phi=0}^{2\pi} r dr d\phi \cdot \vec{A}(r, \phi) \cdot \left(f(r, \phi) \nabla g(r, \phi) - g(r, \phi) \nabla f(r, \phi) \right)$$

gilt. Diese Umformung wird später (in den Ergänzungen zu Abschnitt 4.5) benötigt.

6.5. Ergänzungen zu Abschnitt 4.2

Im genannten und dem nachfolgenden Abschnitt werden des Öfteren Integrale der Form $\frac{1}{2\pi} \cdot \int_0^{2\pi} \sin^n(\theta/2) \cdot \exp(-4x \cdot \sin(\theta/2)) \cdot d\theta$ benötigt, welche vermittels der Substitution $\sin(\theta/2) = t$ in (4.48) übergehen. Sie lassen sich allesamt über hypergeometrische Funktionen ausdrücken; für die niedrigsten (geraden) Indizes, die hier genügen, ist

$$(6.39) \quad \widehat{F}_0(x) = {}_1F_2\left(\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 1; 4x^2\right) - \frac{8}{\pi} x \cdot {}_1F_2\left(1; \frac{3}{2}, \frac{3}{2}; 4x^2\right)$$

$$(6.40) \quad \widehat{F}_2(x) = \frac{1}{2} \cdot {}_1F_2\left(\frac{3}{2}; \frac{1}{2}, 2; 4x^2\right) - \frac{16}{3\pi} x \cdot {}_1F_2\left(2; \frac{3}{2}, \frac{5}{2}; 4x^2\right)$$

$$(6.41) \quad \widehat{F}_4(x) = \frac{3}{8} \cdot {}_1F_2\left(\frac{5}{2}; \frac{1}{2}, 3; 4x^2\right) - \frac{64}{15\pi} x \cdot {}_1F_2\left(3; \frac{3}{2}, \frac{7}{2}; 4x^2\right)$$

$$(6.42) \quad \widehat{F}_6(x) = \frac{5}{16} \cdot {}_1F_2\left(\frac{7}{2}; \frac{1}{2}, 4; 4x^2\right) - \frac{128}{35\pi} x \cdot {}_1F_2\left(4; \frac{3}{2}, \frac{9}{2}; 4x^2\right).$$

Es sind aber auch andere Darstellungen möglich, zum Beispiel über die modifizierten Bessel- und Struvefunktionen

$$(6.43) \quad I_0(4x) - L_0(4x) = \widehat{F}_0(x)$$

$$(6.44) \quad I_1(4x) - L_1(4x) = 4x \cdot \left\{ \widehat{F}_0(x) - \widehat{F}_2(x) \right\}$$

$$(6.45) \quad I_2(4x) - L_2(4x) = \frac{(4x)^2}{3} \cdot \left\{ \widehat{F}_0(x) - 2\widehat{F}_2(x) + \widehat{F}_4(x) \right\}$$

etc.

6.6. Ergänzungen zu Abschnitt 4.3

In ganz ähnlicher Weise wie die Streuung in erster Born-Näherung für ein- bzw. zweilagiges Graphen bereits in den Abschnitten 4.1 und 4.3 betrachtet wurde, lässt sich Selbige als Vergleichsstandard auch für den Schrödinger-Fall behandeln. Nach Ausführung der Peierls-Substitution (2.30) und mit dem Operator $\vec{p} = -i\nabla$ für den Impuls erfolgt die Zerlegung des Hamilton-Operators

$$(6.46) \quad H^S = \frac{1}{2m^*} \cdot \vec{p}^2$$

gemäß (4.1) in

$$(6.47) \quad H_0 = \frac{-1}{2m^*} \cdot \nabla^2$$

und

$$(6.48) \quad H_M = \frac{-i}{2m^*} \cdot \left(\nabla \vec{A} + \vec{A} \nabla \right).$$

Die in \vec{A} quadratischen Terme sind (aus dem gleichen Grunde wie zuvor) wieder fortgelassen worden, und auch die Nabla-Operatoren beziehen sich auf alles jeweils hinter ihnen Stehende.

Es ist zu beachten, dass im Schrödinger-Fall die Wellenfunktion kein Spinor mehr ist; statt (4.4) fungieren also einfach die laufenden Wellen $\Psi^{(0)} = \exp(i\vec{p}\vec{r})$ als die bekannten Eigenlösungen zu (6.47) mit der Energie (4.67). Aus demselben Grunde kann auch die Anwendung des Operators $(H_0 + E)$ auf den Ausdruck (4.10) entfallen, die der Diagonalisierung dessen linker Seite diene, und die Streuwelle berechnet sich aus

$$(6.49) \quad \Psi^{(1)}(\vec{r}) = - \iint d^2\vec{r}' \cdot G_E(\vec{r} - \vec{r}') \cdot H_M(\vec{r}') \Psi^{(0)}(\vec{r}').$$

Bis auf den Faktor $2m^*$, der sich hinterher wieder herauskürzt, ist die Green-Funktion mit (4.11) bzw. (4.13) identisch, und nach einer partiellen Integration, die nur den ersten Teil in (6.48) betrifft, wird die Streuamplitude zu

$$(6.50) \quad f^B(\theta) = -\sqrt{\frac{p}{2\pi}} \cdot \frac{(\vec{p}' + \vec{p}) \cdot \vec{A}_q}{2p}.$$

Unschwer erkennt man bereits jetzt, dass auch sie wieder durch die Projektion der Fourier-Transformierten \vec{A}_q auf die Richtung der Winkelhalbierenden Σ in Abb. 4.1a gegeben ist. Mittels einfacher Beziehungen für die Impulse

$$(6.51) \quad \vec{p} = p \cdot \begin{pmatrix} \cos \theta_p \\ \sin \theta_p \end{pmatrix} \quad \& \quad \vec{p}' = p \cdot \begin{pmatrix} \cos \theta_{p'} \\ \sin \theta_{p'} \end{pmatrix},$$

die der genannten Abbildung ohne Weiteres entnommen werden können, sowie den bekannten Additionstheoremen für die Winkelfunktionen folgt

$$(6.52) \quad (\vec{p}' + \vec{p}) \cdot \vec{A}_q = 2p \cdot \cos(\theta/2) \cdot \tilde{A}(\theta)$$

und damit für die Streuamplitude wieder die bereits im Haupttext als Gleichung (4.71) angegebene Form.

6.7. Ergänzungen zu Abschnitt 4.5

In diesem ergänzenden Abschnitt soll dargelegt werden, wie die Green-Funktion (4.106) auszuwerten ist, und zwar, der besseren Übersichtlichkeit halber, zunächst für den Schrödinger-Fall.

Anders als im Haupttext geschildert, benötigt dieser zu seiner Berechnung nur *eines* der beiden Energie-Vorzeichen – es sei hier das positive, welches einer eben-solchen Masse $m^* > 0$ entspricht. Über die Schreibweise $|m^*|$ wurde aber die andere Möglichkeit im Weiteren bereits vorausschauend berücksichtigt.

Da als Wellenfunktionen hierbei natürlich nur die oberen Komponenten (und zwar ohne den Normierungsfaktor $1/\sqrt{2}$) von (4.91) fungieren, wird

$$(6.53) \quad G_E(\vec{r}, \vec{r}') = 2|m^*| \cdot \int_0^\infty \frac{kdk}{2\pi} \cdot \sum_m \frac{\exp(im(\phi - \phi')) \cdot J_{|m+\alpha|}(kr) \cdot J_{|m+\alpha|}(kr')}{k^2 - (p+i0)^2}.$$

Dem Ziele dienend, am Ende der Berechnung einen Faktor $\exp(ipr)$ zu erhalten, wie er der gestreuten, also auslaufenden Welle stets zukommt, ist es geboten, die *erste* der beiden hier auftretenden Besselfunktionen J gemäß

$$(6.54) \quad J_\eta(kr) = \frac{1}{2} \left(H_\eta^{(1)}(kr) + H_\eta^{(2)}(kr) \right)$$

zu zerlegen. Jede der beiden (neuen) Hankel-Funktionen $H^{(1,2)}$ bestimmt wegen $r > r'$ (siehe Abb. 4.1b) über ihr im Vergleich zur verbliebenen Besselfunktion größeres Argument auch das Konvergenzverhalten des gesamten Integranden im Unendlichen. Ähnlich wie bei (4.13) wird nämlich jetzt wieder eine Auswertung des Integrals mittels des Cauchy'schen Integralsatzes vorgenommen. Der Weg wird dabei jeweils über einen Viertelkreis und die zugehörigen halbunendlichen Achsenabschnitte geführt – allerdings für die beiden Hankel-Funktionen in bewusst unterschiedlicher Weise, und zwar für diejenige erster Art im ersten Quadranten, also mit einem positivem Imaginär- und ebensolchem Realteil, während es für die Hankel-Funktion zweiter Art der vierte Quadrant sein soll mit seinem negativen Imaginäranteil; wegen $\left\{H_{\eta}^{(2)}(kr)\right\}^* = H_{\eta}^{(1)}(kr)$ kompensieren die beiden senkrechten Abschnitte dann einander. Außerdem bleibt bei der hier durch die Kausalität [für $E > 0$ in (4.67)] vorgeschriebenen Wahl des Konvergenzparameters [$+i0$ in (6.53)] der untere Viertelkreis vollkommen leer, sodass im Ergebnis für die Green-Funktion

$$(6.55) \quad G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{i}{2} |m^*| \cdot \sum_m \exp(im(\phi - \phi')) \cdot H_{|m+\alpha|}^{(1)}(pr) \cdot J_{|m+\alpha|}(pr')$$

nunmehr die Hankel-Funktion erster Art allein noch enthalten ist. Mit ihrer Asymptotik

$$(6.56) \quad H_{\eta}^{(1)}(pr) \mapsto 2(-i)^{\eta+1} \cdot \frac{\exp(ipr)}{\sqrt{-2\pi ipr}}$$

für große r nähert sich

$$(6.57) \quad G_E(\vec{r}, \vec{r}') \mapsto |m^*| \cdot \frac{\exp(ipr)}{\sqrt{-2\pi ipr}} \cdot \sum_m (-i)^{|m+\alpha|} \cdot \exp(im(\phi - \phi')) \cdot J_{|m+\alpha|}(pr').$$

Zusammen mit dem Störoperator (6.48) kann über (4.105) die Streuwelle berechnet werden, die dann – selbstverständlich bis auf den jetzt entbehrlichen Spinor $u_{p'}$ – von der Form (4.15) ist. Dabei wird die Streuamplitude durch den etwas länglichen Ausdruck

$$(6.58) \quad f^{(R)}(\theta) = \frac{+i}{2\sqrt{2\pi p}} \cdot \sum_{m,\mu} \exp(im\theta) \cdot (-1)^{\mu} (-i)^{|m+\alpha|+|\mu+\alpha|} \cdot \int_{r=0}^{\infty} \int_{\phi=0}^{2\pi} r dr d\phi \cdot \dots$$

$$\left[\exp(-im\phi) \cdot J_{|m+\alpha|}(pr) \right] \left\{ \nabla \overrightarrow{A^{(R)}} + \overrightarrow{A^{(R)}} \nabla \right\} \left[\exp(i\mu\phi) \cdot J_{|\mu+\alpha|}(pr) \right]$$

gegeben, der über (6.38), da die dort angegebenen Voraussetzungen für realistische Potentiale [also zum Beispiel für (4.43), für (4.39) hingegen erst nach einem entsprechenden Grenzübergang] erfüllt sind, so umgeformt werden kann, dass die Nabla-Operatoren nicht mehr auf das Restpotential wirken – und im isotropen Fall (4.26), der hier vor Allem betrachtet wird, auch effektiv nicht mehr auf die Besselfunktionen. Damit ergibt sich

$$(6.59) \quad f_{iso}^{(R)}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi p}} \cdot \sum_{\mu} i\mu \cdot \exp(i\mu\theta) \cdot (-1)^{\mu+|\mu+\alpha|} \cdot 2\pi i \cdot \int_0^{\infty} A_{\phi}^{(R)}(r) \cdot J_{|\mu+\alpha|}^2(pr) \cdot dr.$$

Für $\alpha = 0$ wird daraus, was als Kontrolle und Bestätigung anzusehen ist, über das nach Differentiation $\frac{\partial}{\partial \theta}$ anwendbare Additionstheorem (4.107) für die Zylinderfunktionen wieder genau die bereits bekannte Form (4.71) der Streuamplitude erreicht.

Im Dirac-Weyl-Fall verläuft die Auswertung des Integrals in der Green-Funktion (4.106) ganz analog, nur müssen jetzt, wie schon im Haupttext und im dortigen Zusammenhange geschildert, beide Energievorzeichen Berücksichtigung finden. Die sich dadurch ergebenden, einander entsprechenden Terme auf den gemeinsamen Nenner zu bringen, ist möglich, aber nicht unabdingbar. In jedem Fall erhält man als Ergebnis für die Green-Funktion

$$G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{\pm i p}{4} \cdot \sum_m \left(\begin{array}{c} \exp(im\phi) \cdot H_{|m+\alpha|}^{(1)}(pr) \\ \pm i \delta_m \cdot \exp(i(m+1)\phi) \cdot H_{|m+\alpha|+\delta_m}^{(1)}(pr) \end{array} \right) \cdot \dots$$

$$\left(\begin{array}{c} \exp(-im\phi') \cdot J_{|m+\alpha|}(pr') \\ \mp i \delta_m \cdot \exp(-i(m+1)\phi') \cdot J_{|m+\alpha|+\delta_m}(pr') \end{array} \right).$$

Deren asymptotisches Verhalten wurde bereits im Hauptteil genannt, siehe (4.108), und im Anschluss daran verwendet.

Literaturverzeichnis

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, and A.A. Firsov: „Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films“, *Science* 306, 666–669 (2004)
- [2] L.D. Landau: „Zur Theorie der Phasenumwandlungen II“, *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion* Vol. 11, pp. 26-35 (1937)
- [3] R.E. Peierls: „Quelques propriétés typiques des corps solides“, *Annales de l'institut Henri Poincaré* Vol. 5, pp. 177-222 (1935)
- [4] P.R. Wallace: „The Band Theory of Graphite“, *Phys. Rev.* 71, 622 (1947)
- [5] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A.A. Firsov: „Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene“, *Nature* 438, 197 (2005)
- [6] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H.L. Stormer, and P. Kim: „Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene“, *Nature* 438, 201 (2005)
- [7] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, and A.K. Geim: „The electronic properties of graphene“, *Rev. Mod. Phys.* 81, 109 (2009)
- [8] A.K. Geim and K.S. Novoselov: „Graphene: Carbon's New Face – The Nobel Prize in Physics 2010“, abrufbar im Internet als „PPT-10“
- [9] Gordon E. Moore: „Cramming More Components onto Integrated Circuits“, *Electronics*, pp. 114–117, April 19, 1965
- [10] O. Klein: „Die Reflexion von Elektronen an einem Potentialsprung nach der relativistischen Dynamik von Dirac“, *Zeitschrift für Physik* 53 (3–4): 157-165 (1929)
- [11] M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov, and A.K. Geim: „Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene“, *Nature Physics* 2, 620 - 625 (2006)
- [12] N. Stander, B. Huard, and D. Goldhaber-Gordon: „Evidence for Klein Tunneling in Graphene p-n Junctions“, *Phys. Rev. Lett.* 102, 026807 (2009)
- [13] Melinda Y. Han, Barbaros Özyilmaz, Yuanbo Zhang, and Philip Kim: „Energy Band-Gap Engineering of Graphene Nanoribbons“, *Phys. Rev. Lett.* 98, 206805 (2007)
- [14] B. Partoens and F.M. Peeters: „From graphene to graphite: Electronic structure around the K point“, *Phys. Rev. B* 74, 075404 (2006)
- [15] A.A. Avetisyan, B. Partoens, and F.M. Peeters: „Electric field tuning of the band gap in graphene multilayers“, *Phys. Rev. B* 79, 035421 (2009)
- [16] Jeroen B. Oostinga, Hubert B. Heersche, Xinglan Liu, Alberto F. Morpurgo, and Lieven M.K. Vandersypen: „Gate-induced insulating state in bilayer graphene devices“, *Nature Materials* 7, 151 – 157 (2007)
- [17] Eduardo V. Castro, K.S. Novoselov, S.V. Morozov, N.M.R. Peres, J.M.B. Lopes dos Santos, Johan Nilsson, F. Guinea, A.K. Geim, and A.H. Castro Neto:

- „Biased Bilayer Graphene: Semiconductor with a Gap Tunable by the Electric Field Effect“, *Phys. Rev. Lett.* 99, 216802 (2007)
- [18] Conan Weeks, Jun Hu, Jason Alicea, Marcel Franz, and Ruqian Wu: „Engineering a robust quantum spin Hall state in graphene via adatom deposition“, *Phys. Rev. X* 1, 021001 (2011)
- [19] A. de Martino, L. dell’Anna, and R. Egger: „Magnetic Confinement of Massless Dirac Fermions in Graphene“, *Phys. Rev. Lett.* 98, 066802 (2007)
- [20] D.C. Elias, R.R. Nair, T.M.G. Mohiuddin, S.V. Morozov, P. Blake, M.P. Halsall, A.C. Ferrari, D.W. Boukhvalov, M.I. Katsnelson, A.K. Geim, and K.S. Novoselov: „Control of Graphene’s Properties by Reversible Hydrogenation: Evidence for Graphane“, *Science* 323 (5914): 610-613 (2009)
- [21] Jorge O. Sofo, Ajay S. Chaudhari, and Greg D. Barber: „Graphane: A two-dimensional hydrocarbon“, *Phys. Rev. B* 75, 153401 (2007)
- [22] D. Bercioux and A. de Martino: „Spin-resolved scattering through spin-orbit nanostructures in graphene“, *Phys. Rev. B* 81, 165410 (2010)
- [23] L. Lenz and D. Bercioux: „Dirac-Weyl electrons in a periodic spin-orbit potential“, *EPL* 96 27006 (2011)
- [24] Emmanuel I. Rashba: „Graphene with structure-induced spin-orbit coupling: Spin-polarized states, spin zero modes, and quantum Hall effect“, *Phys. Rev. B* 79, 161409R (2009)
- [25] Daniel Huertas-Hernando, F. Guinea, and Arne Brataas: „Spin-Orbit-Mediated Spin Relaxation in Graphene“, *Phys. Rev. Lett.* 103, 146801 (2009)
- [26] D.S. Novikov: „Elastic scattering theory and transport in graphene“, *Phys. Rev. B* 76, 245435 (2007)
- [27] Alessandro de Martino, Artur Hütten, and Reinhold Egger: „Landau levels, edge states, and strained magnetic waveguides in graphene monolayers with enhanced spin-orbit interaction“, *Phys. Rev. B* 84, 155420 (2011)
- [28] Alexander Zazunov, Arijit Kundu, Artur Hütten, and Reinhold Egger: „Magnetic scattering of Dirac fermions in topological insulators and graphene“, *Phys. Rev. B* 82, 155431 (2010)
- [29] Chao Zhou, Sihao Chen, Jianzhong Lou, Jihu Wang, Qiujie Yang, Chuanrong Liu, Dapeng Huang, and Tonghe Zhu: „Graphene’s cousin: the present and future of graphane“, *Nanoscale Research Letters* 2014, 9:26
- [30] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, and J. Hone: „Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene“, *Science* 321 (5887): 385–388 (2008)
- [31] R. Saito, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus: „Electronic structure of graphene tubules based on C_{60} “, *Phys. Rev. B* 46, 1804 (1992)
- [32] K.S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S.V. Morozov, H.L. Stormer, U. Zeitler, J.C. Maan, G.S. Boebinger, P. Kim, und A.K. Geim: „Room-Temperature Quantum Hall Effect in Graphene“, *Science* 315, 1379 (2007)
- [33] A.S. Dawydow: *Quantenmechanik*, 5. Auflage, Berlin 1978, insbes. §§ 63f sowie § 66
- [34] L.D. Landau und E.M. Lifschitz: *Lehrbuch der theoretischen Physik, Band IV Relativistische Quantentheorie*, 4. Aufl., Berlin 1980, insbes. §§ 32f
- [35] Fritz Sauter: „Über das Verhalten eines Elektrons im homogenen elektrischen Feld nach der relativistischen Theorie Diracs“, *Zeitschrift für Physik* 69 (11–12): 742-764 (1931)

- [36] Thomas Heinzel: *Mesoscopic Electronics in Solid State Nanostructures*, 2. Auflage, Wiley 2007: Kapitel 6 und 7
- [37] Harald Ibach, Hans Lüth: *Festkörperphysik*, 2. Auflage, Springer 1988: Abschnitt 12.1
- [38] Charles Kittel: *Einführung in die Festkörperphysik*, 5. Auflage (der dt. Übers.), Oldenbourg 1980: Kapitel 8
- [39] J. Serrano, M. Cardona, and T. Ruf: „Spin-orbit splitting in diamond: excitons and acceptor related states“, *Solid St. Commun.* 113, 411 (2000)
- [40] C.L. Kane and E.J. Mele: „Quantum Spin Hall Effect in Graphene“, *Phys. Rev. Lett.* 95, 226801 (2005)
- [41] Y.A. Bychkov and E.I. Rashba, *J. Phys. C* 17, 6039 (1984)
- [42] Serafin Fraga, Jacek Karwowski, and K.M.S. Saxena: *Handbook of Atomic Data. Physical Sciences Data*, Vol. 5, Elsevier, Amsterdam 1976: Seite 425
- [43] J.W. McClure: „Theory of Diamagnetism of Graphite“, *Phys. Rev.* 119, 606 (1960)
- [44] F. Guinea „Spin-orbit coupling in a graphene bilayer and in graphite“, arXiv:1003.1618v1 & *New Journal of Physics* 12, 083063 (2010)
- [45] Hongki Min, J.E. Hill, N.A. Sinitsyn, B.R. Sahu, Leonard Kleinman, and A.H. MacDonald: „Intrinsic and Rashba spin-orbit interactions in graphene sheets“. *Phys. Rev. B* 74, 165310 (2006)
- [46] Yugui Yao, Fei Ye, Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, and Zhong Fang: „Spin-orbit gap of graphene: First-principles calculations“, *Physical Review B* 75, 041401R (2007)
- [47] Daniel Huertas-Hernando, F. Guinea, and Arne Brataas: „Spin-orbit coupling in curved graphene, fullerenes, nanotubes, and nanotube caps“, *Phys. Rev. B* 74, 155426 (2006)
- [48] M. Gmitra, S. Konschuh, C. Ertler, C. Ambrosch-Draxl, and J. Fabian: „Band-structure topologies of graphene: Spin-orbit coupling effects from first principles“, *Phys. Rev. B* 80 235431 (2009)
- [49] Artur Hütten: „Magnetotransport in Graphen-Filmen“, Diplomarbeit HHU Düsseldorf (2009)
- [50] S.V. Morozov, K.S. Novoselov, M.I. Katsnelson, F. Schedin, L.A. Ponomarenko, D. Jiang, and A.K. Geim: „Strong Suppression of Weak Localization in Graphene“, *Phys. Rev. Lett.* 97, 016801 (2006)
- [51] K.I. Bolotin, K.J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, and H.L. Stormer: „Ultrahigh electron mobility in suspended graphene“, *Solid State Communications* 146, 351-355 (2008)
- [52] Z.Y. Li, Z.Q. Yang, S. Qiao, J. Hu, and R.Q. Wu: „Spinorbit splitting in graphene on metallic substrates“, *J. Phys.: Condens. Matter* 23, 225502 (2011)
- [53] A. Varykhalov, J. Sanchez-Barriga, A.M. Shikin, C. Biswas, E. Vescovo, A. Rybkin, D. Marchenko, and O. Rader „Electronic and Magnetic Properties of Quasifreestanding Graphene on Ni“, *Phys. Rev. Lett.* 101, 157601 (2008)
- [54] Samir Abdelouahed, A. Ernst, J. Henk, I.V. Maznichenko, and I. Mertig: „Spin-split electronic states in graphene: Effects due to lattice deformation, Rashba effect, and adatoms by first principles“, *Phys. Rev. B* 82, 125424 (2010)
- [55] Zhenhua Qiao, Shengyuan A. Yang, Wanxiang Feng, Wang-Kong Tse, Jun Ding, Yugui Yao, Jian Wang, and Qian Niu: „Quantum anomalous Hall effect

- in graphene from Rashba and exchange effects“, *Phys. Rev. B* 82, 161414R (2010)
- [56] A.H. Castro Neto and F. Guinea: „Impurity-Induced Spin-Orbit Coupling in Graphene“ *Phys. Rev. Lett.* 103, 026804 (2009) bzw. arXiv:0902.3244v1
- [57] Jayakumar Balakrishnan, Gavin Kok Wai Koon, Manu Jaiswal, A.H. Castro Neto, and Barbaros Özyilmaz: „Colossal enhancement of spin–orbit coupling in weakly hydrogenated graphene“, *Nature Physics* 9, 284–287 (2013)
- [58] Hidekatsu Suzuura and Tsuneya Ando: „Phonons and electron-phonon scattering in carbon nanotubes“, *Phys. Rev. B* 65, 235412 (2002)
- [59] J.L. Mañes: „Symmetry-based approach to electron-phonon interactions in graphene“, *Phys. Rev. B* 76, 045430 (2007)
- [60] L.D. Landau und E.M. Lifschitz: *Lehrbuch der theoretischen Physik, Band VII Elastizitätstheorie*, 5. Aufl., Berlin 1983, insbes. § 1
- [61] Eun-Ah Kim and A.H. Castro Neto: „Graphene as an electronic membrane“, *Europhys. Lett.* 84, 57007 (2008)
- [62] Diego Rainis, Fabio Taddei, Marco Polini, Gladys León, Francisco Guinea, and Vladimir I. Fal’ko: „Gauge fields and interferometry in folded graphene“, *Phys. Rev. B* 83, 165403 (2011)
- [63] Shusuke Ono and Ko Sugihara: „Theory of the Transport Properties in Graphite“, *J. Phys. Soc. Japan*, 21, 861
- [64] Ko Sugihara: „Thermoelectric power of graphite intercalation compounds“, *Phys. Rev. B* 28, 2157 (1983)
- [65] Seon-Myeong Choi, Seung-Hoon Jhi, and Young-Woo Son: „Effects of strain on electronic properties of graphene“, *Phys. Rev. B* 81, 081407R (2010)
- [66] M.M. Fogler, F. Guinea, and M.I. Katsnelson: „Pseudomagnetic Fields and Ballistic Transport in a Suspended Graphene Sheet“, *Phys. Rev. Lett.* 101, 226804 (2008)
- [67] F. Guinea, M.I. Katsnelson, and A.K. Geim: „Energy gaps and a zero-field quantum Hall effect in graphene by strain engineering“, *Nature Physics* 6, 30 – 33 (2010)
- [68] Gradstein, Ryshik: *Summen-, Produkt- und Integraltafeln, deutsch-englische Neuauflage*, Moskau / Frankfurt & Thun 1981, insbes. Abschnitt 9.24-9.25
- [69] Dmitry A. Abanin, Patrick A. Lee, and Leonid S. Levitov: „Spin-Filtered Edge States and Quantum Hall Effect in Graphene“, *Phys. Rev. Lett.* 96, 176803 (2006)
- [70] Luis Brey and H.A. Fertig: „Edge states and the quantized Hall effect in graphene“, *Phys. Rev. B* 73, 195408 (2006)
- [71] Markus König, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Taylor Hughes, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang: „The Quantum Spin Hall Effect: Theory and Experiment“, *J. Phys. Soc. Jpn.* 77, 031007 (2008)
- [72] Yunyou Yang, Zhong Xu, L. Sheng, Baigeng Wang, D.Y. Xing, and D.N. Sheng: „Time-Reversal-Symmetry-Broken Quantum Spin Hall Effect“, *Phys. Rev. Lett.* 107, 066602 (2011)
- [73] T.K. Ghosh, A. de Martino, W. Häusler, L. Dell’Anna, and R. Egger: „Conductance quantization and snake states in graphene magnetic waveguides“, *Phys. Rev. B* 77, 081404R (2008)
- [74] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin: „*Solid State Physics*“, Holt, Rinehart & Winston, 1976: Anhang E

- [75] A.K. Geim and K.S. Novoselov: „The Rise of Graphene“, *Nature Materials* 6, 183–191 (2007)
- [76] K.S. Novoselov, E. McCann, S.V. Morozov, V.I. Fal’ko, M.I. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin, and A.K. Geim: „Unconventional quantum Hall effect and Berry’s phase of 2π in bilayer graphene“, *Nature Physics* 2, 177 - 180 (2006)
- [77] Edward McCann and Vladimir I. Fal’ko: „Landau-Level Degeneracy and Quantum Hall Effect in a Graphite Bilayer“, *Phys. Rev. Lett.* 96, 086805 (2006)
- [78] Yakir Aharonov and David Bohm: „Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory“, *Phys. Rev.* 115, 485 (1959)
- [79] S. Olariu and I. Iovitzu Popescu: „The quantum effects of electromagnetic fluxes“, *Rev. Mod. Phys.* 57, 339 (1985)
- [80] N.F. Mott and E.A. Davis: „Electronic Processes in Non-Crystalline Materials“, 2nd ed. Clarendon, Oxford 1979
- [81] Nikolaos Tombros, Csaba Jozsa, Mihaita Popinciuc, Harry T. Jonkman, and Bart J. van Wees: „Electronic spin transport and spin precession in single graphene layers at room temperature“, *Nature* 448, 571 (2007)

Danksagung

Zuvörderst herzlich danken möchte ich an dieser Stelle, nicht zuletzt auch für die Themenstellung, meinem verehrten Professor, Herrn Prof. Dr. Reinhold Egger, der mir Gelegenheit gab, diese Arbeit durchzuführen, und mich immer wieder anspornte, sowie Herrn Dr. Alessandro de Martino, der mich auf die Idee brachte, die Spin-Bahn-Wechselwirkung auch in Wellenleitern zu betrachten, diesbezügliche Ausarbeitungen kontrollierte und mit nützlichen Diskussionen zu deren Gelingen beitrug.

Desweiteren bedanke ich mich bei Herrn Stephan Plugge, der meine Skizzen zu Abb. 4.1 in ein Computerbild verwandelte, sowie allen anderen Mitarbeitern des Instituts für die angenehme Arbeitsatmosphäre.

Erklärung

Die hier vorgelegte Dissertation habe ich eigenständig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt. Die Dissertation wurde in der vorgelegten oder ähnlicher Form noch bei keiner anderen Institution eingereicht. Ich habe bisher keine erfolglosen Promotionsversuche unternommen.

Düsseldorf, den 8. Juni 2014