

Masterarbeit  
zur Erlangung des akademischen Grades  
Master of Science

# Dirac-Weyl Quasiteilchen in externen Feldern

vorgelegt von:  
Alexander Filusch  
geboren am 31.07.1995 in Strausberg

1. Gutachter: Prof. Dr. Fehske

2. Gutachter: Prof. Dr. Schneider

Universität Greifswald  
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät  
Institut für Physik

03.09.2019



# Inhaltsverzeichnis

<b>Motivation</b>	<b>5</b>
<b>1. Das <math>\alpha</math>-<math>\mathcal{T}_3</math> Gitter</b>	<b>9</b>
1.1. Das Tight-Binding-Modell und die Bandstruktur . . . . .	9
1.2. Dirac-Weyl Quasiteilchen . . . . .	12
1.2.1. Grenzfälle des $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$ Gitters . . . . .	13
1.2.2. Wellenfunktionen eines freien Dirac-Weyl Quasiteilchens . . . . .	14
1.2.3. Massive Dirac-Weyl Quasiteilchen . . . . .	15
1.3. Stetigkeit der Wellenfunktion . . . . .	16
<b>2. Dirac-Weyl Quasiteilchen in magnetischen Feldern</b>	<b>19</b>
2.1. Herleitung der Berry Phase und Anwendung auf das $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$ Gitter . . . . .	19
2.2. $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$ Gitter im konstanten Magnetfeld — Landau-Level . . . . .	21
2.3. Die Randbedingung unendlicher Masse . . . . .	23
2.3.1. Herleitung der Randbedingung . . . . .	24
2.3.2. Bestimmung von $\Gamma$ über die Lösung eines Streuproblems . . . . .	26
2.4. Analytische Berechnung des Energiespektrums eines isolierten $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$ Dots unter Einfluss eines senkrechten Magnetfeldes . . . . .	29
2.4.1. Energiespektren für $M = \pm U$ . . . . .	32
2.4.2. Energiespektren für $M = \tau S_z$ . . . . .	35
2.4.3. Valley-Entartung . . . . .	36
<b>3. Dirac-Weyl Quasiteilchen in elektrischen Feldern</b>	<b>39</b>
3.1. Streuung an planaren Barrieren . . . . .	39
3.2. Streuung an zirkularen Barrieren . . . . .	43
3.2.1. Berechnung der Streugrößen . . . . .	47
3.2.2. Charakterisierung des Streuverhaltens . . . . .	49
3.2.3. Winkelabhängigkeit der Stromdichte im Fernfeld . . . . .	54
3.3. Streuung an oszillierenden zirkularen Barrieren . . . . .	58
3.3.1. Berechnung der Wellenfunktionen mittels Floquet-Theorie . . . . .	58
3.3.2. Bestimmung der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten . . . . .	61
3.3.3. Berechnung der Streugrößen . . . . .	62
3.3.4. Streuverhalten und Abstrahlcharakteristik . . . . .	66
<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>73</b>



# Motivation

Seit der Entdeckung von Graphen [1, 2] wurden zweidimensionale Meta-Materialien aufgrund ihres technologischen Potentials und ihrer besonderen Bandstruktur intensiv untersucht. Die lineare Energie-Dispersion (elektronischer) Anregungen in diesen Materialien erlaubt die Detektion einer Vielzahl von ultrarelativistischen Phänomenen, die in gewöhnlichen Materialien wegen der Bandlücke nicht zugänglich sind. Grundlage der Beschreibung im niederenergetischen Grenzfall bildet die masselose Dirac-Weyl Gleichung, welche für Teilchen mit halb- und ganzzahligem Pseudospin formuliert werden kann. Die Topologie der Bandstruktur wird nun wesentlich durch den Pseudospin der Dirac-Weyl Quasiteilchen bestimmt: Während für Graphen-Elektronen mit Pseudospin-1/2 lediglich die lineare Dispersion resultiert, wird für Dirac-Weyl Teilchen mit Pseudospin-1 in einem  $\mathcal{T}_3$  bzw. Dice-Gitter die Bandstruktur durch ein flaches, völlig dispersionsloses Band ergänzt [3] [für einen Überblick über artifizielle flache Bänder, siehe [4]]. Das flache Band ist durch die Existenz eines zusätzlichen Atoms im Zentrum eines jeden Hexagons ein Produkt der lokalen Topologie des Gitters und ist stabil gegenüber Deformationen [5]. Physikalisch impliziert ein flaches Band die Existenz entarteter, lokalisierter Zustände mit topologischem Ursprung. Darüber hinaus erlaubt es zum Beispiel topologische Phasen durch externe Eichfelder [6]. Experimentell könnten solche Materialien durch den Einschluss von kalten Atomen in optischen Gittern [3] oder durch das Wachsen einer dreilagigen Struktur von kubischen Gittern, bestehend aus z.B. SrTiO<sub>3</sub> /SrIrO<sub>3</sub> /SrTiO<sub>3</sub> in der (111)-Richtung, realisiert werden [7].

Das  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter [8] interpoliert kontinuierlich zwischen Graphen ( $\alpha = 0$ ) und dem Dice-Gitter ( $\alpha = 1$ ) durch einen Parameter  $\alpha$ , der die Kopplungsstärke des zusätzlichen Atoms mit dem Untergitter innerhalb eines jeden Hexagons skaliert. Die experimentelle Relevanz des  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitters ergibt sich aus der Beobachtung von sogenannten „masselosen Kane Fermionen“ in dreidimensionalen Zinblendekristallen, wie Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te, bei einer kritischen Dotierung, die in einer Ebene auf das  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter mit  $\alpha = 1/\sqrt{3}$  abgebildet werden können [9]. Die Berry Phase [10] variiert im  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter zwischen  $\pi$  und 0 in Abhängigkeit von  $\alpha$ , was in besonderen elektronischen Eigenschaften wie einem unkonventionellen Quanten-Hall-Effekt [11, 12], einer orbitalen magnetischen Suszeptibilität [8, 13], einer minimalen Leitfähigkeit [14] und den Weiss-Oszillationen [15] resultiert. Das  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter bietet deshalb die herausragende Möglichkeit, durch die Variation von  $\alpha$  den Effekt von halb- und ganzzahligen Pseudospins auf das Verhalten von Dirac-Weyl Quasiteilchen in externen Feldern zu untersuchen.

Externe Felder wurden im  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter im Hinblick auf die Störung des flachen Bands untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass das flache Band weder durch Randbedingungen, die durch die abrupte Terminierung entstehen, noch durch ein zusätzliches Magnetfeld verändert werden [16, 17]. Kürzlich wurde mittels Tight-Binding-Kalkulationen bestätigt, dass das topologische Band des  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitters in Nanostreifen und in einem externen Magnetfeld robust ist [18]. Während im Dice-Gitter das Band zwar durch intensive zirkular-polarisierte Strahlung im Terahertz-Regime unverändert bleibt, wird es für beliebige Skalierungsparameter ( $\neq 0$ ) dispersiv [19]. In den bisherigen Arbeiten zum  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter wurde jedoch die Randbedingung unendlicher Masse („infinite mass boundary“) [20] nicht betrachtet, weshalb mögliche Effekte auf das flache Band unbekannt sind. Sie wurde 1987 von M. Berry und R. Mondragon ursprünglich für Neutrino-Billard hergeleitet und basiert darauf, dass außerhalb eines Gebiets eine effektive Masse durch einen Zusatzterm zum Hamilton-Operator erzeugt wird. Wenn die damit verbundene Bandlücke unendlich groß wird, werden Quasiteilchen innerhalb des Gebiets eingeschlossen. Unter anderem wurde die Randbedingung für abgeschlossene

ne Systeme wie Graphen-Dots, -Antidots und -Ringe unter Einfluss von externen Magnetfeldern genutzt [21–24]. Aus diesen Gründen werden wir in dieser Arbeit zunächst die Randbedingung unendlicher Masse im  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitter herleiten, um den Einfluss auf das flache Band zu untersuchen. Anschließend wird sie erstmals zur Berechnung der Energieeigenwerte eines abgeschlossenen Dots im  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitter unter der Einwirkung eines externen Magnetfeldes angewandt.

Ein sehr bekanntes relativistisches Phänomen ist der Klein-Tunnel-Effekt [25], bei dem die Transmission durch beliebige hohe und breite planare Barrieren beim senkrechten Einfall perfekt und somit ein elektrostatischer Einfang unmöglich wird. Die Untersuchung dieses Effekts im  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitter hat gezeigt, dass die Transmissionswahrscheinlichkeit an solchen Barrieren vom Skalierungsparameter abhängt [26] und für  $\alpha = 0$  und  $\alpha = 1$  die entsprechenden Grenzfälle reproduziert [27, 28]. Die Streueigenschaften hängen demnach vom Pseudospin ab, was sich für Pseudospin-1 Dirac-Weyl Teilchen ( $\alpha = 1$ ) am drastischsten bemerkbar macht. Dort werden ebene Potentialbarrieren bei bestimmten Parametern durch den *Super*-Klein-Tunnel-Effekt völlig transparent. Aufgrund dieser Differenzen werden wir die Streueigenschaften der Pseudospin-1 Teilchen im Dice-Gitter ( $\alpha = 1$ ) an zirkuläre Potentialbarrieren untersuchen. Wenn Dirac-Weyl Teilchen an zirkulären Barrieren streuen, können quasigebundene Zustände auftreten, die sich in scharfen Resonanzen der Streueffizienz und der Anisotropie der Stromdichte äußert. Aus Graphen sind Effekte wie Kaustiken mit negativem Brechungsindex [29], Unterdrückung des Klein-Tunnel-Effekts durch Fano-Resonanzen [30] bekannt, die sich in Streuregime einteilen lassen [31]. Im Dice-Gitter weist die kreisförmige Potentialbarriere aufgrund der besonderen Streueigenschaften von Pseudospin-1 Dirac-Weyl Quasiteilchen weitere interessante Effekte wie die Wiederbelebung des resonanten Streuregimes, perfekte Kaustiken, isotrope Streuung und Rückwärtsstreuung [32] auf. Aufgrund der interessanten Streueigenschaften von Pseudospin-1 Dirac-Weyl Quasiteilchen wollen wir in dieser Arbeit die Streuung an oszillierenden, kreisförmigen Potentialbarrieren untersuchen. Durch das harmonisch getriebene Potential werden Quasiteilchen inelastisch gestreut und tauschen dabei Energiequanten in Vielfachen der Oszillationsfrequenz mit dem externen Potential aus. Da die Streueigenschaften der zirkulären Potentialbarriere stark von der einfallenden Energie und der Potentialhöhe abhängt, erwarten wir durch den Energieaustausch ein komplexes Streuverhalten. Bisher wurde der oszillierende Quantendot nur in Graphen [33] oder optomechanischem Graphen untersucht [34]. Es konnte dabei gezeigt werden, dass sich die Streueigenschaften gezielt verändern lassen und das getriebene Potential als quantenmechanischer Schalter verwendet werden kann. Wir wollen insbesondere die Winkelabhängigkeit der reflektierten Stromdichte untersuchen, da aufgrund der Möglichkeit der Rückstreuung und der Manipulationsfähigkeit der Abstrahlcharakteristik des Potentials im Dice-Gitter sich interessante Anwendungsmöglichkeiten ergeben. Im Dice-Gitter wurden adiabatisch modulierte Potentialbarrieren analysiert, bei denen der Strom scharfe Richtungsänderungen durchführen kann [35].

In dieser Arbeit wird der Einfluss von externen Feldern auf Dirac-Weyl Quasiteilchen untersucht. Dazu werden in Kapitel 1 die elektronischen Eigenschaften des ungestörten  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitters hergeleitet, woraus sich eine effektive, niederenergetische Beschreibung durch eine Dirac-Weyl Gleichung in Analogie zu Graphen ergeben wird. Für die darauf folgenden Kapitel wird vor allem die Einführung der Massenterme und die Diskussion der Stetigkeitsbedingung der Wellenfunktion nützlich sein. Das Kapitel 2 wird sich zu Beginn mit der Herleitung der Berry Phase und der Anwendung auf die Energiebänder befassen. Die algebraische Berechnung der quantisierten Energieeigenwerte unter Einfluss eines externen Magnetfelds führt auf die  $\alpha$ -abhängigen Landau-Level. Anschließend wird die Randbedingung unendlicher Masse im  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  System abgeleitet, indem wir durch die Forderung nach Hermitizität des Hamilton-Operators auf einem Gebiet, welches mit einem Massenterm umschlossen wird, eine Relation zwischen den Komponenten der Wellenfunktion folgern können. Schließlich werden wir die Randbedingung durch die Lösung eines Streuproblems im Grenzwert unendlicher Masse festlegen. Die gewonnene Bedingung wird dann auf eine Dot-Geometrie mit einem externen Magnetfeld angewandt, woraus sich die Energieeigenwerte berechnen lassen werden. Im Kapitel 3 werden zunächst die Streueigenschaften von Dirac-Weyl Quasiteilchen an planaren Potentialbarrieren hergeleitet, um einerseits auf die Abhängigkeit vom Skalierungsparameter ein-

zugehen und andererseits den *Super*-Klein-Tunnel-Effekt für  $\alpha = 1$  zu beobachten. Im Anschluss wird durch die Streuung von ebenen Wellen an zirkularen Potentialbarrieren die Grundlage für die Untersuchung der zeitlich oszillierenden Potentialbarrieren im Dice-Gitter geschaffen. Durch einen Partialwellenansatz lassen sich die Eigenfunktionen des statischen Systems bestimmen, woraus mittels Stetigkeitsbedingung die Streukoeffizienten berechnet werden. Anhand der Streukoeffizienten können die Größen berechnet werden, die das Streuverhalten charakterisieren. Wir werden durch die Berechnung der Streugrößen das Verhalten durch charakteristische Streuregime kennzeichnen und zusätzlich die Abstrahlcharakteristik im Fernfeld analysieren. Für das getriebene Potential werden die zeitabhängigen Wellenfunktionen aus den statischen Eigenfunktionen mit Hilfe eines Floquet-Ansatzes berechnet. Nach der Bestimmung der Streukoeffizienten können die zeitabhängigen Streugrößen bestimmt werden, wodurch wir wiederum das Streuverhalten charakterisieren werden. Schlussendlich wird die Winkel- und Zeitabhängigkeit der reflektierten Stromdichte anhand der charakterisierten Streuregime auf interessante Anwendungsmöglichkeiten untersucht.





## Das $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$ Gitter

In diesem Kapitel werden wir uns auf die elektronischen Eigenschaften des reinen  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitters fokussieren. Nach der Definition des Gitters berechnen wir die Bandstruktur im Rahmen eines Tight-Binding-Ansatzes. Anschließend leiten wir eine effektive Beschreibung der niederenergetischen Anregungen durch eine Dirac-Weyl Gleichung her, die uns die Untersuchung von Dirac-Weyl Quasiteilchen in externen Feldern erlauben wird.

Ausgehend vom Honigwabengitter kann das  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitter konstruiert werden, indem im Zentrum eines jeden Hexagons mit Basis  $\{A, B\}$  ein weiterer Gitterplatz  $C$  hinzugefügt und mit dem  $B$ -Untergitter verbunden wird. Das  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitter ist in der Abb. 1.1 (a) dargestellt. Die Bravais-Gittervektoren aus der Abb. 1.1 (a) können mit dem interatomaren Abstand  $a$  geschrieben werden als

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} (-\sqrt{3}, 3), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} (\sqrt{3}, 3). \quad (1.1)$$

In Graphen ist der interatomare Abstand typischerweise  $a \approx 0.142$  nm. Die Gitterkonstante ist durch  $|\mathbf{a}_{1/2}| = \sqrt{3}a$  gegeben. Wenn die Plätze  $B$  als Gitterpunkte des Bravais-Gitters mit Position  $\mathbf{R}_i = n_{1,i}\mathbf{a}_1 + n_{2,i}\mathbf{a}_2$  gewählt werden, ergeben sich die Vektoren der nächsten Nachbarn (n.N) des  $A$ -Untergitters zu

$$\delta_{A,1} = \left( \frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2} \right), \quad \delta_{A,2} = \left( -\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2} \right), \quad \delta_{A,3} = (0, -a). \quad (1.2)$$

Sie zeigen von  $B$ -Plätzen zu  $A$ -Plätzen. Jeder Bravais-Gitterplatz  $B$  besitzt jeweils drei n.N des  $A$ - oder  $B$ -Untergitters. Die Position der jeweiligen Untergitterplätze ist durch  $\mathbf{R}_{A/C,j} = \mathbf{R}_i + \delta_{A/C,j}$  gegeben, wobei  $\delta_{C,j} = -\delta_{A,j}$ .

Die reziproken Gittervektoren sind unter Ausnutzung von  $\mathbf{a}_3 = (0, 0, 1)$  definiert durch

$$\mathbf{b}_1 = \left( \frac{-2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right), \quad \mathbf{b}_2 = \left( \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right). \quad (1.3)$$

Sie sind in Abb. 1.1 (b) zusammen mit der ersten Brillouin-Zone (1. BZ) dargestellt. Die 1. BZ ist hexagonal und besitzt zwei nicht-äquivalente Eckpunkte

$$\mathbf{K} = \left( \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right) \quad \text{und} \quad \mathbf{K}' = \left( -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right). \quad (1.4)$$

Durch Linearkombinationen der  $K$  bzw.  $K'$  Punkte mit den reziproken Gittervektoren aus Gl. (1.3) werden die restlichen vier Eckpunkte konstruiert.

### 1.1. Das Tight-Binding-Modell und die Bandstruktur

Für das wechselwirkungsfreie Tight-Binding-Modell in n.N-Näherung können die elektronischen Eigenschaften des  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitters analytisch berechnet werden. Bei der Herleitung der Bandstruktur

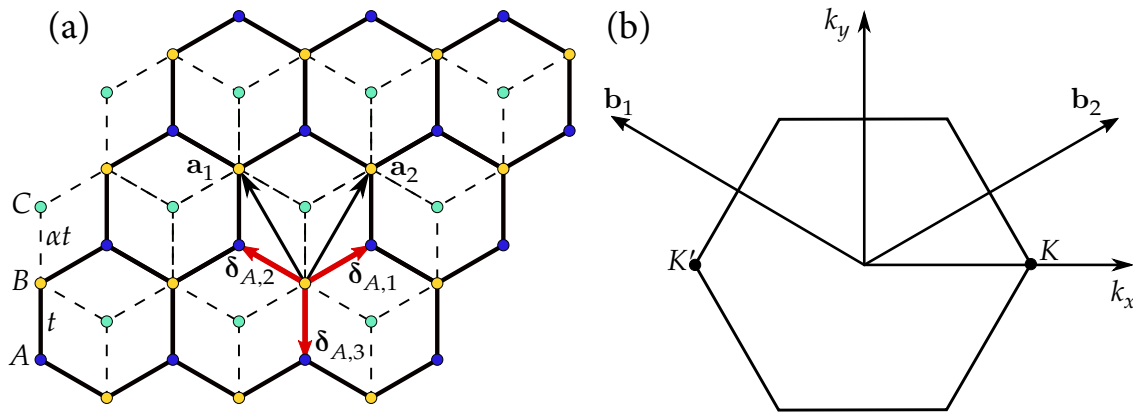


Abbildung 1.1.: (a) Das  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitter mit Basis  $\{A, B, C\}$ . Die Bravais-Gittervektoren  $\mathbf{a}_{1/2}$  spannen das Bravais-Gitter auf, wobei  $\delta_{A,j}$  mit  $j \in \{1, 2, 3\}$  die Position der drei n.N des A-Untergitters angibt. Zwischen A- und B-Gitterplätzen wird das Hüpfen durch den Parameter  $t$  und zwischen B- und C-Gitterplätzen durch den skalierten Parameter  $\alpha t$  beschrieben. (b) 1. BZ des  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitters mit den reziproken Gittervektoren  $\mathbf{b}_{1/2}$  und den K- bzw.  $K'$ -Punkten.

von Graphen wird ein ähnlicher Ansatz gewählt. Beim Tight-Binding-Modell wird angenommen, dass die Elektronen eng an die jeweiligen Gitterplätze gebunden sind. Diese Elektronen dürfen von Platz zu Platz hüpfen, was durch die Transferamplitude  $t$  modelliert wird. Die Transferamplitude gibt eine Übergangswahrscheinlichkeit des Elektrons zwischen den Gitterplätzen an. Im  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitter wird das Hüpfen zwischen A- und B-Atomen durch den Parameter  $t$ , zwischen B- und C-Atomen durch den skalierten Parameter  $\alpha t$  beschrieben (siehe Abb. 1.1 (a)). Der Skalierungsparameter  $\alpha$  variiert zwischen 0 und 1. Für  $\alpha = 0$  sind die C-Atome nicht mehr mit dem restlichen Gitter verbunden. Es liegt ein hexagonales Gitter mit abgekoppelten C-Untergitter vor, weshalb wir diesen Fall als Graphen bezeichnen. Wird  $\alpha = 1$  gewählt, erhalten wir das sogenannte Dice-Gitter. Der Hamilton-Operator des Tight-Binding-Modells ist dann gegeben durch

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i^\dagger a_j + a_j^\dagger b_i) - \alpha t \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i^\dagger c_j + c_j^\dagger b_i), \quad (1.5)$$

wobei die Summe über alle n.N, gekennzeichnet durch  $\langle i, j \rangle$ , läuft. In Gl. (1.5) vernichtet (erzeugt) Operator  $a_j^{(\dagger)}$  [ $c_j^{(\dagger)}$ ] einen Zustand am Platz  $j$  des Untergitters A [C]. Durch  $b_i^{(\dagger)}$  wird auf dem  $i$ -ten Platz des Untergitters B ein Zustand vernichtet (erzeugt). Infolge der Topologie des Gitters kann der Tight-Binding-Hamilton-Operator als Summe über alle Bravais-Gitterplätze und deren jeweils drei n.N des A und B Untergitters kompakt in die Form

$$H = - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 (a_j^\dagger, b_i^\dagger, c_j^\dagger) \begin{pmatrix} 0 & t & 0 \\ t & 0 & \alpha t \\ 0 & \alpha t & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_j \\ b_i \\ c_j \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

gebracht werden. Mittels diskreter Fourier-Transformation,

$$a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{1. BZ}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{A,j}} a_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad (1.7)$$

werden die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren des Ortsraums  $(a_j^{(\dagger)}, b_i^{(\dagger)}, c_j^{(\dagger)})$  in die zugehörigen Operatoren im reziproken  $\mathbf{k}$ -Raum  $(a_{\mathbf{k}}^{(\dagger)}, b_{\mathbf{k}}^{(\dagger)}, c_{\mathbf{k}}^{(\dagger)})$  überführt. Um den Hamilton-Operator aus Gl. (1.6) vollständig in den  $\mathbf{k}$ -Raum zu transformieren, müssen Terme wie  $a_j^\dagger b_i$  berechnet

werden. Wir erhalten

$$\sum_{i=1}^N a_j^\dagger b_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{A,j}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \quad (1.8)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta_{A,j}} \underbrace{\left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{R}_i \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q})} \right)}_{=\delta(\mathbf{k} - \mathbf{q})} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \quad (1.9)$$

$$= e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta_{A,j}} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}, \quad (1.10)$$

wobei ausgenutzt wurde, dass der  $j$ -te Gitterplatz des Untergitters  $A$  an der Position  $\mathbf{R}_{A,j}$  durch den Vektor  $\delta_{A,j}$  der n.N mit dem  $i$ -ten Gitterplatz des Untergitters  $B$  mit Bravais-Vektor  $\mathbf{R}_i$  durch  $\mathbf{R}_{A/B,j} = \mathbf{R}_i + \delta_{A/B,j}$  verbunden ist. Die Berechnung der übrigen Relationen verläuft analog. Mit Gl. (1.10) ergibt sich

$$H = - \sum_{\mathbf{k}} \sum_{j=1}^3 (a_{\mathbf{k}}^\dagger, b_{\mathbf{k}}^\dagger, c_{\mathbf{k}}^\dagger) \begin{pmatrix} 0 & t e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta_{A,j}} & 0 \\ t e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_{A,j}} & 0 & \alpha t \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_{C,j}} \\ 0 & \alpha t \cdot e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta_{C,j}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}} \\ c_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (1.11)$$

Die Summe in Gl. (1.11) kann unter Verwendung der Definition der Vektoren der n.N aus Gl. (1.2) und  $\delta_{C,j} = -\delta_{A,j}$  ausgeführt werden. Mit der Parametrisierung  $\alpha = \tan \varphi$  führt dies auf die Darstellung

$$H = \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^\dagger, b_{\mathbf{k}}^\dagger, c_{\mathbf{k}}^\dagger) \begin{pmatrix} 0 & f_{\mathbf{k}} & 0 \\ f_{\mathbf{k}}^* & 0 & \tan \varphi f_{\mathbf{k}} \\ 0 & \tan \varphi f_{\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}} \\ c_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

mit der Abkürzung

$$f_{\mathbf{k}} = -t \left( 1 + 2e^{-i\frac{3k_y a}{2}} \cos \left( \frac{\sqrt{3}}{2} k_x a \right) \right) \quad (1.13)$$

und ihrem komplex konjugierten  $f_{\mathbf{k}}^*$ . Reskalierung von  $H$  aus Gl. (1.12) mit  $\cos \varphi$  ergibt die Darstellung des Hamilton-Operators,

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \cos \varphi f_{\mathbf{k}} & 0 \\ \cos \varphi f_{\mathbf{k}}^* & 0 & \sin \varphi f_{\mathbf{k}} \\ 0 & \sin \varphi f_{\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.14)$$

aus [8]. Die Eigenwerte dieses Hamilton-Operators lauten

$$E_1(\mathbf{k}) = 0 \quad \text{und} \quad E_{2/3}(\mathbf{k}) = \pm |f_{\mathbf{k}}| \quad (1.15)$$

mit

$$|f_{\mathbf{k}}| = |t| \sqrt{\left( 3 + 2 \cos(\sqrt{3} k_x a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_x a\right) \cos\left(\frac{3}{2} k_y a\right) \right)} \quad (1.16)$$

(siehe Abb. 1.2). Die Bänder  $E_{2,3}$  sind identisch zu dem Leitungsband ( $E > 0$ ) und Valenzband ( $E < 0$ ) von Graphen [2]. Die Besonderheit des  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitters ist das zusätzliche, dispersionslose  $E_1$  Band. Ein derartig flaches Band (engl. Literatur „flat band“) ist mit einer unendlich großen Entartung verbunden, gleichzeitig besitzt ein flaches Band eine unendliche effektive Masse und infolge dessen eine Lokalisierung der Elektronen. Die strikte Lokalisierung ist das Ergebnis der lokalen Topologie des Gitters [5], wodurch die Wellenfunktion an den Gitterplätzen destruktiv interferiert. Bei der Berechnung der Wellenfunktion des flachen Bands werden wir sehen, dass für  $\alpha = 0$  die Wellenfunktion auf dem Untergitter  $C$  lokalisiert und damit vom System abgekoppelt ist. Eine weitere Besonderheit ist die Unabhängigkeit der Bandstruktur vom variablen Skalierungsparameter  $\alpha$ .

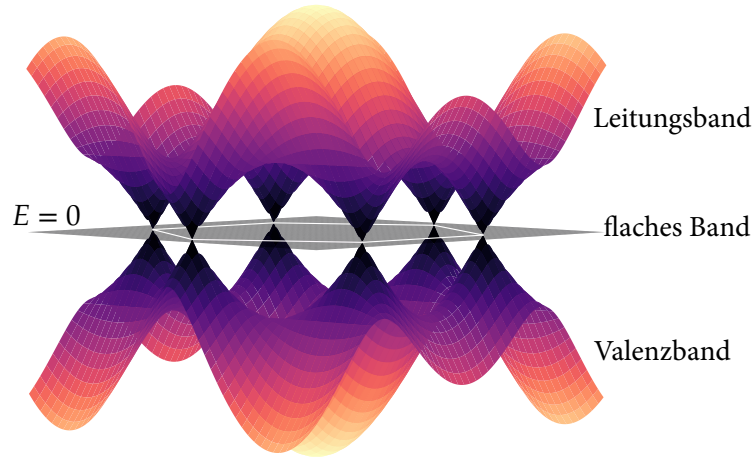


Abbildung 1.2.: Die Bandstruktur des  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitters mit einem Leitungsband für  $E > 0$ , einem Valenzband für  $E < 0$  und dem flachen Band bei  $E = 0$ .

## 1.2. Dirac-Weyl Quasiteilchen

In Analogie zu Graphen werden wir die Bandstruktur nahe der Eckpunkte  $K$  und  $K'$  der 1. BZ entwickeln, um eine effektive niederenergetische Beschreibung zu erlangen. Für  $f_{\mathbf{k}}$  ergibt sich mittels Gl. (1.13) und  $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{K}^{(\prime)}$

$$f_{\mathbf{k}} \approx f(\mathbf{K}^{(\prime)}) + \nabla_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \Big|_{\mathbf{K}^{(\prime)}} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{K}^{(\prime)}) = \frac{3at}{2} (\tau q_x - iq_y). \quad (1.17)$$

In Gl. (1.17) wurde  $f_{\mathbf{K}^{(\prime)}} = 0$  verwendet und der sogenannte Valley-Index  $\tau = \pm 1$  für den  $K$  (+) bzw.  $K'$  (-) Punkt eingeführt. Die Dispersionsrelation für die Energie ist dann in der Umgebung des  $K$  bzw.  $K'$  Punkts mit der Fermi-Geschwindigkeit  $v_F = 3at/2\hbar$  (Graphen  $\sim 10^7$  m/s) gegeben durch

$$E_0 = 0 \quad \text{und} \quad E_s = s\hbar v_F |\mathbf{q}|. \quad (1.18)$$

Der Bandindex  $s = \text{sgn}(E) = \pm 1$  ordnet dem Valenzband  $s = +1$  und dem Leitungsband  $s = -1$  zu. Im Vergleich zu Graphen tritt zusätzlich zu den Dirac-Kegeln  $E_s$  noch das  $E_0 = 0$  Band auf. Die Abb. 1.3 zeigt die Bandstruktur nach Gl. (1.15) in der Umgebung des  $K$  Punkts. Das Einsetzen der Entwicklung aus Gl. (1.17) in den Hamilton-Operator aus Gl. (1.14) führt auf

$$H_{\tau}^{\varphi} = \frac{3at}{2} \begin{pmatrix} 0 & \cos \varphi (\tau q_x - iq_y) & 0 \\ \cos \varphi (\tau q_x + iq_y) & 0 & \sin \varphi (\tau q_x - iq_y) \\ 0 & \sin \varphi (\tau q_x + iq_y) & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.19)$$

Mit dem Korrespondenzprinzip  $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$  kann der Hamilton-Operator aus Gl. (1.19) als

$$H_{\tau}^{\varphi} = v_F \left( \tau S_x^{\varphi} p_x + S_y^{\varphi} p_y \right) = v_F \mathbf{S}_{\tau}^{\varphi} \cdot \mathbf{p} \quad (1.20)$$

aufgefasst werden. Die Größen  $S_x^{\varphi}$  und  $S_y^{\varphi}$  bezeichnen die Pseudospinmatrizen

$$S_x^{\varphi} = \begin{pmatrix} 0 & \cos \varphi & 0 \\ \cos \varphi & 0 & \sin \varphi \\ 0 & \sin \varphi & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y^{\varphi} = \begin{pmatrix} 0 & -i \cos \varphi & 0 \\ i \cos \varphi & 0 & -i \sin \varphi \\ 0 & i \sin \varphi & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.21)$$

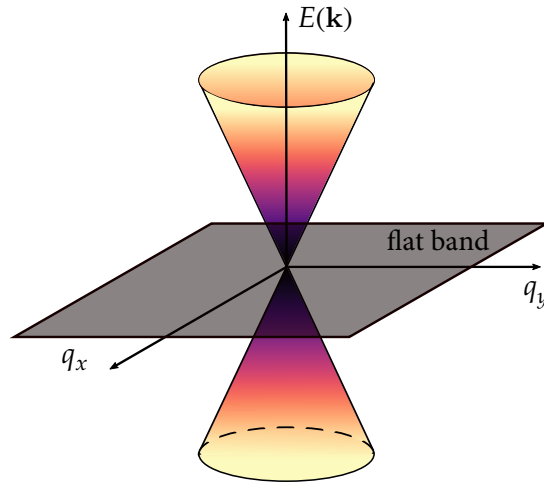


Abbildung 1.3.: Bandstruktur des  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitters in der Umgebung des  $K$  Punkts mit Dirac-Kegel für das Leitungs- bzw. Valenzband und flachem Band bei  $E = 0$ .

die die Komponenten des Pseudospinvektors  $\mathbf{S}_\tau^\varphi = (\tau S_x^\varphi, S_y^\varphi)$  darstellen. Der Pseudospin bezeichnet den Untergitterfreiheitsgrad. Obwohl er nicht mit einem Magnetfeld wechselwirkt, liefert er einen Beitrag zum Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}_\tau^\varphi$ . Die elektronischen Anregungen in der Nähe des  $K^{(\prime)}$  Punkts des  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitters werden nun durch die Dirac-Weyl Gleichung

$$H_\varphi^\tau |\psi_\tau\rangle = E |\psi_\tau\rangle, \quad (1.22)$$

mit  $H_\varphi^\tau$  aus Gl. (1.20) und  $E = E_0$  oder  $E_s$ , beschrieben. Da  $H_\varphi^\tau$  eine  $3 \times 3$ -Matrix darstellt, ist die Wellenfunktion allgemein ein Dreier-Spinor mit  $|\psi_\tau\rangle = (\psi_A^\tau, \psi_B^\tau, \psi_C^\tau)$ . Aufgrund dieser Beschreibung werden diese Anregungen als Dirac-Weyl Quasiteilchen bezeichnet.

Wir führen nun den Stromdichteoperator ein, da dieser in der Herleitung der Stetigkeitsbedingung entscheidend sein wird. Dieser Operator ist definiert durch  $\hat{\mathbf{j}}^\tau = -i/\hbar[\mathbf{r}, H_\tau^\varphi] = \nabla_{\mathbf{p}} H_\tau^\varphi$ , womit

$$\hat{\mathbf{j}}_\tau = v_F(\tau S_x^\varphi, S_y^\varphi). \quad (1.23)$$

Explizit erhalten wir mit einer beliebigen Wellenfunktion  $|\psi_\tau\rangle$  für den Erwartungswert der Stromdichte im jeweiligen Valley

$$\langle \psi_\tau | \hat{\mathbf{j}}_\tau | \psi_\tau \rangle = v_F \left( \begin{array}{l} 2\tau \text{Re} \left\{ (\psi_B^\tau)^* (\cos \varphi \psi_A^\tau + \sin \varphi \psi_C^\tau) \right\} \\ 2\text{Im} \left\{ (\psi_B^\tau)^* (\sin \varphi \psi_C^\tau - \cos \varphi \psi_A^\tau) \right\} \end{array} \right), \quad (1.24)$$

wobei  $\text{Re}$  den Real- und  $\text{Im}$  den Imaginärteil bezeichnet.

### 1.2.1. Grenzfälle des $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$ Gitters

Für  $\alpha = 0$  ( $\varphi = 0$ ) reduziert sich der Hamilton-Operator aus Gl. (1.20) auf

$$H_\tau^{\varphi=0} = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y & 0 \\ p_x + ip_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = v_F \boldsymbol{\sigma}_\tau \cdot \mathbf{p} \oplus 0. \quad (1.25)$$

Das  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Modell beschreibt dann Graphen, mit einem zusätzlichen flachen Band, aufgrund des zusätzlichen C-Untergitters. Die Matrizen  $\boldsymbol{\sigma}_\tau = (\tau \sigma_x, \sigma_y)$  sind Spin-1/2 Pauli-Matrizen, die die Relationen einer Clifford-Algebra  $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \mathbb{1}_{2 \times 2}$  und die einer Drehimpuls Algebra  $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk} \sigma_k$  erfüllen.

Im Grenzfall  $\alpha = 1$  ( $\varphi = \pi/4$ ) erhalten wir das Dice-Gitter [5] mit dem Hamilton-Operator

$$H_\tau^{\varphi=\pi/4} = \frac{v_F}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y & 0 \\ p_x + ip_y & 0 & p_x - ip_y \\ 0 & p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} = v_F \mathbf{S}_\tau \cdot \mathbf{p}, \quad (1.26)$$

wobei  $\mathbf{S}_\tau = (\tau S_x^{\pi/4}, S_y^{\pi/4})$ . Für  $S_i^{\varphi=\pi/4}$  schreiben wir  $S_i$ . Der Operator aus Gl. (1.26) ist sehr ähnlich zu dem von Graphen aus Gl. (1.25) mit dem Unterschied, dass

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad S_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad (1.27)$$

Spin-1 Matrizen darstellen. Sie erfüllen nur die Relation einer Drehimpulsalgebra mit  $[S_i, S_j] = i\varepsilon_{ijk} S_k$  aber nicht die Relation einer Clifford-Algebra. Aus der Kommutatorrelation folgt eine Darstellung für

$$S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.28)$$

Der Hamilton-Operator beschreibt deshalb Dirac-Weyl Quasiteilchen mit Pseudospin-1 [3]. Das  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Modell interpoliert somit kontinuierlich zwischen dem Pseudospin-1/2 ( $\alpha = 0$ ) des Graphens und Pseudospin-1 ( $\alpha = 1$ ) des Dice-Gitters. Falls  $\alpha \neq 0$  oder  $\neq 1$  beinhaltet das Modell mehr als einen einzelnen Pseudospin-Operator.

### 1.2.2. Wellenfunktionen eines freien Dirac-Weyl Quasiteilchens

Um in den nächsten Kapiteln den Einfluss von externen Felder zu diskutieren, werden in diesem Abschnitt die Wellenfunktionen des freien Dirac-Weyl Quasiteilchens für jedes der drei Bänder  $E_0 = 0$  und  $E_s = s\hbar v_F |\mathbf{q}|$  mit  $s = \pm 1$  berechnet. Wir erhalten für die Dirac-Kegel  $E_s$  aus der Eigenwertgleichung

$$H_\tau^\varphi |\psi_{s,\tau}\rangle = E_s |\psi_{s,\tau}\rangle \quad (1.29)$$

die Wellenfunktionen

$$|\psi_{s,\tau}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \tau \cos \varphi e^{-i\tau\theta_k} \\ s \\ \tau \sin \varphi e^{i\tau\theta_k} \end{pmatrix}, \quad (1.30)$$

wobei  $\theta_k = \arctan(p_y/p_x)$  den Winkel zwischen  $p_x$  und  $p_y$  angibt. Für das flache Band bei  $E_0 = 0$  bekommen wir

$$|\psi_{0,\tau}\rangle = \begin{pmatrix} \tau \sin \varphi e^{-i\tau\theta_k} \\ 0 \\ -\tau \cos \varphi e^{i\tau\theta_k} \end{pmatrix}. \quad (1.31)$$

Offensichtlich gilt  $\psi_B = 0$ , weshalb  $|\psi_{0,\tau}\rangle$  aufgrund der damit verschwindenden Stromdichte aus Gl. (1.24) lokalisiert. Für  $\alpha = 0$  lokalisiert der Zustand  $|\psi_{0,\tau}\rangle$  auf dem C-Untergitter und entkoppelt damit völlig.

### 1.2.3. Massive Dirac-Weyl Quasiteilchen

Für die Herleitung der Randbedingung unendlicher Masse werden die Eigenschaften von sogenannten Massentermen benötigt, die durch einen Zusatzterm  $\Delta M$  zum Hamilton-Operator,

$$(H_\tau^\varphi + \Delta M) \psi_\tau = E \psi_\tau, \quad (1.32)$$

die dispersiven Bänder so modifizieren, dass sie der Energie-Impuls-Beziehung  $E^2 = v_F^2 \mathbf{p}^2 + m^2 v_F^4$  genügen. Der Term  $\Delta M$  besteht aus einer reellen Zahl  $\Delta$  und einer diagonalen Matrix  $M$ . Die Matrix  $M = \pm U$  mit der Definition

$$M = \pm U = \pm \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

erfüllt die Anforderungen, da die Eigenwerte des modifizierten Hamilton-Operators

$$H_\tau^\varphi = v_F \mathbf{S}_\tau^\varphi \cdot \mathbf{p} \pm \Delta U, \quad (1.34)$$

durch

$$E_0 = \pm \Delta, \quad \text{und} \quad E_s = s \sqrt{v_F^2 \mathbf{p}^2 + \Delta^2} \quad (1.35)$$

einer relativistischen Energie-Impuls-Beziehung entsprechen. Die Bandstruktur der massiven Dirac-Weyl Quasiteilchen ist in Abb. 1.4 (a) und (b) für  $M = \pm U$  dargestellt. Die Teilchen-Loch-Symmetrie wurde gebrochen:  $E(\mathbf{p}) \neq -E(-\mathbf{p})$ . Das flache Band wird durch den Massenterm an das entsprechende Leitungs- oder Valenzband bei  $\pm \Delta$  verschoben, wodurch die Bandlücke  $2\Delta$  beträgt. Die Matrix  $U$  wurde in Analogie zum Massenterm von Graphen  $\Delta \sigma_z$  gewählt. Der Effekt der Matrix  $U$  wurde im Zusammenhang mit der Untersuchung der Streuung massiver Pseudospin-1 ( $\alpha = 1$ ) Teilchen an elektrostatischen Barrieren diskutiert [36].

Im Dice-Gitter ( $\alpha = 1$ ) findet man eine weitere Matrix

$$M = \tau S_z = \tau \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.36)$$

die ähnliche Eigenschaften wie  $M = \pm \Delta U$  besitzt. Der Hamilton-Operator aus Gl. (1.26) nimmt die Form

$$H_\tau^{\tau/4} = v_F \mathbf{S}_\tau \cdot \mathbf{p} + \tau \Delta S_z \quad (1.37)$$

an, woraus sich die Eigenwerte

$$E_0 = 0 \quad \text{und} \quad E_s = s v_F \sqrt{\mathbf{p}^2 + \Delta^2 v_F^2} \quad (1.38)$$

ergeben. Die dispersiven Bänder  $E_s$  genügen auch in diesem Fall der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung, während das flache Band durch den Massenterm nicht beeinflusst wird:  $\Delta$  ist die Bandlücke zwischen dem flachen Band und dem dispersiven Band. Aus diesem Grund ist auch die Teilchen-Loch-Symmetrie nicht gebrochen. Die Eigenwerte aus Gl. (1.38) sind in Abb. 1.4 (c) dargestellt. Für beliebiges  $\alpha$  ( $\varphi$ ) kann  $S_z$  *nicht* als Massenterm verwendet werden, da das flache Band dispersiv wird [37].

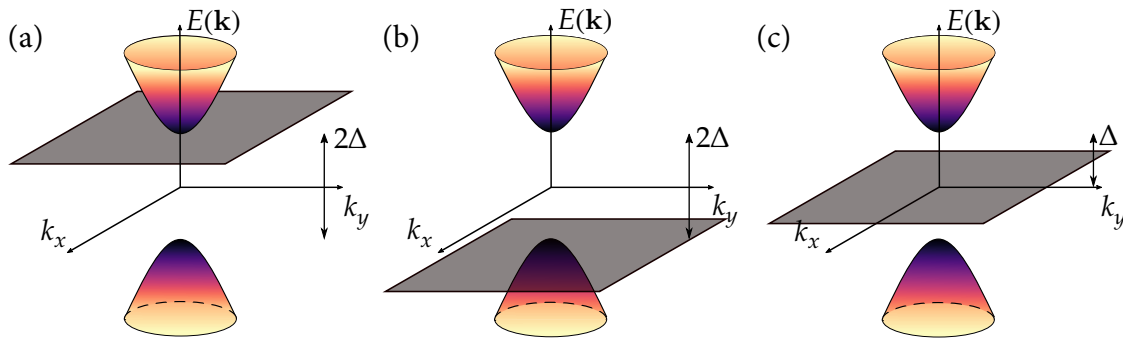


Abbildung 1.4.: Bandstruktur des  $\alpha\mathcal{T}_3$  Gitters am  $K$  Punkt für Massenterm (a)  $M = +U$  und (b) für  $M = -U$ . Das flache Band ist bei  $\pm\Delta$  und die Bandlücke beträgt jeweils  $2\Delta$ . (c) Bandstruktur bei  $\alpha = 1$  (Dice-Gitter) am  $K$  Punkt mit Massenterm  $M = S_z$  und einer Bandlücke von  $\Delta$ .

### 1.3. Stetigkeit der Wellenfunktion

Bei der Beschreibung des Einflusses externer Felder auf Dirac-Weyl Quasiteilchen spielen Streuprobleme eine wichtige Rolle. Wir leiten in diesem Zusammenhang die Stetigkeit der Wellenfunktionen an der Grenze zwischen zwei Raumbereichen her. Ausgangspunkt ist zunächst die Dirac-Weyl Gleichung mit einem elektrischem Potential

$$H_\tau^\varphi \psi_\tau(\mathbf{r}) = (E - V(x))\psi_\tau(\mathbf{r}), \quad (1.39)$$

die entlang der  $x$ -Achse über ein Intervall  $[x_0 - \varepsilon, x_0 + \varepsilon]$  integriert wird für den Grenzfall  $\varepsilon \rightarrow 0$  [28, 38]. Anschließend werden wir die Stetigkeitsbedingung für beliebige Orientierungen herleiten. Aus

$$\int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} H_\tau^\varphi \psi_\tau(\mathbf{r}) dx = \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} (E - V(x))\psi_\tau(\mathbf{r}) dx \quad (1.40)$$

und Gl. (1.39) für  $\tau = +1$  (die Herleitung für  $\tau = -1$  erfolgt analog) erhalten wir mit  $\psi = (\psi_A, \psi_B, \psi_C)$

$$-i\hbar v_F \begin{pmatrix} \cos \varphi (\partial_x - i\partial_y)\psi_B(x, y) \\ \cos \varphi (\partial_x + i\partial_y)\psi_A(x, y) + \sin \varphi (\partial_x - i\partial_y)\psi_C(x, y) \\ \sin \varphi (\partial_x + i\partial_y)\psi_B(x, y) \end{pmatrix} = (E - V(x)) \begin{pmatrix} \psi_A(x, y) \\ \psi_B(x, y) \\ \psi_C(x, y) \end{pmatrix}. \quad (1.41)$$

In Komponentenschreibweise ergibt dies

$$-i\hbar v_F \cos \varphi \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} (\partial_x - i\partial_y)\psi_B(x, y) dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} (E - V(x))\psi_A(x, y) dx, \quad (1.42)$$

$$\begin{aligned} -i\hbar v_F \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} \cos \varphi (\partial_x + i\partial_y)\psi_A(x, y) + \sin \varphi (\partial_x - i\partial_y)\psi_C(x, y) dx \\ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} (E - V(x))\psi_B(x, y) dx, \end{aligned} \quad (1.43)$$

$$-i\hbar v_F \sin \varphi \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} (\partial_x + i\partial_y)\psi_B(x, y) dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} (E - V(x))\psi_C(x, y) dx. \quad (1.44)$$



Aufgrund der Äquivalenz der ersten und dritten Gleichung und der Annahme, dass  $E - V(x)$  endlich ist, erhalten wir Stetigkeitsbedingungen für die Komponenten der Wellenfunktion

$$\psi_B(x_0 + \varepsilon, y) = \psi_B(x_0 - \varepsilon, y), \quad (1.45)$$

$$\cos \varphi \psi_A(x_0 + \varepsilon, y) + \sin \varphi \psi_C(x_0 + \varepsilon, y) = \cos \varphi \psi_A(x_0 - \varepsilon, y) + \sin \varphi \psi_C(x_0 - \varepsilon, y). \quad (1.46)$$

Nach Gl. (1.45) ist die Komponente  $\psi_B$  stetig, nicht aber  $\psi_A$  und  $\psi_C$ . Nur die Linearkombination von  $\cos \varphi \psi_A(x, y) + \sin \varphi \psi_C(x, y)$  ist stetig entlang der  $x$ -Achse. Die Stetigkeitsbedingung nach Gl. (1.46) weicht von den Bedingungen für die Grenzfälle  $\alpha = 0$  und  $\alpha = 1$  ab. Für Graphen wird die Stetigkeit der beiden Komponenten  $\psi_A$  und  $\psi_B$  der Wellenfunktion gefordert, dagegen ist im Dice-Gitter lediglich  $\psi_B$  und die Summe aus  $\psi_A$  und  $\psi_C$  stetig [28]. Die Stetigkeitsbedingungen werden für entsprechendes  $\alpha$  reproduziert. Das  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter verallgemeinert also die Stetigkeitsbedingung des Dice-Gitters für beliebige  $\alpha$ .

Zur Diskussion der Anschlussbedingungen betrachten wir die Stromdichte einer beliebigen Wellenfunktion  $\psi_\tau = (\psi_A^\tau, \psi_B^\tau, \psi_C^\tau)$  aus Gl. (1.24) projiziert auf einen Vektor  $\mathbf{n}_B = (\cos \Theta, \sin \Theta)$ , der senkrecht auf einer Grenzfläche steht und den Raum in Bereiche I und II unterteilt. Dies ergibt

$$\mathbf{n}_B \cdot \mathbf{j}_\tau = 2\mathcal{R}e \left\{ (\psi_B^\tau)^* (\cos \varphi \psi_A^\tau e^{i\tau\Theta} + \sin \varphi \psi_C^\tau e^{-i\tau\Theta}) \right\}. \quad (1.47)$$

Mit  $\mathbf{n}_B = \mathbf{e}_x$  ( $\Theta = 0$ ) folgt, dass Gl. (1.47) aufgrund von Gl. (1.46) und (1.45) stetig sein muss. Erweitern wir diese Beobachtung auf beliebige  $\Theta$ , muss an der Grenzschicht

$$\psi_B^\tau(\text{I}) = \psi_B^\tau(\text{II}), \quad (1.48)$$

$$\cos \varphi e^{i\tau\Theta} \psi_A^\tau(\text{I}) + \sin \varphi e^{-i\tau\Theta} \psi_C^\tau(\text{I}) = \cos \varphi e^{i\tau\Theta} \psi_A^\tau(\text{II}) + \sin \varphi e^{-i\tau\Theta} \psi_C^\tau(\text{II}) \quad (1.49)$$

gelten. Mit Gl. (1.49) haben wir eine Stetigkeitsbedingung gefunden, die uns die Untersuchung von Streuproblemen an beliebig orientierten Grenzflächen erlaubt.



## Dirac-Weyl Quasiteilchen in magnetischen Feldern

Die Bandstruktur des  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitters besitzt neben den lineardispersiven Dirac-Kegeln für alle Wellenzahlen ein flaches Band. Es wird allgemein erwartet, dass Störungen wie Randbedingungen oder externe magnetische Felder das flache Band verändern. Im  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter wurden im Kontinuums-Limes Randbedingungen untersucht, die durch die abrupte Terminierung des Gitters entstehen [16, 17]. Es wurde dabei festgestellt, dass weder das Terminieren des Gitters noch ein zusätzliches Magnetfeld zu einer Veränderung des flachen Bands führen. Die Untersuchung von  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$ -Nanostreifen in Zigzag- oder Armchair-Konfiguration unter Einfluss eines externen Magnetfelds durch einen Tight-Binding-Ansatz hat dies bestätigt [18]. In Graphen können Elektronen innerhalb eines Gebiets auch eingeschlossen werden, wenn außerhalb dieses Gebiets durch einen Massenterm eine Bandlücke erzeugt wird, die wesentlich größer ist als die Energie. Diese sogenannte Randbedingung unendlicher Masse wurde erstmals von M. Berry und R. Mondragon für Neutrino Billards hergeleitet [20] und unter anderem zur Untersuchung der Energiespektren von Graphen-Dots, -Antidots und -Ringen in Abhängigkeit eines senkrechten Magnetfelds genutzt [21–24]. Da diese Randbedingung noch nicht im  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter untersucht wurde, wollen wir der Frage nachgehen, wie sie sich im Zusammenhang mit einem externen Magnetfeld auf das Energiespektrum und insbesondere das flache Band auswirkt. In diesem Kapitel wird nach der Herleitung der Berry Phase und einer analytischen Berechnung der Landau-Level die Randbedingung unendlicher Masse im  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter hergeleitet, die zur Untersuchung des Einflusses eines senkrechten Magnetfeldes auf Dirac-Weyl Quasiteilchen in einer abgeschlossenen Dot-Geometrie angewandt wird.

### 2.1. Herleitung der Berry Phase und Anwendung auf das $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$ Gitter

Im Jahre 1984 hat Michael Berry die adiabatische Entwicklung von Energieeigenzuständen entlang eines geschlossenen Weges im Parameterraum untersucht [39]. Nach der Entwicklung erhält man die Eigenzustände zuzüglich einer Phasendifferenz, die aus dem Zeitintegral der Energie (dividiert durch  $\hbar$ ) und der Berry Phase besteht. Im Folgenden soll ein Ausdruck für die Berry Phase in der Form eines geschlossenen Wegintegrals im Parameterraum hergeleitet und auf die Bänder des  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitters angewandt werden. Es wird sich zeigen, dass die Berry Phase vom Skalierungsparameter  $\alpha$  abhängt. Die  $\alpha$ -abhängige Berry Phase hat direkten Einfluss auf die orbitale Suszeptibilität [8, 13], die Hall-Quantisierung und die optischen Leitfähigkeit [40]. Weiter wird sich die variable Berry Phase auch in den Landau-Levels bemerkbar machen.

Das betrachtete quantenmechanische System wird durch einen Hamilton-Operator  $H$  beschrieben, der von einem die Umgebung parametrierenden mehrdimensionalen, reellen Parameter  $R$  abhängt. Die Zeitentwicklung eines Zustands  $|\psi(t)\rangle$  ist gegeben durch die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$H(R(t)) |\psi(t)\rangle = i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle. \quad (2.1)$$

Zu jeder Zeit  $t$  kann eine Basis aus Eigenzuständen  $|n(R(t))\rangle$  des Hamilton-Operators gewählt

werden, die die Eigenwertgleichung

$$H(R(t)) |n(R(t))\rangle = E_n(R(t)) |n(R(t))\rangle \quad (2.2)$$

erfüllt. Diese Eigenzustände werden durch die Quantenzahl  $n$  gekennzeichnet. Wir nehmen an, dass das Spektrum von  $H$  diskret ist, die Eigenwerte nicht entartet sind und während der Entwicklung keine „level crossings“ auftreten. Die Umgebung, und damit auch  $R(t)$ , wird adiabatisch verändert. Wenn das System im  $n$ -ten Energieeigenzustand

$$|\psi(0)\rangle = |n(R(0))\rangle \quad (2.3)$$

startet, dann besagt das adiabatische Theorem, dass das System während der gesamten Entwicklung im  $n$ -ten Eigenzustand des momentanen Hamilton-Operators bleibt. Dies lässt jedoch die Möglichkeit eines Phasenfaktors  $\exp(i\phi)$  zu, den der Zustand während der Entwicklung dazu gewinnen kann

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\phi} |n(R(t))\rangle. \quad (2.4)$$

Dieser Phasenfaktor ist nicht identisch mit dem dynamischen Faktor

$$\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \quad (2.5)$$

aus der Zeitentwicklung, da formal ein weiterer Term zu dieser Phase addiert werden kann, der weder durch das adiabatische Theorem noch durch die Schrödingergleichung verboten ist. Dieser zusätzliche Term wird *Berry Phase* genannt

$$\phi = \theta_n(t) + \Phi_n(t) \quad (2.6)$$

wird berechnet, wenn der Ansatz aus Gl. (2.4) zusammen mit Gl. (2.6) in die Schrödingergleichung aus Gl. (2.1) eingesetzt wird. Man erhält

$$\partial_t |n(R)\rangle + i \frac{d}{dt} \Phi_n(t) |n(R)\rangle = 0 \quad (2.7)$$

mit der Abkürzung  $R(t) = R$ . Multiplikation von links mit  $\langle n(R)|$  und Ausnutzen der Normierung des Zustands liefert

$$\frac{d}{dt} \Phi_n(t) = i \langle n(R) | \partial_t |n(R)\rangle \quad (2.8)$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dt} \Phi_n(t) = i \langle n(R) | \nabla_R |n(R)\rangle \frac{dR}{dt} \quad (2.9)$$

und nach Integration erhalten wir

$$\Phi_n(t) = i \int_{R_i}^{R_f} \langle n(R) | \nabla_R |n(R)\rangle dR. \quad (2.10)$$

Wenn wir die zyklische Evolution entlang eines geschlossenen Pfades  $C$  in einer Zeit  $T$  betrachten, sodass  $R(0) = R(T)$ , dann erhalten wir den finalen Ausdruck für die Berry Phase

$$\Phi_n(t) = i \oint_C \langle n(R) | \nabla_R |n(R)\rangle dR. \quad (2.11)$$

Zu beachten ist, dass die Berry Phase reell ist, was direkt aus der Normierung der Zustände  $|n(R)\rangle$  folgt. Wir zeigen zunächst, dass  $\langle n|\nabla_R n\rangle$  rein imaginär ist

$$\nabla_R \langle n|n\rangle = 0 \quad (2.12)$$

$$\Leftrightarrow \langle \nabla_R n|n\rangle + \langle n|\nabla_R n\rangle = \langle n|\nabla_R n\rangle^* + \langle n|\nabla_R n\rangle = 0 \quad (2.13)$$

$$\Leftrightarrow 2\text{Re} \langle n|\nabla_R n\rangle = 0. \quad (2.14)$$

Da nach Gl. (2.14) der Ausdruck  $\langle n|\nabla_R n\rangle$  rein imaginär ist, muss deshalb  $\Phi_n(t)$  rein reell sein. Da wir im Abschnitt 1.2.2 die Wellenfunktionen des freien Dirac-Weyl Quasiteilchens für die drei Banddispersionen in der Nähe des  $K$  oder  $K'$  Punkts berechnet haben, können wir mit der Definition aus Gl. (2.10) die Berry Phase im  $\mathbf{k}$ -Raum durch

$$\Phi_{s,\tau} = \oint_C \langle \psi_{s,\tau} | i \nabla_{\mathbf{k}} | \psi_{s,\tau} \rangle \cdot d\mathbf{k} \quad (2.15)$$

berechnen. Für die dispersiven Bänder erhalten wir nach einsetzen der Wellenfunktionen aus Gl. (1.30) das Integral

$$\Phi_{s,\tau} = \frac{i}{2} \oint_C \left( \tau \cos \varphi e^{i\tau\theta_{\mathbf{k}}}, \quad s, \quad \tau \sin \varphi e^{-i\tau\theta_{\mathbf{k}}} \right) \begin{pmatrix} -i \cos \varphi e^{-i\tau\theta_{\mathbf{k}}} \nabla_{\mathbf{k}} \theta_{\mathbf{k}} \\ 0 \\ i \sin \varphi e^{i\tau\theta_{\mathbf{k}}} \nabla_{\mathbf{k}} \theta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} d\mathbf{k}. \quad (2.16)$$

Der Pfad  $C$  wird bei einer festen Energie  $E$  gewählt und kann durch  $d\mathbf{k} = k e_{\theta_{\mathbf{k}}} d\theta_{\mathbf{k}}$  parametrisiert werden. Wir setzen die Parametrisierung und die Definition von  $\nabla_{\mathbf{k}}$  in Polarkoordinaten ( $k = |\mathbf{k}|$ )

$$\nabla_{\mathbf{k}} = e_{\kappa} \partial_{\kappa} + \frac{1}{k} e_{\theta_{\mathbf{k}}} \partial_{\theta_{\mathbf{k}}} \quad (2.17)$$

in das Integral ein und erhalten für die Berry Phase der dispersiven Bänder

$$\Phi_{s,\tau}(\alpha) = \frac{\tau}{2} \cos 2\varphi \int_0^{2\pi} d\theta_{\mathbf{k}} = \tau \pi \cos 2\varphi = \tau \pi \cdot \frac{1 - \alpha^2}{1 + \alpha^2}. \quad (2.18)$$

Die Berry Phase nach Gl. (2.18) hängt kontinuierlich von  $\alpha$  ab und variiert von  $\Phi_{s,\tau}(0) = \tau \pi$  (Graphen) bis  $\Phi_{s,\tau}(1) = 0$  (Dice-Gitter). Diese Berry Phase ist nicht topologisch [14], da eine kontinuierliche Deformation des Gitters einen Effekt auf die Berry Phase hat. Für das flache Band mit der zugehörigen Wellenfunktion aus Gl. (1.31) wird analog vorgegangen und man erhält

$$\Phi_{0,\tau} = -2\pi \tau \cos 2\varphi = -2\pi \tau \cdot \frac{1 - \alpha^2}{1 + \alpha^2}. \quad (2.19)$$

Die Berry Phase ist eichinvariant und ist bis auf modulo  $2\pi$  definiert, weiterhin gilt

$$\Phi_{0,\tau} + \sum_{s=\pm 1} \Phi_{s,\tau} = 0, \quad (2.20)$$

$$\sum_{\tau=\pm 1} \Phi_{s/0,\tau} = 0. \quad (2.21)$$

## 2.2. $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$ Gitter im konstanten Magnetfeld — Landau-Level

Wir berechnen nun das Energiespektrum des  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitters unter dem Einfluss eines senkrechten Magnetfeldes  $\mathbf{B} = B e_z$ . Dazu wird im Hamilton-Operator aus Gl. (1.20) durch die minimalen

Kopplung  $\mathbf{p} \mapsto \mathbf{p} + e\mathbf{A}$  ein Vektorpotential  $\mathbf{A}$  berücksichtigt. Durch  $\mathbf{A} = -By\mathbf{e}_x$  ist das Vektorpotential in der Landau-Eichung angegeben und beschreibt ein Magnetfeld  $\nabla \times \mathbf{A} = B\mathbf{e}_z$  senkrecht zum  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitter. Der Hamilton-Operator lautet dann

$$H_\tau = v_F\tau \begin{pmatrix} 0 & \cos\varphi \{p_x + eBy - i\tau p_y\} & 0 \\ \cos\varphi \{p_x + eBy + i\tau p_y\} & 0 & \sin\varphi \{p_x + eBy - i\tau p_y\} \\ 0 & \sin\varphi \{p_x + eBy + i\tau p_y\} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

mit der Beziehung  $H_{\tau=-1} = -H_{\tau=1}^*$ . In Analogie zum quantenmechanischen harmonischen Oszillator führen wir Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ein

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{\hbar}{2eB}} (p_x + ip_y - eBy), \quad (2.23)$$

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{2eB}} (p_x - ip_y - eBy), \quad (2.24)$$

die die Kommutatorrelation  $[a, a^\dagger] = \mathbb{1}$  erfüllen. Diese Operatoren wirken wie die üblichen Leiteroperatoren

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (2.25)$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (2.26)$$

auf Fockzustände  $|n\rangle$ . Damit schreibt sich der Hamilton-Operator am  $K$ -Punkt als

$$H_{\tau=+1} = \hbar\omega_c \begin{pmatrix} 0 & \cos\varphi \cdot a & 0 \\ \cos\varphi \cdot a^\dagger & 0 & \sin\varphi \cdot a \\ 0 & \sin\varphi \cdot a^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

mit der Zyklotronfrequenz  $\omega_c = \sqrt{2}v_F/l_B$  und der magnetischen Länge  $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ . Für beliebiges  $\varphi$  wird zur Berechnung die Wellenfunktion

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \beta_1 |l\rangle \\ \beta_2 |m\rangle \\ \beta_3 |n\rangle \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

benutzt, die aus den Fockzuständen  $|l\rangle$ ,  $|m\rangle$  und  $|n\rangle$  besteht. Die  $\beta_i$  mit  $i \in \{1, 2, 3\}$  sind Normierungskonstanten. Unter Ausnutzung der Eigenwertgleichung  $H_{\tau=+1}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$  mit dem Hamilton-Operator aus Gl. (2.27) und der skalierten Energie  $\varepsilon = E/\hbar\omega_c$  erhalten wir

$$\begin{pmatrix} \cos\varphi \cdot \beta_2 \sqrt{m} |m-1\rangle \\ \cos\varphi \cdot \beta_1 \sqrt{l+1} |l+1\rangle + \sin\varphi \cdot \sqrt{n} |n-1\rangle \\ \sin\varphi \cdot \beta_2 \sqrt{m+1} |m+1\rangle \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \beta_1 |l\rangle \\ \beta_2 |m\rangle \\ \beta_3 |n\rangle \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Hieraus wird deutlich, dass  $m = n - 1$  und  $l = m - 1$ , weshalb wir das Gleichungssystem in Termen von  $m$  ausdrücken können

$$\cos\varphi \beta_2 \sqrt{m} = \varepsilon \beta_1, \quad (2.30)$$

$$\cos\varphi \beta_1 \sqrt{m} + \sin\varphi \beta_3 \sqrt{m+1} = \varepsilon \beta_2, \quad (2.31)$$

$$\sin\varphi \beta_2 \sqrt{m+1} = \varepsilon \beta_3. \quad (2.32)$$

Auflösen nach der skalierten Energie  $\varepsilon$  liefert

$$\varepsilon^2 = m + \sin^2\varphi \quad (2.33)$$

bzw.

$$E_{m,\tau=+1} = \pm\hbar\omega_c \sqrt{m + \frac{1}{2}(1 - \cos 2\varphi)}. \quad (2.34)$$

Im  $K'$ -Valley wird analog vorgegangen, was auf

$$E_{m,\tau=-1} = \pm\hbar\omega_c \sqrt{m + \frac{1}{2}(1 + \cos 2\varphi)} \quad (2.35)$$

führt. Die Landau-Level ergeben mit der variablen Berry Phase aus Gl. (2.18) dann

$$E_{m,\tau} = \pm\hbar\omega_c \sqrt{m + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\Phi_{s,\tau}(\alpha)}{\pi} \right)}. \quad (2.36)$$

Das flache Band mit  $E_m = 0$  bleibt für alle  $\alpha$  erhalten [8]. Für  $\alpha = 0$  reduziert sich Gl. (2.36) auf

$$E_{m,\tau} = \hbar\omega_c \sqrt{m + \delta_{\tau,-1}}. \quad (2.37)$$

Dieses Ergebnis enthält ein flaches  $E_{m=0,+} = 0$  Landau-Level und reproduziert damit am  $K$  Punkt die Landau-Level für Graphen [41]. Am  $K'$  Punkt besitzt unsere Lösung kein  $E_{m,-} = 0$  Landau-Level und weicht damit von Graphen ab. Das  $m = 0$  Niveau am  $K'$  Punkt ist proportional zu  $\sqrt{B}$ . Im Dice Fall für  $\alpha = 1$  vereinfacht sich Gl. (2.36) auf

$$E_{m,\tau} = \hbar\omega_c \sqrt{m + \frac{1}{2}} \quad (2.38)$$

und bestätigt die bekannten Landau-Level des Dice-Gitters [3].

In Abb. 2.1 (a) sind die ersten drei Landau Level  $m \in \{0, 1, 2\}$  für ausgewählte  $\alpha$  nach Gl. (2.36) ohne das topologische flache Band darstellt. Wie bereits diskutiert, existiert am  $K$  Punkt für  $\alpha = 0$  ein  $E = 0$  Landau-Level. Mit steigendem  $\alpha$  sinkt der Abstand der Energien innerhalb eines Landau Levels  $m$ . Abbildung 2.1 (b) zeigt die Abhängigkeit der Landau-Level vom Skalierungsparameter  $\alpha$ . Das  $m$ -te Landau Level des  $K$  Punktes stimmt mit dem  $m + 1$ -te Landau-Level des  $K'$  Punktes für  $\alpha = 0$  überein. Die Zweifachentartung der Landau-Level bezüglich des Valley-Freiheitsgrades, die aus Graphen bekannt ist, wird für alle  $\alpha \neq 0, 1$  aufgehoben.

### 2.3. Die Randbedingung unendlicher Masse

Wir wollen in diesem Kapitel abgeschlossene Systeme wie  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$ -Dots unter Einfluss eines externen Magnetfelds betrachten, weshalb wir zum räumlichen Einfang eine Randbedingung für Dirac-Weyl Quasiteilchen herleiten wollen. Da masselose Dirac-Weyl Quasiteilchen aufgrund des Klein-Tunnel-Effekts im  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter nicht durch elektrostatische Potentiale räumlich eingeschränkt werden können [26], muss ein neues analytisches Hilfsmittel eingeführt werden. Um in einem Gebiet  $D$  ein Dirac-Weyl Quasiteilchen einzuschließen, wird außerhalb des Gebiets ein Massenterm  $\Delta M$  zum Hamilton-Operator addiert (vgl. Abschnitt 1.2.3), welcher dort massive Dirac-Weyl Quasiteilchen der Masse  $\Delta$  erzeugt. Der Massenterm führt zusätzlich zu einer Bandlücke, die mit der Masse skaliert. Im Grenzwert unendlicher Masse existieren dann außerhalb des Gebiets aufgrund der unendlichen Bandlücke keine Zustände, in die gestreut werden kann. Die Randbedingung unendlicher Masse (infinite mass boundary) wurde für Neutrino Billards im Jahre 1987 von M. Berry und R. J. Mondragon entwickelt [20] und bietet ein einfache analytische Möglichkeit, Neutrinos räumlich auf ein

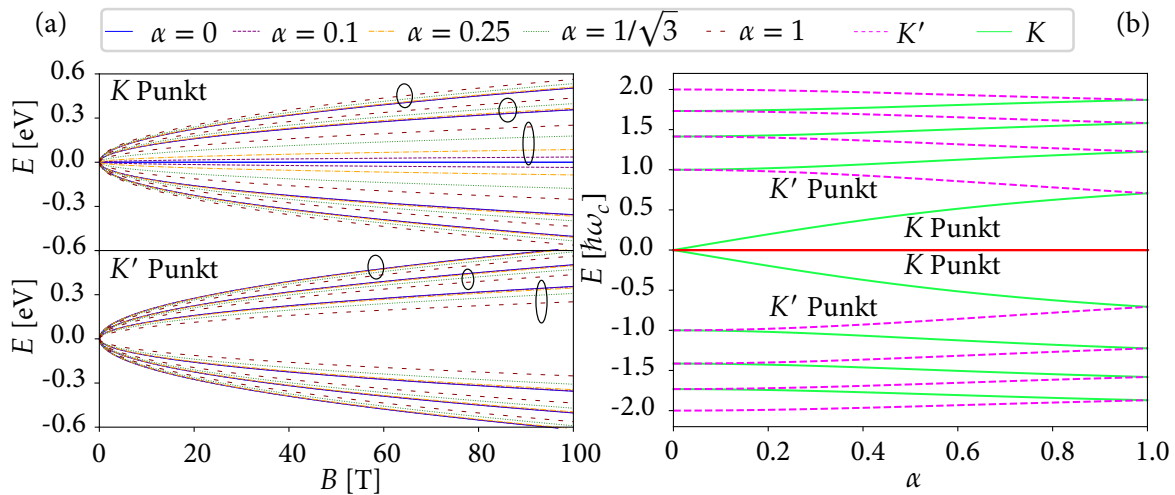


Abbildung 2.1.: (a) Landau Level  $E_{m,\tau}$  für die ersten  $m = 0, 1, 2$  in Abhängigkeit des Magnetfeldes für den  $K$  Punkt ( $\tau = +1$ ) und den  $K'$  Punkt ( $\tau = -1$ ). Die Wahl der dargestellten  $\alpha$  beinhaltet den Fall für Graphen ( $\alpha = 0$ ), Dice-Gitter ( $\alpha = 1$ ), Kane-Fermionen ( $\alpha = 1/\sqrt{3}$ ) und einige weitere repräsentative Werte. (b) Die ersten vier Landau Level  $m = 0, \dots, 3$  skaliert mit  $\hbar\omega_c$ , um die Abhängigkeit der Landau Level von der Berry Phase zu verdeutlichen. In rot ist das flache Band dargestellt.

Gebiet  $D$  einzuschränken. Für Pseudospin-1/2 Quasiteilchen wurden Randbedingungen ausführlich in [42, 43] diskutiert. In diesem Abschnitt wird der Herleitung von [20] gefolgt.

Essentiell zur Ableitung der Randbedingung im  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter ist die Untersuchung der Hermitizität des Hamilton-Operators auf einem Gebiet  $D$ . Das Gebiet  $D$  definiert einen Raumbereich, innerhalb dem  $\Delta = 0$  und außerhalb  $\Delta \neq 0$  gilt. Die Forderung der Hermitizität führt auf eine lokale Bedingung an die Stromdichte am Rand des Gebietes  $\partial D$ . Aus dieser Bedingung kann eine Relation zwischen den Komponenten der Wellenfunktion aus dem Gebiet  $D$  abgeleitet werden, die aber noch eine unbestimmte reelle Größe  $\Gamma$  beinhaltet. Die Größe  $\Gamma$  wird aus der Lösung eines Streuproblems bestimmt, indem eine ebene Welle an der Grenze  $\partial D$  gestreut wird. Durch die Lösung des Streuproblems kann die Wellenfunktion auf dem Gebiet  $D$  im Grenzfall  $\Delta \rightarrow \infty$  in die Randbedingung eingesetzt werden, sodass im nächsten Schritt ein Ausdruck für  $\Gamma$  gewonnen wird.

### 2.3.1. Herleitung der Randbedingung

Wir fordern zunächst die Hermitizität des Hamilton-Operators ( $\hbar = c = 1$ )

$$H_\tau^\varphi = v_F \mathbf{S}_\tau^\varphi \cdot \mathbf{p} + \Delta(\mathbf{r})M \quad (2.39)$$

in einem masselosen, durch Kurvenlänge  $s$  parametrisierten Gebiet  $D$  (d.h.  $\Delta(\mathbf{r}) = 0$  f.a.  $\mathbf{r} \in D$ ) mit einem beliebigen Massenterm  $M$  ohne elektromagnetische Potentiale. Wir werden nun zeigen, dass  $H_\tau^\varphi$  nur dann hermitesch ist, wenn der Strom projiziert auf den Normalenvektor  $\mathbf{n}_B(s)$  an jedem Randpunkt  $s$  verschwindet. Es gilt dann  $\langle \psi_\tau | \mathbf{n}_B(s) \cdot \hat{\mathbf{j}}_\tau | \psi_\tau \rangle = 0$ . Die zugehörige Geometrie ist in Abb. 2.2 dargestellt. Für  $x < 0$  gilt  $\Delta(\mathbf{r}) = 0$ , außerhalb des Gebiets  $D$  mit der Grenze entlang der  $y$ -Achse  $\Delta(\mathbf{r}) \neq 0$ . Der Normalenvektor  $\mathbf{n}_B = \mathbf{e}_x$  steht senkrecht auf der  $y$ -Achse.

Wir zeigen diese Aussage für beide Valleys mit Index  $\tau$  simultan, da aufgrund der fehlenden Intervalle-Streuung beide Valleys unabhängig voneinander sind.

*Beweis.* Sei  $D = \{\mathbf{r} \in \mathbb{R}^2 | \Delta(\mathbf{r}) = 0\}$  ein Gebiet, dessen Rand  $\partial D$  durch die Bogenlänge  $s$  parametrisiert wird. Der Normaleneinheitsvektor an jedem Punkt  $s$  des Rands  $\partial D$  mit Winkel  $\Theta(s)$  bzgl.  $x$ -Achse sei

$$\mathbf{n}_B(s) = (\cos \Theta(s), \sin \Theta(s)). \quad (2.40)$$



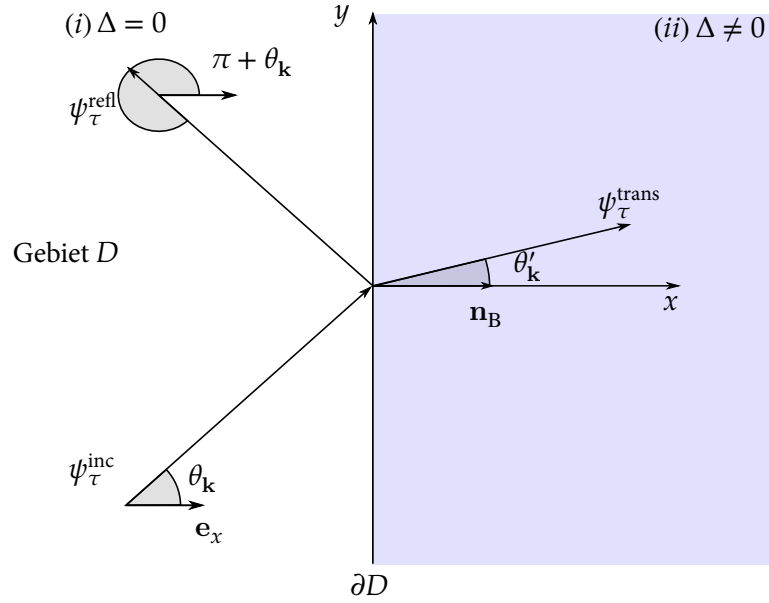


Abbildung 2.2.: Schematische Darstellung des Streuproblems am Rand des Gebiets  $\partial D$ , welcher den Raum in den Bereich (i) für  $x < 0$  mit  $\Delta = 0$  und den Bereich (ii) für  $x \geq 0$  mit  $\Delta \neq 0$  teilt. Die einlaufende Welle  $\psi_\tau^{\text{inc}}$  mit Einfallswinkel  $\theta_k$  wird innerhalb des Bereichs (i) in die reflektierte Welle  $\psi_\tau^{\text{refl}}$  und in die transmittierte Welle  $\psi_\tau^{\text{trans}}$  mit gebrochenem Winkel  $\theta'_k$  im Bereich (ii) gestreut.

Dann gilt für den Erwartungswert des Hamilton-Operators aus Gl. (2.39) auf dem Gebiet  $D$

$$\langle H_\tau^\varphi \rangle = \iint_D dx dy \psi_\tau^* H_\tau^\varphi \psi_\tau = -i v_F \iint_D dx dy \psi_\tau^* \mathbf{S}_\tau^\varphi \nabla \psi_\tau \quad (2.41)$$

$$= -i \iint_D dx dy \nabla \cdot \underbrace{(\psi_\tau^* v_F \mathbf{S}_\tau^\varphi \psi_\tau)}_{\langle \psi_\tau | \hat{\mathbf{j}}^\tau | \psi_\tau \rangle = \mathbf{j}^\tau} + i v_F \iint_D dx dy \nabla \cdot (\psi_\tau)^* \mathbf{S}_\tau^\varphi \psi_\tau \quad (2.42)$$

$$= -i \oint_{\partial D} ds \mathbf{n}_B(s) \cdot \mathbf{j}^\tau(s) + \langle H_\tau^\varphi \rangle^*. \quad (2.43)$$

Die letzte Zeile ergibt sich aus der Greenschen Formel bzw. dem Gauß-Gesetz in zwei Dimensionen. Da wir Hermitizität von  $H_\tau^\varphi$  fordern, ist  $\langle H_\tau^\varphi \rangle \in \mathbb{R}$ . Dann gilt auch  $\langle H_\tau^\varphi \rangle - \langle H_\tau^\varphi \rangle^* = 0$ . Mit Gl. (2.43) folgt dann

$$\langle H_\tau^\varphi \rangle - \langle H_\tau^\varphi \rangle^* = 2i \text{Im} H_\tau^\varphi = -i \oint_{\partial D} ds \mathbf{n}_B(s) \cdot \mathbf{j}^\tau(s) = 0. \quad (2.44)$$

Die Gl. (2.44) ist äquivalent zur Forderung nach der Hermitizität des Hamilton-Operators auf dem Gebiet  $D$ . Damit die Gl. (2.44) an jedem Punkt  $s$  erfüllt ist, muss an jedem Punkt

$$\mathbf{n}_B(s) \cdot \mathbf{j}^\tau(s) = 0 \quad (2.45)$$

gelten. Die Stromdichte projiziert auf den normalen Vektor verschwindet somit an jedem Punkt  $s$ . ■

Aus Gl. (2.45) und der Stromdichte aus Gl. (1.24) folgt

$$\langle \psi_\tau | \mathbf{n}_B \cdot \hat{\mathbf{j}}^\tau | \psi_\tau \rangle = 2\tau \text{Re} \left\{ (\psi_H^\tau)^* (\cos \varphi \cdot e^{i\tau\Theta} \psi_A^\tau + \sin \varphi \cdot e^{-i\tau\Theta} \psi_B^\tau) \right\} = 0, \quad (2.46)$$

woraus wir nun einen expliziten Ausdruck für die projizierte Stromdichte in Komponentenschreibweise der Wellenfunktion ableiten. Um die Forderung aus Gl. (2.45) zu erfüllen, spalten wir die Komponenten des Spinors geeignet in Real- und Imaginärteil (z.B.  $\psi_B^\tau = a+ib$ ,  $\cos \varphi e^{i\tau\Theta} \psi_A^\tau = c+id$ ,  $\sin \varphi e^{-i\tau\Theta} \psi_C^\tau = g+ih$ ) auf. Nach einigen Umformungen erhält man die Bedingung

$$\frac{a}{b} = -\frac{d+h}{c+g}. \quad (2.47)$$

Bis auf eine reelle Funktion  $\Gamma^\tau(s)$  ist  $a/b$  bestimmt und wir erhalten

$$\psi_B^\tau = i\Gamma^\tau(s) \left( \cos \varphi e^{i\tau\Theta(s)} \psi_A^\tau + \sin \varphi e^{-i\tau\Theta(s)} \psi_C^\tau \right). \quad (2.48)$$

Die Gl. (2.48) entspricht für  $\alpha = 0$  ( $\varphi = 0$ ) der Randbedingung aus [20]. Durch die Bestimmung von  $\Gamma^\tau(s)$  im Grenzfall unendlicher Massen außerhalb des Gebiets  $D$  können abgeschlossene Systeme betrachtet werden, indem die Eigenfunktionen auf  $D$  in die Randbedingung eingesetzt werden, statt erneut ein Streuproblem zu lösen.

### 2.3.2. Bestimmung von $\Gamma$ über die Lösung eines Streuproblems

Die abgeleitete Randbedingung aus Gl. (2.48) besitzt einen unbestimmten Koeffizienten  $\Gamma^\tau(s)$ , der vom Rand bzw. dem Valley-Index  $\tau$  abhängen kann. Zur Bestimmung der Größe  $\Gamma^\tau$  wird ein Hamilton-Operator ( $v_F = 1$ )

$$H_\tau^\varphi = \mathbf{S}_\tau^\varphi \cdot \mathbf{p} + \Delta\Theta(x)M \quad (2.49)$$

definiert, der die Heaviside-Sprungfunktion  $\Theta(x)$  und den Massenterm  $M = \pm U$ ,  $S_z$  aus Gl. (1.33) bzw. Gl. (1.36) beinhaltet. Durch den Hamilton-Operator wird der Raum in den Bereich (i) für  $x < 0$  mit  $\Delta = 0$  und den Bereich (ii) für  $x \geq 0$  mit  $\Delta \neq 0$  aufgeteilt. Bei dieser Wahl der Orientierung der Barriere ist  $\Theta(s) = 0$ , da  $\mathbf{n}_B = \mathbf{e}_x$ . Die Bestimmung von  $\Gamma^\tau$  erfolgt über die Lösung eines Streuproblems, bei dem die einlaufende, ebene Welle  $\psi_\tau^{\text{inc}}$  im Raumbereich (i) an einer Massenstufe streut und sich in einen reflektierten Anteil  $\psi_\tau^{\text{refl}}$  und einen transmittierten Anteil  $\psi_\tau^{\text{trans}}$  im Bereich (ii) aufteilt. Die Wellenfunktionen in den jeweiligen Bereichen setzen sich aus

$$\psi_\tau^{(i)} = \psi_\tau^{\text{inc}} + r_{M,\tau} \psi_\tau^{\text{refl}} \quad \text{und} \quad \psi_{M,\tau}^{(ii)} = t_{M,\tau} \psi_{M,\tau}^{\text{trans}} \quad (2.50)$$

zusammen, wobei die Koeffizienten  $r_{M,\tau}$  und  $t_{M,\tau}$  die Amplituden der reflektierten bzw. transmittierten Wellenfunktion angeben. Nach der Berechnung des Reflexionskoeffizienten  $r_{M,\tau}$  wird die Wellenfunktion  $\psi_\tau^{(i)}$  in die Gl. (2.48) eingesetzt. Im Limes  $\Delta \rightarrow \infty$  ergibt sich dann der Koeffizient  $\Gamma^\tau$  der Randbedingung unendlicher Masse. Da die Massenstufe symmetrisch entlang der  $y$ -Achse ist, wird  $p_y$  beim Streuprozess erhalten. In ebenen Polarkoordinaten folgt für den Impuls

$$p_y = |E| \sin \theta_k = \sqrt{E^2 - \Delta^2} \sin \theta'_k \quad (2.51)$$

$$\Leftrightarrow \sin \theta'_k = \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} \sin \theta_k \xrightarrow{\Delta \rightarrow \pm\infty} 0 \quad (2.52)$$

$$\Leftrightarrow \theta'_k = 0. \quad (2.53)$$

Die transmittierte Welle breitet sich nur in  $x$ -Richtung aus. Die Eigenfunktionen im Raumbereich (i) sind aus Gl. (1.30) bekannt, weshalb wir aufgrund der Erhaltung von  $p_y$  mit  $p_x \mapsto -p_x$  eine Wellenfunktion aus einem einlaufenden Anteil mit Winkel  $\theta_k$  und einem reflektiertem Anteil mit  $\pi + \theta_k$  (siehe Abb. 2.2)

$$\psi_\tau^{(i)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \tau \cos \varphi e^{-i\tau\theta_k} \\ s \\ \tau \sin \varphi e^{i\tau\theta_k} \end{pmatrix} e^{ip_x x + ip_y y} + r_\tau \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \tau \cos \varphi e^{i\tau\theta_k} \\ -s \\ \tau \sin \varphi e^{-i\tau\theta_k} \end{pmatrix} e^{-ip_x x + ip_y y} \quad (2.54)$$

erhalten. Wir werden nun die Eigenfunktionen in (ii) für die jeweiligen Massenterme  $M = \pm U$ ,  $S_z$  berechnen und anschließend die Randbedingung für unendliche Massen durch die Lösung eines Streuproblems an einer ebenen Massenstufe festlegen.

2.3.2.1. Bestimmung von  $\Gamma$  mit  $M = \pm U$ 

Zunächst berechnen wir die Wellenfunktion aus der Eigenwertgleichung

$$(\mathbf{S}_\tau^\varphi \cdot \mathbf{p} \pm \Delta U) \psi_{U,\tau}^{\text{trans}} = E \psi_{U,\tau}^{\text{trans}}. \quad (2.55)$$

Wir nehmen an, dass  $\Delta \gg E$ , weshalb  $E^2 - \Delta^2 = p_x'^2 < 0$  und dadurch  $p_x' = iq$  (+ aufgrund der Normierbarkeit). Wir wählen den Ansatz  $\psi_{U,\tau}^{\text{trans}} = (a_\tau, b_\tau, c_\tau)^T e^{ip' \cdot \mathbf{r}}$ , woraus sich durch Einsetzen in Gl. (2.55) das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \pm\Delta & -i\tau \cos \varphi (\partial_x - i\tau \partial_y) & 0 \\ -i\tau \cos \varphi (\partial_x + i\tau \partial_y) & \mp\Delta & -i\tau \sin \varphi (\partial_x - i\tau \partial_y) \\ 0 & -i\tau \sin \varphi (\partial_x + i\tau \partial_y) & \pm\Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_\tau \\ b_\tau \\ c_\tau \end{pmatrix} e^{-qx+ip_y y} \quad (2.56)$$

$$= s|E| \begin{pmatrix} a_\tau \\ b_\tau \\ c_\tau \end{pmatrix} e^{-qx+ip_y y}$$

ergibt. Die einzelnen Gleichungen lauten

$$\text{I: } -i\tau \cos \varphi (q - \tau p_y) b = (\pm\Delta - s|E|) a_\tau, \quad (2.57)$$

$$\text{II: } -i\tau (\cos \varphi (q + \tau p_y) a_\tau + \sin \varphi (q - \tau p_y) c_\tau) = (\mp\Delta + s|E|) b_\tau, \quad (2.58)$$

$$\text{III: } -i\tau \sin \varphi (q + \tau p_y) b_\tau = (\pm\Delta - s|E|) c_\tau. \quad (2.59)$$

Unter Ausnutzung der Normierung auf ein Einheitsgebiet und dem Gleichungssystem erhalten wir

$$\psi_{U,\tau}^{(ii)} = \frac{t_{U,\tau}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \tau a_\tau \\ b_\tau \\ \tau b_\tau \end{pmatrix} \frac{e^{-qx+ip_y y}}{\Delta q^2 \pm s|E| p_y^2 - \tau \cos 2\varphi (p_y q \Delta \pm s|E| p_y q)} \quad (2.60)$$

mit

$$a_\tau = \mp i \cos \varphi \sqrt{(q - \tau p_y)^2 (\Delta \pm s|E|)}, \quad (2.61)$$

$$b_\tau = \sqrt{(q^2 - p_y^2) (\Delta \mp s|E|)}, \quad (2.62)$$

$$c_\tau = \mp i \sin \varphi \sqrt{(q + \tau p_y)^2 (\Delta \pm s|E|)}. \quad (2.63)$$

Das Streuproblem nach Gl. (2.50) wird mit der Wellenfunktion im Raumbereich (i) aus Gl. (2.54) und der transmittierten Welle nach Gl. (2.60) gelöst, indem die Wellenfunktionen in die Stetigkeitsbedingung aus Gl. (1.49) bei  $x = 0$  und  $\Theta = 0$  eingesetzt werden. Im Grenzfall  $\Delta \rightarrow \infty$  ergibt sich

$$r_{U,\tau} = \frac{\pm is + \cos^2 \varphi e^{-i\tau \theta_k} + \sin^2 \varphi e^{+i\tau \theta_k}}{\pm is - \cos^2 \varphi e^{i\tau \theta_k} + \sin^2 \varphi e^{-i\tau \theta_k}}, \quad (2.64)$$

woraus wir den Reflexionskoeffizienten  $R = |r_\tau|^2 = 1$  erhalten. Mit  $R = 1$  wird die einlaufende Welle unabhängig vom Einfallswinkel und der Energie perfekt reflektiert.

Die unbekannte Größe  $\Gamma^\tau$  folgt durch Anwendung der abgeleiteten Randbedingung aus Gl. (2.48) bei  $x = 0$  und dem Winkel  $\Theta(s) = 0$  auf die Wellenfunktion im Raumbereich (i) aus Gl. (2.54) mit dem Reflexionskoeffizienten aus Gl. (2.64). Wir erhalten

$$\Gamma^\tau = \pm \tau, \quad (2.65)$$

wobei das  $\pm$  aus der Wahl des Vorzeichens der Massenmatrix  $M = \pm U$  in der Definition unseres Hamilton-Operators aus Gl. (2.55) stammt. Die allgemeine Randbedingung unendlicher Masse lautet

$$\psi_B^\tau = \pm i\tau (\cos \varphi \psi_A^\tau e^{i\tau\Theta} + \sin \varphi \psi_C e^{-i\tau\Theta}) \quad (2.66)$$

und kann aus der Rotationsinvarianz des Problems für beliebig orientierte, unendlich hohe Massenstufen gefolgert werden. Sie ist völlig analog zur Randbedingung unendlicher Masse in Graphen [20] für  $\alpha = 0$ .

Die Zustände des flachen Bands im Raumbereich (i) nach Gl. (1.31) erfüllen automatisch die Randbedingung, da für diese Zustände  $\psi_B^\tau = 0$  gilt und damit sogar  $j_\tau = 0$  (vgl. Abschnitt 1.2.2). Da mit der  $M = \pm U$  Randbedingung das flache Band während des Streuproblems im Raumbereich (ii) bei  $E_0 = \pm\Delta$  liegt und  $\Delta \rightarrow \infty$ , wird für endliche Energien im Raumbereich (i) nie  $E_0 = \pm\Delta$  gelten. Aus diesem Grund wird das flache Band im Raumbereich (i) nicht verändert und hat keinen weiteren Einfluss.

### 2.3.2.2. Bestimmung von $\Gamma$ mit $M = \tau S_z$

Wie im Abschnitt 1.2.3 diskutiert wurde, ist  $M = \tau S_z$  nur eine sinnvolle Massenmatrix, wenn wir das Dice-Gitter ( $\alpha = 1$ ) betrachten. Für die transmittierte Wellenfunktion gilt deshalb mit  $\alpha = 1$

$$H_{S_z}^{(ii)} \psi_{S_z, \tau}^{\text{trans}} = (\mathbf{S} \cdot \mathbf{p} + \tau V \cdot S_z) \psi_{S_z, \tau}^{\text{trans}} = s|E| \psi_{S_z, \tau}^{\text{trans}}, \quad (2.67)$$

mit der Dispersionsrelation  $E = s\sqrt{\mathbf{p}^2 + \Delta^2}$ . Setzen wir den Ansatz  $\psi_{S_z, \tau}^{\text{trans}} = (a_\tau, b_\tau, c_\tau)^T e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}}$  in Gl. (2.67) ein, erhalten wir ein Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \tau\Delta & \frac{1}{\sqrt{2}}(p'_x - ip'_y) & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(p'_x + ip'_y) & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(p'_x - ip'_y) \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(p'_x + ip'_y) & -\tau\Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_\tau \\ b_\tau \\ c_\tau \end{pmatrix} e^{ip'_x x + ip'_y y} = s|E| \begin{pmatrix} a_\tau \\ b_\tau \\ c_\tau \end{pmatrix} e^{ip'_x x + ip'_y y}, \quad (2.68)$$

welches sich aus

$$\text{I : } a_\tau \tau\Delta + \frac{b_\tau}{\sqrt{2}} |\mathbf{p}'| e^{-i\theta'_k} = s|E| a_\tau, \quad (2.69)$$

$$\text{II : } \frac{a_\tau}{\sqrt{2}} |\mathbf{p}'| e^{i\theta'_k} + c_\tau |\mathbf{p}'| e^{-i\theta'_k} = s|E| b_\tau, \quad (2.70)$$

$$\text{III : } \frac{b_\tau}{\sqrt{2}} |\mathbf{p}'| e^{i\theta'_k} - c_\tau \tau\Delta = s|E| c_\tau \quad (2.71)$$

zusammensetzt. Die Koeffizienten  $a_\tau, b_\tau, c_\tau$  können aus dem Gleichungssystem und der Normierung der Wellenfunktion auf das Einheitsgebiet eindeutig bestimmt werden und sind gegeben durch

$$a_\tau = \frac{\alpha_\tau}{2} e^{-i\Theta'_k}, \quad \alpha_\tau = 1 - \frac{s\tau\Delta}{E}, \quad (2.72)$$

$$b_\tau = \frac{s}{\sqrt{2}} \beta_\tau, \quad \beta_\tau = \sqrt{1 - \frac{V^2}{E^2}}, \quad (2.73)$$

$$c_\tau = \frac{\gamma_\tau}{2} e^{i\Theta'_k}, \quad \gamma_\tau = 1 + \frac{s\tau\Delta}{E}. \quad (2.74)$$

Sie stimmen mit den Resultaten aus [36] überein. Die Wellenfunktion im Raumbereich (ii) für  $M = \tau S_z$  lautet damit

$$\psi_{S_z, \tau}^{(ii)} = \frac{t_{S_z, \tau}}{2} \begin{pmatrix} \alpha_\tau e^{-i\theta'_k} \\ \sqrt{2} s \beta_\tau \\ \gamma_\tau e^{i\theta'_k} \end{pmatrix} e^{ip'_x x + ip'_y y} = \frac{t_{S_z, \tau}}{2} \psi_{S_z, \tau}^{\text{trans}}. \quad (2.75)$$

Der Reflexionskoeffizient  $r_{S_z, \tau}$  ergibt sich aus der Stetigkeit der Wellenfunktion aus Gl. (2.54) mit der transmittierten Welle nach Gl. (2.75) mittels Gl. (1.49) bei  $x = 0$  und  $\Theta = 0$  zu

$$r_{S_z, \tau} = \frac{1 - \cos \phi \sqrt{1 - \frac{\Delta^2}{E^2}}}{1 + \cos \phi \sqrt{1 - \frac{\Delta^2}{E^2}}} \xrightarrow{\Delta \rightarrow \pm\infty} -1. \quad (2.76)$$

Da  $R = |r|^2 = 1$ , wird die einlaufende Welle unabhängig vom Einfallswinkel und der Energie perfekt reflektiert. Der Reflexionskoeffizient aus Gl. (2.76) ist unabhängig vom Valley-Index  $\tau$ . Einsetzen von Gl. (2.54) mit  $\alpha = 1$  und dem Reflexionskoeffizienten aus Gl. (2.76) in die abgeleitete Randbedingung (2.48) führt auf

$$\psi_B^\tau = i\Gamma^\tau \cdot 0. \quad (2.77)$$

Daraus kann zwar kein Ausdruck für  $\Gamma^\tau$  bestimmt werden. Dennoch können wir eine Randbedingung ableiten, da aus

$$\psi_A^\tau + \psi_B^\tau = 0 \quad (2.78)$$

folgt, dass die auf den normalen Vektor projizierte Stromdichte verschwindet. Es gilt nach Gl. (2.46)  $\mathbf{n}_B \cdot \mathbf{j}_\tau = 0$ . Die allgemeine Randbedingung unendlicher Masse für  $M = \tau S_z$  lautet damit

$$\psi_A^\tau e^{i\tau\Theta} + \psi_C^\tau e^{-i\tau\Theta} = 0 \quad (2.79)$$

und besitzt im Gegensatz zu  $M = \pm U$  kein Analogon in Graphen. Zustände des flachen Bands erfüllen automatisch die Randbedingung, da für diese Zustände  $\psi_B^\tau = 0$  gilt und damit sogar  $j_\tau = 0$ .

## 2.4. Analytische Berechnung des Energiespektrums eines isolierten $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$ Dots unter Einfluss eines senkrechten Magnetfeldes

Als erste Anwendung der Randbedingungen unendlicher Masse im  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter werden wir das Energiespektrum eines isolierten Dots unter Einfluss eines senkrechten Magnetfeldes berechnen. Um die Randbedingungen unendlicher Masse für  $M = \pm U$  aus Gl. (2.66) bzw.  $M = \tau S_z$  für  $\alpha = 1$  aus Gl. (2.79) anzuwenden, berechnen wir zunächst die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators aus Gl. (1.20)

$$H_0^\varphi = v_F \mathbf{S}_\tau^\varphi \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}), \quad (2.80)$$

indem durch die minimale Kopplung  $\mathbf{p} \mapsto \mathbf{p} + e\mathbf{A}$  ein Vektorpotential  $\mathbf{A} = B/2(-y, x, 0)$  in symmetrischer Eichung berücksichtigt wurde. Das zugehörige Magnetfeld  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = B\mathbf{e}_z$  ist senkrecht zur Ebene des Gitters.

Der isolierte Dot des Radius  $R$  wird durch einen Massenterm  $\Delta(r)M$  mit

$$\Delta(r) = \begin{cases} 0, & \text{falls } r < R \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.81)$$

realisiert, damit definieren wir ein Gebiet  $D$  mit Normalenvektor

$$\mathbf{n}_B = \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{pmatrix}, \quad (2.82)$$

der an jedem Punkt des Rands  $\partial D$  senkrecht zum Tangentialvektor  $\mathbf{e}_\phi$  ist. Der gesamte Hamilton-Operator besteht dann aus

$$H_\tau^\varphi = H_0^\varphi + \Delta(r)M. \quad (2.83)$$

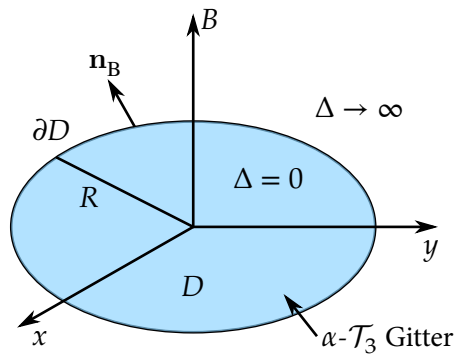


Abbildung 2.3.: Dot-Geometrie im  $\alpha\mathcal{T}_3$  Gitter mit Radius  $R$  und Masse  $\Delta$ , was durch ein Gebiet  $D$  (blau) mit Rand  $\partial D$  (schwarzer Kreis) definiert ist und einen Normalenvektor  $n_B$  besitzt. In  $z$ -Richtung wirkt ein externes Magnetfeld  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ .

In der Abb. 2.3 ist der isolierte Dot als Gebiet  $D$  mit Magnetfeld  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$  und Massenterm  $\Delta(r)M$  mit zugehörigem Einheitsnormalenvektor am Rand  $\partial D$  dargestellt.

Um die benötigten Eigenfunktionen von  $H_0^\varphi$  zu berechnen, werden aufgrund der Rotationssymmetrie ebene Polarkoordinaten  $(x, y) \mapsto (r, \phi)$  verwendet. Dies ergibt

$$H_0^\varphi = \tau \frac{\hbar v_F}{\sqrt{2}l_B} \begin{pmatrix} 0 & \cos \varphi L_-^\tau & 0 \\ \cos \varphi L_+^\tau & 0 & \sin \varphi L_-^\tau \\ 0 & \sin \varphi L_+^\tau & 0 \end{pmatrix} \quad (2.84)$$

in Matrixform mit dem Operator

$$L_\mp^\tau = -ie^{\mp i\tau\phi} \left\{ \partial_\rho \pm \frac{\tau L_z}{\hbar\rho} \pm \tau\rho \right\} \quad (2.85)$$

und den Ersetzungen  $l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ ,  $\rho = r/\sqrt{2}l_B$  und  $L_z = -i\hbar\partial_\phi$ . Die Eigenfunktionen bestimmen sich aus der Eigenwertgleichung

$$H_0^\varphi \psi_\tau = E_\tau \psi_\tau. \quad (2.86)$$

Aufgrund der Symmetrie des Problems kommutiert der Hamilton-Operator  $H_0^\varphi$  mit der  $z$ -Komponente des Gesamtdrehimpulses  $J_z = \tau\hbar S_z + L_z \mathbb{1}_{3 \times 3}$ , d.h. es gilt  $[H_0^\varphi, J_z] = 0$ . Da damit  $H_0^\varphi$  und  $J_z$  ein gemeinsames Eigenfunktionensystem besitzen, kann mit

$$J_z \psi_\tau(r, \phi) = \tau m \hbar \psi_\tau(r, \phi) \quad (2.87)$$

der Winkelanteil vom Ortsanteil separiert werden und wir erhalten

$$\psi_\tau(r, \phi) = \begin{pmatrix} \chi_A^\tau e^{i(m-\tau)\phi} \\ \chi_B^\tau e^{im\phi} \\ \chi_C^\tau e^{i(m+\tau)\phi} \end{pmatrix}. \quad (2.88)$$

Das Einsetzen des Ansatzes aus Gl. (2.88) in die Eigenwertgleichung (2.86) mit dem Hamilton-Operator aus Gl. (2.84) liefert drei Gleichungen. Durch Substitution der ersten und dritten Gleichung in die zweite Gleichung erhalten wir für die Komponente  $\chi_B^\tau$  eine Differentialgleichung

$$4\tau\varepsilon^2 \chi_B^\tau e^{im\phi} = \left( \cos^2 \varphi L_+^\tau L_-^\tau + \sin^2 \varphi L_-^\tau L_+^\tau \right) \chi_B^\tau e^{im\phi}, \quad (2.89)$$

mit der skalierten Energie  $\varepsilon_\tau = E_\tau/\hbar\omega_c$  und Zyklotronenergie  $\hbar\omega_c = \sqrt{2}\hbar v_F/l_B$ . Die Verwendung der Definition aus Gl. (2.85) führt auf

$$0 = \left\{ \partial_\rho^2 + \frac{1}{\rho} \partial_\rho - 2m + 4\varepsilon^2 + 2\tau \cos 2\varphi - \left( \frac{m^2}{\rho^2} + \rho^2 \right) \right\} \chi_B^\tau. \quad (2.90)$$

Mittels des Ansatzes  $\chi_B^\tau = \rho^{-m} e^{-\rho^2/2} f_B^\tau(\rho^2)$  reduziert sich die Differentialgleichung aus Gl. (2.90) auf einen Spezialfall der Kummerschen Differentialgleichung zweiter Ordnung ( $\eta = \rho^2$ )

$$0 = \left\{ \eta \partial_\eta^2 + ((1-m) - \eta) \partial_\eta + n_\tau \right\} f_B^\tau(\eta) \quad (2.91)$$

mit der Ersetzung  $n_\tau = \varepsilon_\tau^2 + (\tau \cos 2\varphi - 1)/2$ . Die Lösungen [44] lauten

$$f_B^\tau(\eta) = c_1 L_{n_\tau}^{-m}(\eta) + c_2 U_{-n_\tau}^{1-m}(\eta) \quad (2.92)$$

und setzen sich aus den generalisierten Laguerre-Polynomen  $L_n^{-m}$ , der konfluenten hypergeometrischen Funktion zweiter Art  $U_n^{1-m}$  und den Integrationskoeffizienten  $c_{1/2}$  zusammen, die durch die Angabe von Randwerten bzw. durch Normierung bestimmt werden. Die beiden übrigen Komponenten  $\chi_{A/C}^\tau$  berechnen sich durch Einsetzen der erhaltenen Lösung für  $\chi_B^\tau$  aus Gl. (2.92) in die Eigenwertgleichung (2.86). Wir erhalten explizit

$$\varepsilon_\tau \chi_A^\tau = -i\tau \cos \varphi \rho^{-m+\tau} e^{-\frac{\rho^2}{2}} \begin{cases} \partial_\eta f_B^+, & \text{falls } \tau = 1 \\ \eta \partial_\eta f_B^- - (m+\eta) f_B^-, & \text{falls } \tau = -1 \end{cases} \quad (2.93)$$

und

$$\varepsilon_\tau \chi_C^\tau = -i\tau \sin \varphi \rho^{-m-\tau} e^{-\frac{\rho^2}{2}} \begin{cases} \eta \partial_\eta f_B^+ - (m+\eta) f_B^+, & \text{falls } \tau = 1 \\ \partial_\eta f_B^-, & \text{falls } \tau = -1 \end{cases}. \quad (2.94)$$

Die Bestimmungsgleichungen (2.93) und (2.94) werden durch die Rekursionsbeziehungen der generalisierten Laguerre-Polynome  $L_n^m(x)$  und der konfluenten hypergeometrischen Funktion zweiter Art  $U_n^m(x)$  umgeformt [44, 45], es gilt allgemein

$$x \partial_x L_n^m(x) = (n+1) L_{n+1}^m(x) - (n+m+1-x) L_n^m(x), \quad (2.95)$$

$$L_n^m(x) = L_{n+1}^{m+1}(x) - L_{n-1}^{m+1}(x), \quad (2.96)$$

$$\partial_x L_n^m(x) = -L_{n-1}^{m+1}(x), \quad (2.97)$$

und

$$\partial_x U_n^m(x) = -n U_{n+1}^{m+1}(x), \quad (2.98)$$

$$U_{n-1}^{m-1}(x) = (1-m+x) U_n^m(x) - x \partial_x U_n^m(x). \quad (2.99)$$

Mit der Skalierung  $f_B^\tau \mapsto i\varepsilon_\tau \cdot f_B^\tau$  und den Rekursionsrelationen aus Gl. (2.97) und Gl. (2.99) erhalten wir die vollständige Wellenfunktion

$$\psi_\tau = \begin{pmatrix} \tau \cos \varphi \rho^{-m+\tau} f_A^\tau e^{i(m-\tau)\phi} \\ i\varepsilon_\tau \rho^{-m} (c_1 L_{n_\tau}^{-m}(\rho^2) + c_2 U_{-n_\tau}^{1-m}(\rho^2)) e^{im\phi} \\ \tau \sin \varphi \rho^{-m-\tau} f_B^\tau e^{i(m+\tau)\phi} \end{pmatrix} \cdot e^{-\frac{\rho^2}{2}} \quad (2.100)$$

mit den Komponenten

$$f_A^\tau = \begin{cases} -\alpha L_{n_+}^{-m+1}(\rho^2) + \beta n_+ U_{-n_+}^{2-m}(\rho^2), & \text{falls } \tau = +1 \\ (n_- + 1) \alpha L_{n_-}^{-m-1}(\rho^2) - \beta U_{-n_-}^{-m}(\rho^2), & \text{falls } \tau = -1 \end{cases} \quad (2.101)$$

und

$$f_C^\tau = \begin{cases} (n_+ + 1)\alpha L_{n_++1}^{-m-1}(\rho^2) - \beta U_{-n_+-1}^{-m}(\rho^2), & \text{falls } \tau = +1 \\ -\alpha L_{n_--1}^{-m+1}(\rho^2) + \beta n_- U_{-n_+-1}^{2-m}(\rho^2), & \text{falls } \tau = -1 \end{cases}. \quad (2.102)$$

Da im Folgenden das Energiespektrum eines isolierten Dots mit Radius  $R$  berechnet werden soll, muss die Normierbarkeit der Wellenfunktion aus Gl. (2.100) im Ursprung  $r = 0$  diskutiert werden. Die konfluente hypergeometrische Funktion zweiter Art  $U_n^m(x)$  ist für  $x \rightarrow 0$  nicht ohne Einschränkung des Parameters  $n_\tau$  normierbar, weshalb  $c_2 = 0$  gewählt werden muss. Wir werden später zeigen, dass für große Magnetfelder oder Radien im Limes  $\rho \rightarrow \infty$  eine Quantisierung des Parameters  $n_\tau$  auftritt.

Für das flache Band  $E = 0$  existiert ein topologischer Zustand

$$\psi_{\tau,0} = \begin{pmatrix} \sin \varphi \rho^{-m+\tau} f_A^\tau e^{i(m-\tau)\phi} \\ 0 \\ \cos \varphi \rho^{-m-\tau} f_B^\tau e^{i(m+\tau)\phi} \end{pmatrix} e^{-\frac{\rho^2}{2}}, \quad (2.103)$$

der aufgrund von  $\psi_B = 0$  keinen Strom trägt (vgl. Abschnitt 1.2.2) und daher auch Teil des Spektrums ist.

### 2.4.1. Energiespektren für $M = \pm U$

Die Berechnung der Energiespektren für  $M = \pm U$  erfolgt durch die Anwendung der zugehörigen Randbedingung (2.66) auf die Eigenfunktionen aus (2.100) mit  $\Theta = \phi$  am Rand  $\partial D$  bei  $r = R$ . Dies ergibt mit  $\rho_2 = R/\sqrt{2}l_B$  für die beiden Valley  $\tau = \pm 1$

$$0 = \cos^2 \varphi \rho_2^{2\tau} f_A^\tau(\rho_2^2) + \sin^2 \varphi f_C^\tau(\rho_2^2) - \varepsilon_\tau \rho_2^\tau L_{n_\tau}^{-m}(\rho_2^2). \quad (2.104)$$

Die Energieeigenwerte bestimmen sich dann durch die Nullstellen der Gl. (2.104) und können nur numerisch bestimmt werden. Um die Eigenwertgleichung mit den bekannten Resultaten für Graphen zu vergleichen, setzen wir  $\alpha = 0$  ein. Dies ergibt

$$\text{für } \tau = +1 \quad \varepsilon_+ L_{\varepsilon_+^2}^{-m}(\rho_2^2) + \rho_2 L_{\varepsilon_+^2-1}^{-m+1}(\rho_2^2) = 0, \quad (2.105)$$

$$\text{für } \tau = -1 \quad -\varepsilon_- L_{\varepsilon_-^2}^{-m-1}(\rho_2^2) + \rho_2 L_{\varepsilon_-^2-1}^{-m}(\rho_2^2) = 0. \quad (2.106)$$

Aus [24] ist für Graphen bekannt, dass

$$\text{für } \tau = +1 \quad \varepsilon_+ L_{\varepsilon_+^2}^{-m-1}(\rho_2^2) + \rho_2 L_{\varepsilon_+^2-1}^{-m}(\rho_2^2) = 0, \quad (2.107)$$

$$\text{für } \tau = -1 \quad -\varepsilon_- L_{\varepsilon_-^2}^{-m-2}(\rho_2^2) + \rho_2 L_{\varepsilon_-^2-1}^{-m-1}(\rho_2^2) = 0. \quad (2.108)$$

Durch Vergleich erhalten wir  $E_m^{\text{Graphen}} = E_{m-1}^{\alpha-\mathcal{T}_3}$ , d.h. die Randbedingungen sind äquivalent. Analytisch lässt sich der Grenzfall für  $\rho_2 \rightarrow \infty$  diskutieren. Die generalisierten Laguerre-Polynome sind durch

$$L_n^m(x) = \binom{a+b}{b} M(-a, b+1, x) \quad (2.109)$$

mit der konfluente hypergeometrischen Funktion erster Art verbunden. Diese wird für  $x \rightarrow \infty$  bis zur 1. Ordnung entwickelt, was [44]

$$M(-a, b+1, x) = \frac{\Gamma(b+1)}{\Gamma(-a)} e^x x^{-a-b-1} [1 + O(|x^{-1}|)] \quad (2.110)$$



ergibt. Werden die Binomialkoeffizienten aus Gl. (2.109) durch Gammafunktionen ausgedrückt und die Entwicklung in Gl. (2.104) eingesetzt, liefert dies unter Ausnutzung von  $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$  die Quantisierungsbedingung  $\sin(\pi n_\tau) = 0$ . Daraus ergibt sich  $n_\tau \in \mathbb{N}$ , weshalb wir für die Energieeigenwerte

$$E_{n,\tau} = \hbar\omega_c \sqrt{n + \frac{1}{2} (1 - \tau \cos 2\varphi)} \quad (2.111)$$

erhalten. Für große  $\rho_2$  konvergieren die Energieeigenwerte in beiden Valleys gegen die Landau-Level aus Gl. (2.36).

Die Nullstellen der Gl. (2.104) sind die Eigenenergien in Abhängigkeit des Magnetfeldes für verschiedene Drehimpulsquantenzahlen  $m$  und Valley-Indizes  $\tau$ . Sie werden mittels Brents Algorithmus [10] aus dem Python-Paket SciPy [46] bestimmt. In der Abb. 2.4 sind die ersten drei Energieeigenwerte (blau, lila, orange) der Drehimpulsquantenzahlen  $m \in [-10, 10]$  bestimmt aus Gl. (2.104) für verschiedene Skalierungsparameter  $\alpha \in \{0, 0.1, 0.25, 1/\sqrt{3}, 1\}$  bei einem Radius  $R = 20$  nm,  $t = 3.033$  eV und  $a = 0.142$  nm (aus [24]) in Abhängigkeit der Magnetfeldstärke dargestellt. Die Größen  $a$  und  $t$  bestimmen damit die Fermi-Geschwindigkeit  $v_B = 3at/2\hbar$ . Für alle  $\alpha$  und  $B$  lässt die Randbedingung unendlicher Masse ein flaches Band bei  $E = 0$  zu, im Gegensatz dazu ist der  $E = 0$  Zustand in Graphen-Dots [22] verboten. Dieses flache Band ist aber aufgrund der Lokalisierung auf dem C-Untergitter entkoppelt und somit konsistent mit dem Verbot. Für große Felder konvergieren die Energieeigenwerte für alle  $\alpha$  gegen die Landau-Level, da mit  $\rho_2 \propto \sqrt{B}$  die Entwicklung aus Gl. (2.109) für große Argumente gültig ist. Starke Magnetfelder dominieren durch die Landau-Level dann das Energiespektrum und die Randbedingung hat keinen Einfluss mehr. Für alle  $\alpha \neq 1$  wird die Valley-Entartung aufgehoben. Die positiven Energieeigenwerte zeigen allgemein für kleine Magnetfelder eine starke Abhängigkeit von  $\alpha$ , wogegen die negativen Eigenwerte sich lediglich mit den Landau-Levels verschieben. Wir können allgemein zwei Einschlussregime definieren. Im ersten Einschlussregime dominiert für kleine Magnetfelder die Randbedingung das Spektrum (siehe Abb. 2.4). Da für große Magnetfelder die Energieeigenwerte gegen die Landau-Level — die Energieeigenwerte des unendlichen Systems ohne Randbedingung — konvergieren, werden die Effekte der Randbedingung unterdrückt und markiert das zweite Einschlussregime. Wir können ein Übergangspunkt zwischen den beiden Regimen definieren, indem wir die Feldstärke markieren, bei der die Energie nur noch schwach vom Landau-Level abweicht. Dieser Punkt verschiebt sich für kleinere  $m$  und höhere Nullstellen zu größeren Magnetfeldern.

Die Energiespektren aus Abb. 2.4  $\alpha = 0$  sind äquivalent zu [21, 22, 24]. Sie weisen eine gebrochene Teilchen-Loch-Symmetrie auf, die selbst bei fehlendem Magnetfeld besteht, was konsistent mit der Randbedingung [22] ist. Werden die Spektren für  $K$  und  $K'$  Punkt kombiniert, dann wird die Teilchen-Loch-Symmetrie wiederhergestellt, da  $E_\tau = -E_{-\tau}$ . Das erste Landau-Level  $E_{n=1,\tau}$  setzt sich aus allen  $m < 0$  zusammen, während sich für  $n > 1$  die Landau-Level aus allen  $m < n$  bilden. Nun verfolgen wir die erste positive Nullstelle ausgehend von  $B = 0$  für  $\tau = +1$  (blau) und  $m < 0$ , dann sinken die Energien fast linear in Abhängigkeit vom Magnetfeld, bis sie über das Landau-Level hinausgehen und dann wieder ansteigen und gegen das Level konvergieren. Am  $K$  Punkt konvergieren also die positiven Energieeigenwerte bestimmter  $m$  stets von unten gegen die Landau-Level. Die negativen Energien steigen fast linear an und konvergieren direkt gegen die Landau-Level. Aufgrund von  $E_\tau = -E_{-\tau}$  sind die Abhängigkeiten am  $K'$  gespiegelt. Betrachten wir die Lösungen für  $\alpha \neq 0$  und  $\tau = +1$ , dann hängen die Energieeigenwerte kontinuierlich von  $\alpha$  ab. Die soeben beschriebene Abhängigkeit der Energie wird mit steigendem  $\alpha$  immer deutlicher, bis sie bei  $\alpha = 1$  sehr stark ausgeprägt ist. Weiterhin verändert sich mit steigendem  $\alpha$  die Position der Landau-Level, was konsistent mit der analytischen Entwicklung ist. Für  $\alpha = 1$  sind die Energiespektren bzgl.  $\tau$  entartet, was im Einklang mit den Tight-Binding Berechnung der Energieeigenwerte von Dice-Nanostreifen unter dem Einfluss eines externen Magnetfeldes ist [18].

Während am  $K$  Punkt die positiven Energieeigenwerte in Abhängigkeit vom Skalierungsparameter immer schneller von unten gegen die Landau-Level konvergieren, ist am  $K'$  Punkt ein entgegengesetzter Effekt zu beobachten.

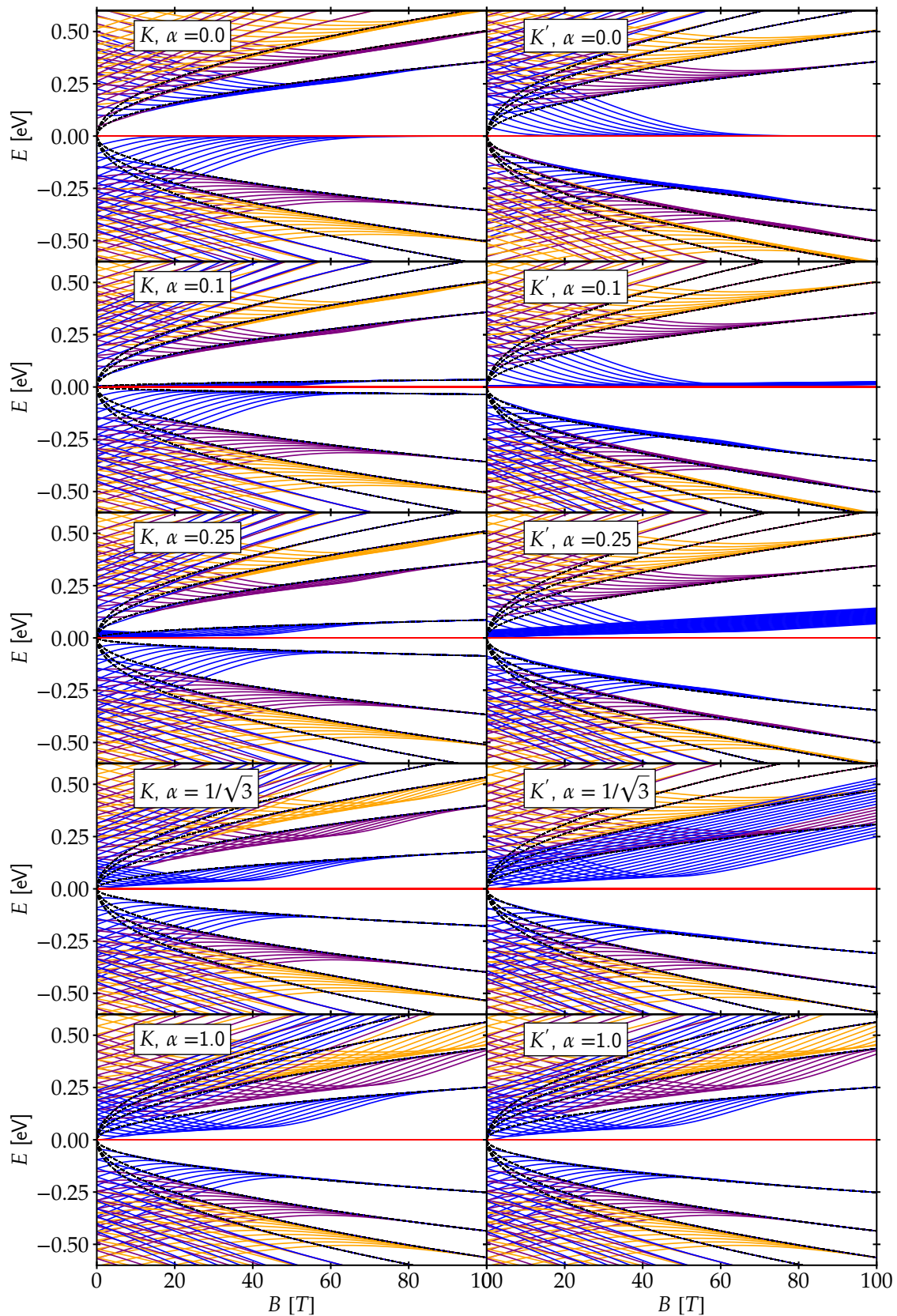


Abbildung 2.4.: Energieeigenwerte des  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitters in Abhängigkeit der Magnetfeldstärke  $B$  für verschiedene Werte von  $\alpha$  für die ersten drei Nullstellen (blau, lila, orange) der Gl. (2.104) für  $K$  und  $K'$ , wobei nur  $m \in [-10, 10]$  berücksichtigt wurden. Die gestrichelten schwarzen Linien zeigen die Landau-Level des reinen  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Systems. Das  $E = 0$  Landau-Level ist in rot dargestellt. Die Systemparameter sind  $R = 20$  nm,  $t = 3.033$  eV und  $a = 0.142$  nm.

Da das Energiespektrum bei  $\alpha = 0$  für  $\tau = -1$  gespiegelt ist, konvergieren die positiven Energien von oben gegen Landau-Level. Die Energieeigenwerte bei für  $\alpha = 1$  konvergieren jetzt von unten gegen die entsprechenden Landau-Level. Um mittels  $\alpha$  einen kontinuierlichen Übergang dieser Konvergenzrichtungen zu realisieren, wird der Übergangspunkt mit sinkendem Skalierungsparameter für  $\tau = -1$  gegen unendlich verschoben. In der Abb. 2.5 (links) ist das beschriebene Verhalten dargestellt, in der die Energieeigenwerte mit den Parametern aus Abb. 2.4 bei  $K'$ ,  $\alpha = 1/\sqrt{3}$  für höhere Magnetfelder berechnet werden. Die Eigenwerte der ersten positiven Nullstelle (blau) konvergieren gegen das erste Landau-Level, anschließend läuft die zweite Nullstelle (lila) gegen das zweite Landau-Level. Dies setzt sich fort. Um zu verdeutlichen, dass sich die Eigenwerte gleicher Drehimpulse nicht schneiden, ist in Abb. 2.4 (rechts) ein Ausschnitt der Eigenwerte zur ersten bzw. zweiten Nullstelle in der Nähe des ersten Landau-Levels dargestellt (siehe Abb. 2.5 links).

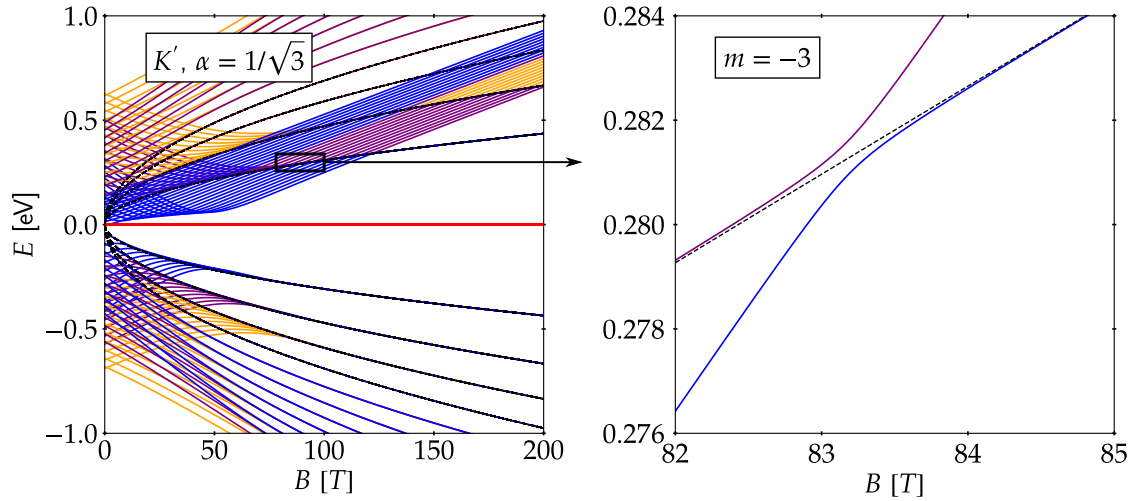


Abbildung 2.5.: Links: Energieeigenwerte des  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitters bei  $\alpha = 1/\sqrt{3}$  in Abhängigkeit der Magnetfeldstärke  $B$  für die Parameter aus Abb. 2.4. Rechts: Zoom auf die Energieeigenwerte des  $\alpha = 1/\sqrt{3}$  Gitters der ersten und zweiten Nullstelle (blau, lila) für  $m = -3$ .

Die positiven Energieeigenwerte konvergieren also erst für höhere  $B$  von unten gegen die entsprechenden Landau-Level. Mit sinkendem  $\alpha$  verschiebt sich dieser Übergangspunkt zwischen den beiden Einfangregimen zu immer höheren Magnetfeldern. Aus diesem Grund ist die Konvergenz der ersten positiven Nullstelle (blau) gegen die zugehörigen Landau-Level in den Abb. 2.4 bei  $\alpha = 0.25$  und  $\alpha = 0.1$  am  $K'$  Punkt für den betrachteten Magnetfeldbereich nicht mehr dargestellt. Berechnet man die Eigenwerte zu höheren Magnetfeldern, beobachtet man das Verhalten aus Abb. 2.5  $\alpha = 1/\sqrt{3}$  mit sinkendem  $\alpha$  für immer höhere Magnetfelder. Aus diesem Grund ist die Valley-Entartung stark aufgehoben.

#### 2.4.2. Energiespektren für $M = \tau S_z$

Die Randbedingung für  $M = \tau S_z$  aus Gl. (2.79) für  $\Theta = \phi$  wird auf die Eigenfunktionen aus Gl. (2.100) mit  $\alpha = 1$  bei  $r = R$  angewendet, dies ergibt

$$0 = (n+1)L_{n+1}^{-m-1}(\rho_2^2) - \rho_2^2 L_{n-1}^{-m+1}(\rho_2^2). \quad (2.112)$$

Für  $\alpha = 1$  ist  $n = \varepsilon^2 - 1/2$ , weshalb Gl. (2.112) entartet bzgl.  $\tau$  ist. Die Gleichung ist eine gerade Funktion in  $\varepsilon^2$ , sodass die Teilchen-Loch-Symmetrie nicht aufgehoben wird. Mittels der Entwicklung der Laguerre-Polynome für große Argumente aus Gl. (2.109) und (2.110) erhalten wir für die Energie

$$E = \hbar\omega_c \sqrt{n + \frac{1}{2}}. \quad (2.113)$$

Die Energieeigenwerte wurden mit der gleichen numerischen Methode aus Abschnitt 2.4.1 als Nullstellen von Gl. (2.112) berechnet und in Abb. 2.6 für die ersten drei Nullstellen dargestellt (Parameter aus Abb. 2.4). Für große Magnetfelder konvergieren die Energieeigenwerte gegen die Landau-Level des reinen  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Systems bei  $\alpha = 1$ , das  $E = 0$  Band bleibt unberührt.

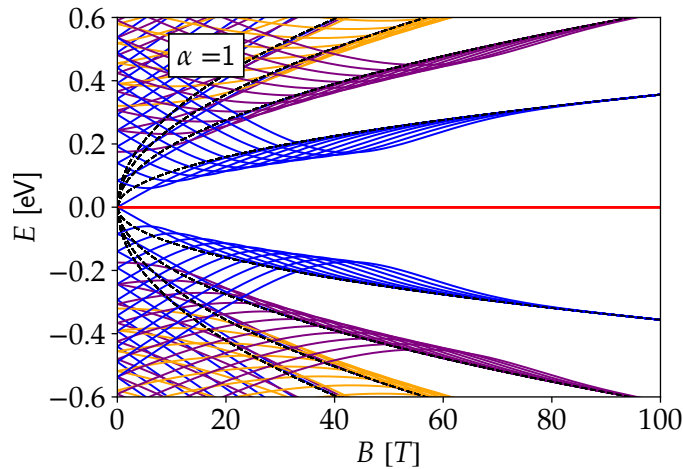


Abbildung 2.6.: Energieeigenwerte des Dice-Gitters in Abhängigkeit der Magnetfeldstärke  $B$  für die ersten drei Nullstellen (blau, lila, orange) der Gl. (2.112) und  $m \in [-10, 10]$ . Die gestrichelten schwarzen Linien zeigen die Landau-Level des reinen  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Systems. Das  $E = 0$  Landau-Level ist durch eine rote Linie dargestellt. Die Parameter sind identisch zu Abb. 2.4.

### 2.4.3. Valley-Entartung

In [47] wurden die Energieeigenwerte eines Graphen-Rings mit der Randbedingung unendlicher Masse in Abhängigkeit eines sich im Inneren befindlichen Magnetfeldes diskutiert. Die Valley-Entartung wird aufgehoben, wenn die sogenannte „effektive“ Zeitumkehrsymmetrie (TRS) und die echte TRS gebrochen werden. Bevor die Darstellung der Operatoren abgeleitet wird, geben wir eine kompakte Repräsentation der beiden Hamilton-Operatoren  $H_{\tau}^{\varphi}$  an. Mit dem direkten Produkt erhalten wir

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} H_{+}^{\varphi} & 0 \\ 0 & H_{-}^{\varphi} \end{pmatrix} = v_{\text{F}}(\tau_3 \otimes S_x^{\varphi} p_x + \tau_0 \otimes S_y^{\varphi} p_y), \quad (2.114)$$

mit  $\tau_0$  der  $2 \times 2$  Einheitsmatrix und den Pauli-Matrizen  $\tau_i$  mit  $i \in \{1, 2, 3\}$ . Die Pauli-Matrizen  $\tau_i$  beschreiben den Isospin bzgl. des Valley-Freiheitsgrads. Der gesamte Hamilton-Operator  $\mathcal{H}$  ist also ein direktes Produkt aus Isospin  $\otimes$  Pseudospin. Der antiunitäre Matrixoperator für die echte TRS lässt sich aus dem Tight-Binding Hamilton-Operator der Gl. (1.12) ableiten, da mit dem Operator der komplexen Konjugation  $\mathcal{K}$  und der Definition

$$\mathcal{T}H(\mathbf{k}) = \mathcal{K}H(\mathbf{k}) \quad (2.115)$$

folgt, dass die Wirkung auf die Wellenfunktion mit  $\Psi = (\psi_{+}, \psi_{-})$  durch

$$\mathcal{T}\Psi = (\psi_{-}, \psi_{+})^* \quad (2.116)$$

gegeben ist. Der echte TRS-Operator ist nebendiagonal, da er die Valley vertauscht und zusätzlich die Komponenten der Wellenfunktion konjugiert. Der Operator nimmt dann in Matrixform [48] die Gestalt

$$\mathcal{T} = \tau_1 \otimes \mathbb{1}_{3 \times 3} \mathcal{K} \quad (2.117)$$

an und erfüllt

$$\mathcal{T}\mathcal{H}(\mathbf{k})\mathcal{T}^{-1} = \mathcal{H}(-\mathbf{k}). \quad (2.118)$$

Da wir ein spinloses Teilchen im Gitter beschreiben, ist  $\mathcal{T}^2 = 1$ , wodurch  $\mathcal{T}$  ein orthogonaler Symmetrieoperator ist. In Abwesenheit eines Magnetfeldes erfüllt der Hamilton-Operator die echte Zeitumkehrsymmetrie.

Der Operator der „effektiven“ TRS ist für das Dice-Gitter ( $\alpha = 1$ ) mit

$$F = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.119)$$

definiert durch [48]

$$\mathcal{S} = \tau_0 \otimes FK. \quad (2.120)$$

Der Hamilton-Operator aus Gl. (2.114) erfüllt

$$\mathcal{S}\mathcal{H}(\mathbf{k})\mathcal{S}^{-1} = \mathcal{H}(-\mathbf{k}). \quad (2.121)$$

Da dieser Operator blockdiagonal ist, ist durch  $\mathcal{S}$  ein „effektiver“ Zeitumkehroperator innerhalb eines Valleys gegeben. Er erfüllt  $\mathcal{S}^2 = 1$  und ist im Gegensatz zu Graphen *kein* symplektischer Symmetrieoperator [49], was mit dem Pseudospin-1 zusammenhängt. Selbst ein zusätzlicher Massenterm

$$\mathcal{M} = \tau_0 \otimes \pm\Delta U \quad (2.122)$$

bricht die effektive TRS nicht, da  $\mathcal{S}\mathcal{M}\mathcal{S}^{-1} = \mathcal{M}$ . Die Randbedingung nach Gl. (2.104) ist ebenfalls invariant unter dieser Symmetrietransformation, weshalb die Energiespektren in Abb. 2.4 mit  $\alpha = 1$  bzgl.  $\tau$  entartet sind.

Wie wir beobachten konnten, ist die Randbedingung aus Gl. (2.112) vom Valley-Index  $\tau$  unabhängig und bricht die effektive TRS nicht, obwohl

$$\mathcal{S}(\mathcal{H} + \tau_3 \otimes \Delta S_z)\mathcal{S}^{-1} = \mathcal{H} - \tau_3 \otimes \Delta S_z. \quad (2.123)$$



## Dirac-Weyl Quasiteilchen in elektrischen Feldern

Elektrische Felder werden in der Beschreibung von Dirac-Weyl Quasiteilchen durch einen Zusatzterm in der zugehörigen Dirac-Weyl Gleichung berücksichtigt, bestehend aus einem elektrischen Potential multipliziert mit der Einheitsmatrix. Da sich die meisten Arbeiten zum Dice- bzw.  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitter auf die Physik fokussieren, die direkt vom flachen Band  $E = 0$  induziert wird und dabei größtenteils die Streu- bzw. Transportdynamik vernachlässigen, wollen wir in diesem Kapitel Streuprobleme an planaren oder (zeitabhängigen) zirkularen Potentialbarrieren untersuchen. Es wurde gezeigt, dass die Transmissionswahrscheinlichkeit von planaren Potentialbarrieren im  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitter vom Skalierungsparameter  $\alpha$  abhängt [26] und für  $\alpha = 0$  und  $\alpha = 1$  die entsprechenden Grenzfälle reproduziert werden [27, 28]. Da die Transmissionswahrscheinlichkeit für Pseudospin-1 Dirac-Weyl Quasiteilchen durch den *Super*-Klein-Tunnel-Effekt die größten Differenzen zu Pseudospin-1/2 Teilchen aufweist, werden wir uns bei der Untersuchung von zirkularen Barrieren auf das Dice-Gitter ( $\alpha = 1$ ) beschränken. Wir werden zeigen, dass die Streuung von Pseudospin-1 Teilchen an statischen, zirkularen Potentialbarrieren im Vergleich zum Pseudospin-1/2 Fall neue Effekte wie die Wiederbelebung des resonanten Streuregimes, perfekte Kaustiken oder die isotrope Streuung und Rückwärtsstreuung aufweist [32]. Motiviert von den herausragenden Streueigenschaften der Pseudospin-1 Teilchen wird der Einfluss einer harmonischen Modulation der Potentialhöhe auf die Streueigenschaften untersucht. Zu Beginn des Kapitels wird durch die Untersuchung des Streuverhaltens einer ebenen Welle an einer planaren Barriere der Klein-Tunnel-Effekt im  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  charakterisiert und der *Super*-Klein-Tunnel-Effekt hergeleitet. Anschließend wird die Streuung einer ebenen Wellen an einer statischen oder oszillierenden zirkularen Potentialbarriere im Dice-Gitter untersucht.

### 3.1. Streuung an planaren Barrieren

Gemäß des Klein Paradoxons [25] können relativistische Teilchen planare Barrieren überwinden. Dieses Phänomen wird sogar begünstigt, wenn die Höhe oder die Breite vergrößert wird. In der relativistischen Quantenmechanik sind hohe Potentialbarrieren, die abstoßend für einlaufende Teilchen sind, anziehend für Löcher. Dies resultiert in Lochzuständen innerhalb der Barriere und Teilchenzuständen hinter der Barriere, die durch die Teilchen-Loch-Symmetrie verbunden sind. Im Gegensatz dazu wird in der nichtrelativistischen Quantenmechanik das Tunneln durch evaneszente Wellen ermöglicht, sodass die Tunnelwahrscheinlichkeit mit steigender Potentialhöhe exponentiell abklingt [50]. Der Klein-Tunnel-Effekt von Pseudospin-1/2 Quasiteilchen (Graphen) bezeichnet die perfekte Transmission von niederenergetischen Elektronen durch Potentialbarrieren unendlicher Höhe oder Breite für ausgewählte Einfallswinkel. Da niederenergetische Quasiteilchen im  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitter ebenfalls durch eine masselose Dirac-Weyl Gleichung beschrieben werden, erwarten wir ein ähnliches Verhalten bzgl. der ausgezeichneten Transmissionswahrscheinlichkeit. In den folgenden Darstellungen verfolgen wir E. Illes et al. [26], in der die Streuung von Dirac-Weyl Quasiteilchen an planaren Stufen und Barrieren untersucht wurde. Die genannte Arbeit beschäftigt sich insbesondere mit dem  $0 < \alpha < 1$  Regime, weshalb Ideen aus den Arbeiten zu Graphen  $\alpha = 0$  [27] und dem Dice-Gitter  $\alpha = 1$  [28] aufgegriffen werden. Der Fall  $\alpha = 1$  ist besonders hervorzuheben, denn einerseits wird sich in folgenden Abschnitten explizit darauf beschränkt und andererseits weist er durch den sogenannten *Super*-Klein-Tunnel-Effekt die größten Unterschiede zum Streuverhalten in

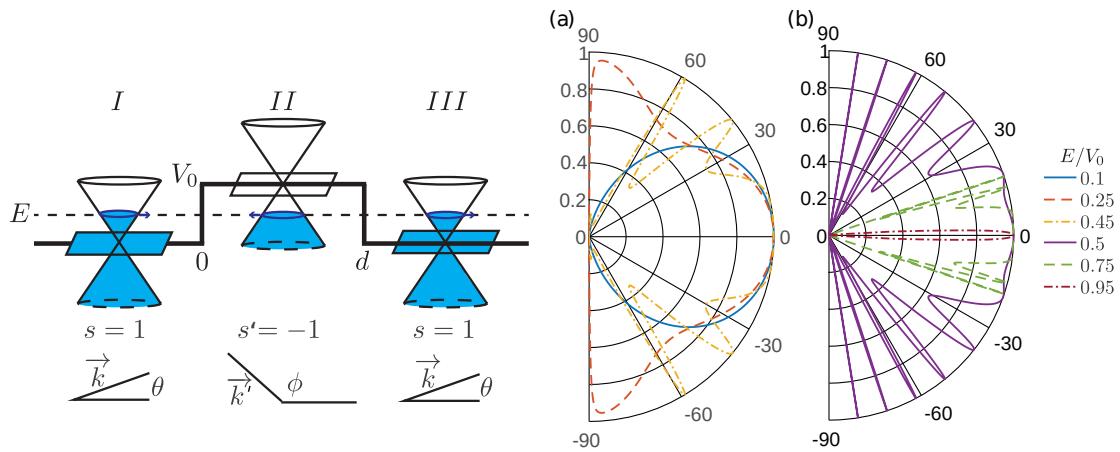


Abbildung 3.1.: Links: Schematische Darstellung zum Klein-Tunnel-Effekt im  $\alpha\text{-}\mathcal{T}_3$  Gitter durch eine planare Potentialbarriere  $V(x)$  nach Gl. (3.1) zwischen  $x = 0$  und  $x = d$  mit der Höhe  $V_0$ . Das Fermi-Niveau ist durch einen blauen Kreis gekennzeichnet und der blaue Pfeil beschreibt die Richtung des Wellenvektors. Wir haben  $0 < E < V_0$  gewählt, weshalb  $s = 1$  und  $s' = -1$ . Die Winkel zugehörig zu den Wellenvektoren sind im unteren Teil des Bilds dargestellt. Rechts: Polardarstellung der Transmissionswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit des Einfallswinkels für  $\alpha = 0.5$  und (a) kleinere relative Energien  $E/V_0 = 0.1, 0.25$  und  $0.45$  bzw. (b) größere relative Energien  $E/V_0 = 0.5, 0.75$  und  $0.95$  bei  $d = 40V_0$ . Die Abbildung ist aus [26] adaptiert.

Graphen auf. Der *Super*-Klein-Tunnel-Effekt tritt bei einer bestimmten einfallenden Energie relativ zur Potentialhöhe auf und äußert sich in einer perfekten Transmissionswahrscheinlichkeit, gänzlich unabhängig vom Einfallswinkel.

Wir nehmen ein Potential  $V(x)$  an, welches glatt auf atomarer Skala aber scharf auf der Skala der Fermi-Wellenlänge ist. Aufgrund dieser Annahme kann die Intervalley-Streuung vernachlässigt werden. Um uns auf die relevanten Klein-Tunnel-Effekte zu fokussieren, sei die einfallende Energie stets kleiner als die Potentialhöhe  $|E| < V_0$ .

Wir betrachten eine Potentialbarriere  $V(x)$  der Breite  $d$  und Höhe  $V_0$ , die durch

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ V_0, & 0 < x < d \\ 0, & d \leq x \end{cases} \quad (3.1)$$

definiert ist, wodurch der Raum in Bereich I für  $x \leq 0$ , Bereich II für  $0 < x < d$  und Bereich III hinter der Barriere für  $d \leq x$  aufgeteilt wird. In der Abb. 3.1 (links) ist diese Einteilung verdeutlicht, zusätzlich werden die zugehörigen Dirac-Kegel mit Fermi-Niveau (blau) dargestellt. Im unteren Teil des Bilds sind die Wellenvektoren  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{q}$  mit dem entsprechend zugehörigen Winkel  $\theta$  bzw.  $\phi$  abgebildet.

Mit dem Hamilton-Operator am  $K$  Punkt

$$H^\varphi = v_F \mathbf{S}^\varphi \cdot \mathbf{p} + V(x) \mathbb{1}_{3 \times 3}, \quad (3.2)$$

mit dem Potential der Barriere nach Gl. (3.1) und der Eigenwertgleichung  $H^\varphi |\psi\rangle = E |\psi\rangle$  werden die Wellenfunktionen  $|\psi\rangle$  in den drei Raumbereichen berechnet.



Die Wellenfunktion im Raumbereich I

$$|\psi_I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos \varphi e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \\ s \\ \sin \varphi e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} e^{ik_x x} e^{ik_y y} + \frac{r}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\cos \varphi e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \\ s \\ -\sin \varphi e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} e^{-ik_x x} e^{ik_y y} \quad (3.3)$$

folgt direkt aus der Wellenfunktion des freien Teilchens nach Gl. (1.30) und setzt sich aus einem einlaufenden Anteil mit  $\theta_{\mathbf{k}}$  und einem reflektierten Teil der Amplitude  $r$  zusammen, die sich entgegengesetzt ausbreiten. Aufgrund Symmetrie der Barriere in  $y$ -Richtung ist  $p_y$  erhalten und es gilt für den reflektierten Anteil  $\theta_{\mathbf{k}} \mapsto \pi - \theta_{\mathbf{k}}$ . Die Wellenfunktion im Raumbereich II wird mit der Wellenfunktion des freien Teilchens aus Gl. (1.30) bei der verschobenen Energie  $E - V_0$  konstruiert

$$|\psi_{II}\rangle = \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos \varphi e^{-i\phi_{\mathbf{k}'}} \\ s' \\ \sin \varphi e^{i\phi_{\mathbf{k}'}} \end{pmatrix} e^{iq_x x} e^{ik_y y} + \frac{b}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\cos \varphi e^{i\phi_{\mathbf{k}'}} \\ s' \\ -\sin \varphi e^{-i\phi_{\mathbf{k}'}} \end{pmatrix} e^{-iq_x x + ik_y y}. \quad (3.4)$$

Sie setzt sich aus zwei entgegengesetzt ausbreitenden Wellen der Amplitude  $a$  bzw.  $b$  zusammen. Es wurde die Definition  $\mathbf{k}' = (q_x, k_y)$  mit der Ausbreitungsrichtung  $\phi_{\mathbf{k}'} = \arctan(k_y/q_x)$  und  $s' = \text{sgn}(E - V_0)$  verwendet. Unter erneuter Verwendung der Lösung des freien Teilchens erhalten wir für die Wellenfunktion in Bereich III

$$|\psi_{III}\rangle = \frac{t}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos \varphi e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \\ s \\ \sin \varphi e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} e^{ik_x x} e^{ik_y y} \quad (3.5)$$

mit Amplitude  $t$ .

Um die Koeffizienten  $a, b, r$  und  $t$  zu bestimmen, muss die Stetigkeitsbedingung der Wellenfunktion aus Gl. (1.49) an der Grenze  $x = 0$  der Bereiche I und II mit  $\Theta = 0$  und an der Grenze  $x = d$  der Bereiche II und III mit  $\Theta = \pi$  ausgewertet werden. Daraus erhalten wir das Gleichungssystem

$$1 + r = ss'(a + b), \quad (3.6)$$

$$A(\theta_{\mathbf{k}}) - rB(\theta_{\mathbf{k}}) = aA(\phi_{\mathbf{k}'}) - bB(\phi_{\mathbf{k}'}), \quad (3.7)$$

$$as' e^{iq_x d} + bs' e^{-iq_x d} = t s e^{ik_x d}, \quad (3.8)$$

$$aA(\phi_{\mathbf{k}'}) e^{iq_x d} - bB(\phi_{\mathbf{k}'}) e^{-iq_x d} = tA(\theta_{\mathbf{k}}) \quad (3.9)$$

aus dem die unbestimmten Koeffizienten  $a, b, r, t$  berechnet werden. Dabei wurden die Abkürzungen  $A(x) = \cos^2 \varphi e^{ix} + \sin^2 \varphi e^{-ix}$  und  $B(x) = A(-x)$  eingeführt.

In diesem Abschnitt ist die Amplitude  $t$  der transmittierten Welle  $|\psi_{III}\rangle$  von besonderem Interesse. Die Lösung des Gleichungssystems (3.9) ergibt mit der Ersetzung

$$f_{\pm} = 2 \pm 2ss' \cos(\phi_{\mathbf{k}'} \pm \theta_{\mathbf{k}}) - \sin^2 \varphi (s \sin \phi_{\mathbf{k}'} - s' \sin \theta_{\mathbf{k}})^2 \quad (3.10)$$

das Resultat

$$t = \frac{4ss' e^{-id(q_x + k_x)} \cos \phi_{\mathbf{k}'} \cos \theta_{\mathbf{k}}}{e^{-i2q_x d} f_+ - f_-}. \quad (3.11)$$

Anschließend erhalten wir unter Ausnutzung von  $T = |t|^2$  und  $R + T = 1$  die Transmissionswahrscheinlichkeit

$$T = \frac{16 \cos^2 \theta_{\mathbf{k}} \cos^2 \phi_{\mathbf{k}'}}{f_+^2 + f_-^2 - 2f_+ f_- \cos(2q_x d)}. \quad (3.12)$$

Die Gleichung (3.12) reduziert sich für Graphen ( $\alpha = 0$ ) und das Dice-Gitter ( $\alpha = 1$ ) auf die bekannten Transmissionswahrscheinlichkeiten [27, 28, 51]. Die Streueigenschaften hängen nach Gl. (3.12) von  $\alpha$  und damit vom Pseudospin ab. Um dies zu verdeutlichen, werden wir nun näher auf die  $\alpha$ -Abhängigkeit der Transmission eingehen.

Für senkrechten Einfall  $\theta = 0$  gilt stets  $T(\theta = 0) = 1$  für alle  $\alpha \in [0, 1]$ . Diese Aussage ist äquivalent dazu, dass jedes senkrecht einfallende Teilchen perfekt transmittiert wird, unabhängig vom Verhältnis der Energie zur Potentialhöhe. Die Barriere wird also transparent. Ab einem kritischen Winkel  $\theta_c$ , der durch  $\sin \theta_c = (V_0 - E)/E$  gegeben ist, und einer relativen Energie  $E/V_0 > 0.5$  werden die Quasiteilchen mit einem imaginären Wellenvektor  $q_x$  durch die Region II mit Hilfe von evaneszenten Wellen transmittiert.

Zunächst wird die Transmissionswahrscheinlichkeit für  $\alpha = 0.5$  und  $0 < E < V_0$  in Abhängigkeit des Einfallswinkels analysiert, um Unterschiede in der Abhängigkeit von der relativen Energie  $E/V_0$  herauszuarbeiten. In Abb. 3.1 (a-b) ist dieser Fall für repräsentative Werte von  $E/V_0$  bei  $d = 40V_0$  dargestellt. Für  $E/V_0 = 0.1$  weist die Transmissionswahrscheinlichkeit ein einziges Maximum mit  $T = 1$  auf, jedoch steigt die Anzahl dieser Stellen mit steigender relativer Energie  $E/V_0$ , da die einfallende Wellenfunktion innerhalb der Barriere mit sich selbst interferiert, ähnlich wie in einem Fabry-Pérot Interferometer. Diese Resonanzen treten immer dann auf, wenn  $q_x d = n\pi$  für ganzzahlige  $n$  erfüllt ist. Interessanterweise ist die Position der Maxima unabhängig von  $\alpha$  (vgl. Abb. 3.2). Der gewählte Wert  $\alpha = 0.5$  entspricht ungefähr dem  $\alpha = 1/\sqrt{3}$  Wert von  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  und soll uns hier Einblick in das Regime fernab von den typischen Werten  $\alpha = 0$  oder  $\alpha = 1$  geben. In Abb. 3.2 ist die Transmissionswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit des Einfallswinkels für verschiedene  $\alpha$  und relative Energien  $E/V_0$  in einem Polarplot dargestellt. Generell kann beobachtet werden, dass die Transmissionswahrscheinlichkeit für alle Einfallswinkel mit steigendem  $\alpha$  zunimmt, wenn der Maximalwert  $T = 1$  noch nicht erreicht ist. Wie schon zuvor werden wieder Fabry-Pérot Interferenzen für  $q_x d = \pi n$  beobachtet.

Das auffälligste Merkmal der Transmissionswahrscheinlichkeit tritt im Dice-Gitter ( $\alpha = 1$ ) bei der relativen Energie von  $E/V_0 = 0.5$  (vgl. Abb. 3.2 (c)) auf. Die Barriere wird komplett transparent  $T(\theta) = 1$ , völlig unabhängig vom Einfallswinkel  $\theta$ . Diese Besonderheit kann durch den negativen Brechungsindex

$$n = ss' \frac{\sin \theta}{\sin \phi} = -1 \quad (3.13)$$

des Systems verstanden werden, der sich mit dem Beugungswinkel  $\phi = \pi - \theta$  ergibt. Wird dies in Gl. (3.12) eingesetzt, erhält man mit  $f_- = 0$  und  $f_+ = 4 \cos^2 \theta$  nach Gl. (3.11) insgesamt

$$T(\theta) = 1. \quad (3.14)$$

Dieses Phänomen wird in der Literatur als *Super-Klein-Tunneln* bezeichnet [28].

Bisher wurde sich auf Energien  $E \neq V_0$  beschränkt, da dort die Zustände des flachen Bands nicht getroffen werden. Betrachten wir nun  $E = V_0$ , dann setzt sich die Wellenfunktion innerhalb der Barriere aus den Zuständen des flachen Bandes zusammen. Diese Zustände sind unendlich oft entartet, tragen aber keinen Strom und sind aufgrund der verschwindenden Gruppengeschwindigkeit vollständig lokalisiert.

Zunächst wird der senkrechte Einfall  $\theta_k = 0$  mit  $k_y = 0$  diskutiert. Die Wellenfunktion des flachen Bands ergibt somit  $|\psi_{\text{II}}\rangle = (a, b, c)$  mit den Konstanten  $a, b, c$ . Ausnutzen der Stetigkeit nach Gl. (1.49) mit den Wellenfunktionen der Raumbereiche I und III nach Gl. (3.3) und (3.5) an den Grenzen der Bereiche  $x = 0$  und  $x = d$  führt auf

$$\frac{s}{\sqrt{2}}(1 + r) = b, \quad \frac{st}{\sqrt{2}}e^{ik_x d} = h, \quad (3.15)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(1 - r) = \cos \phi a + \sin \phi b, \quad \frac{t}{\sqrt{2}}e^{ik_x d} = \cos \phi a + \sin \phi b. \quad (3.16)$$

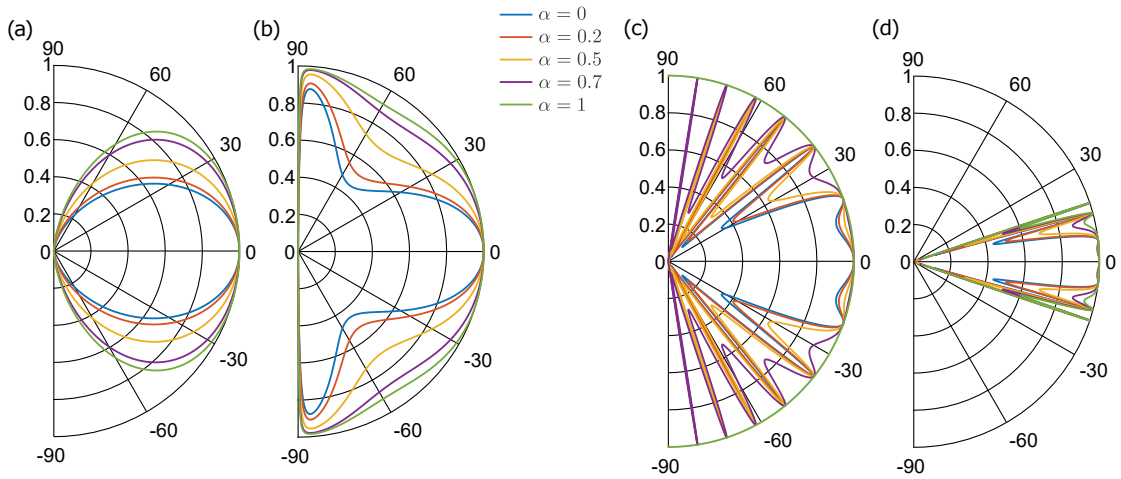


Abbildung 3.2.: Polardarstellung der Transmissionswahrscheinlichkeit für verschiedene  $\alpha \in [0, 1]$  und (a)  $E/V_0 = 0.1$ , (b)  $E/V_0 = 0.25$ , (c)  $E/V_0 = 0.5$  und (d)  $E/V_0 = 0.75$ . Die Barrierenbreite ist durch  $d = 40V_0$  definiert. Adaptiert aus [26].

Aus diesem System von Gleichungen folgt  $r = 0$ ,  $t = e^{-ik_x d}$  und womit  $T = |t|^2 = 1$ . Für senkrechten Einfall wird die Welle perfekt transmittiert. Für  $k_y \neq 0$  setzt sich die Wellenfunktion im Bereich II aus der Gl. (3.4) für  $E - V_0$  und der Wellenfunktion aus Gl. (1.31) zusammen. Wir erhalten

$$|\psi_{II}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a \sin \varphi e^{kyx} \\ 0 \\ b \cos \varphi e^{-kyx} \end{pmatrix} + \sum_q \alpha_q \begin{pmatrix} \sin \varphi e^{-i\phi_q} \\ 0 \\ -\cos \varphi e^{i\phi_q} \end{pmatrix} e^{iqx}, \quad (3.17)$$

mit  $\phi_q = \arctan(k_y/q)$ . Der zweite Teil der Wellenfunktion tritt auf, weil das flache Band unendlich oft entartet ist und damit eine (unendliche) Summe an Zuständen des flachen Bands zugelassen werden muss. Wie bereits erwähnt, tragen beide Anteile der Wellenfunktion aus Gl. (3.17) keinen Strom, sodass sich aus der Stetigkeit für die Koeffizienten  $r = -1$  und  $t = 0$  ergibt. Die Transmissionswahrscheinlichkeit verschwindet und die Reflexion wird perfekt. Das wird so interpretiert, dass im Bereich I links der Barriere sich entgegengesetzt propagierende Wellen befinden, die sich überlagern und eine stehende, nicht propagierende Welle ausbilden [38], wie die Zustände in II. Abschließend kann gesagt werden, dass die Transparenz von elektrostatische Barrieren im  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter mit wachsendem  $\alpha$  ansteigt und ein Maximum für  $\alpha = 1$  erreicht. In diesem Fall sind Barrieren der Höhe  $V_0 = 2E$  besonders ausgezeichnet, da diese völlig transparent sind. Deshalb können Dirac-Weyl Quasiteilchen für alle  $\alpha$  nicht durch elektrostatische Barrieren eingeschlossen werden. Im nächsten Abschnitt wird die Streuung an einer zirkularen Potentialbarriere im Dice-Gitter ( $\alpha = 1$ ) untersucht. Zirkuläre Barrieren führen auf anisotrope Streuung im Raumwinkel, die im Zusammenhang mit der erhöhten Transmissionswahrscheinlichkeit und dem *Super-Klein-Tunnel-Effekt* interessante Unterschiede zu Graphen aufweisen.

### 3.2. Streuung an zirkularen Barrieren

Es wurden häufig zirkuläre Barrieren zur Modellierung von Defekten endlicher Größe in Graphen [29–31], optomechanischem Graphen [52], dem Dice-Gitter [32] und dem  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter [48] untersucht. Wie im vorherigen Abschnitt gezeigt wurde, werden Dirac-Weyl Teilchen nicht durch elektrostatische Barrieren eingeschlossen. Es können bei der Streuung an zirkulären Barrieren aber quasigebundene Zustände auftreten, die sich in scharfen Resonanzen der Streueffizienz und der Anisotropie der Stromdichte äußern. Wenn angeregte Resonanzen mit einem Hintergrund interferieren, entstehen Fano-Resonanzen, die die durch das Klein-Tunneln favorisierte Vorwärtsstreuung

unterdrücken können [30]. Die Streueigenschaften von Pseudospin-1 Teilchen an planaren Barrieren werden durch den *Super-Klein-Tunnel-Effekt* gegenüber Pseudospin-1/2 Teilchen stark kontrastiert, weshalb wir im Folgenden die Streuung von ebenen Wellen an zirkularen Potentialbarrieren von Pseudospin-1 Teilchen im Dice-Gitter untersuchen. Dazu werden einerseits die Ergebnisse von [32] zusammengefasst und andererseits detailliert auf die Anisotropie der Stromdichte im Fernfeld eingegangen.

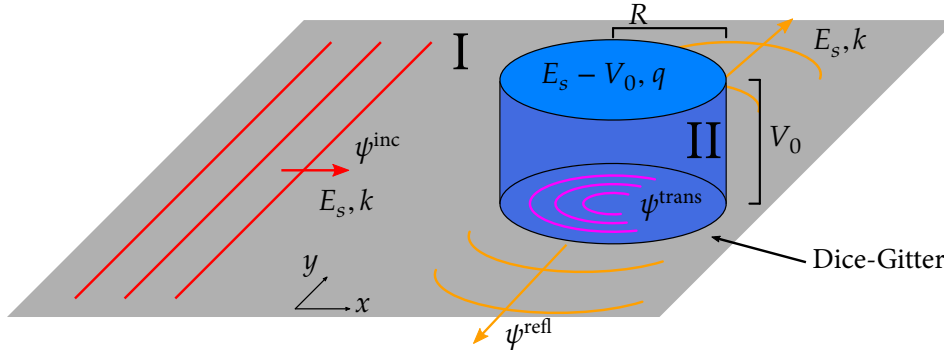


Abbildung 3.3.: Schematische Darstellung der kreissymmetrischen Potentialbarriere (blau) mit Radius  $R$  und Potentialhöhe  $V_0$  auf einem Dice-Gitter (grauer Untergrund). Im Raumbereich I läuft von links eine ebene Welle  $\psi^{\text{inc}}$  mit der Energie  $E_s = sv_F k$  und der Wellenzahl  $k$  in  $x$ -Richtung ein. Diese Welle wird in einen reflektierten Anteil  $\psi^{\text{refl}}$  mit der Energie  $E$  und der Wellenzahl  $k$  und einen transmittierten Anteil  $\psi^{\text{trans}}$  mit der Energie  $E - V_0$  und Wellenzahl  $q$  in den Bereich II innerhalb des Potentials gestreut.

Wir beginnen mit dem Hamilton-Operator aus Gl. (3.2) für  $\alpha = 1$  und  $\tau = +1$  ( $\hbar = 1$ )

$$H = v_F \mathbf{S} \cdot \mathbf{p} + V(r) \mathbb{1}_{3 \times 3}, \quad (3.18)$$

wobei das zirkulare Potential

$$V(r) = V_0 \Theta(r - R) \mathbb{1}_{3 \times 3} \quad (3.19)$$

durch die Heaviside-Sprungfunktion  $\Theta(r - R)$  mit der Höhe  $V_0$  und dem Radius  $R$  definiert ist. In der Abb. 3.3 ist das Potential aus Gl. (3.19) auf einem Dice-Gitter dargestellt. Durch das kreisförmige Potential wird der Raum in den Bereich I für  $r > R$  und den Bereich II für  $r < R$  unterteilt. Nun werden wir die Wellenfunktionen in den jeweiligen Raumbereichen berechnen. Aufgrund der Rotationssymmetrie wird der Hamilton-Operator in ebenen Polarkoordinaten  $(x, y) \rightarrow (r, \phi)$  ausgedrückt. Dies ergibt

$$H = \frac{v_F}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \hat{L}_- & 0 \\ \hat{L}_+ & 0 & \hat{L}_- \\ 0 & \hat{L}_+ & 0 \end{pmatrix} + V_0 \Theta(r - R) \mathbb{1}_{3 \times 3}, \quad (3.20)$$

wobei

$$\hat{L}_{\pm} = -ie^{\pm i\phi} \left( \partial_r \pm i \frac{\partial \phi}{r} \right) \quad (3.21)$$

verwendet wurde. Die  $z$ -Komponente des Gesamtdrehimpulses ist durch  $J_z = -i\partial_\phi \mathbb{1}_{3 \times 3} + S_z$  gegeben und kommutiert aufgrund der Symmetrie mit dem Hamilton-Operator  $[H, J_z] = 0$  sodass die beiden Operatoren ein gemeinsames Eigenfunktionensystem besitzen. Die Eigenfunktionen von  $J_z$  erfüllen

$$J_z \psi = m \psi, \quad (3.22)$$

wodurch für den Ansatz der Eigenfunktionen von  $H$

$$\psi(r, \phi) = \begin{pmatrix} \chi_A(r)e^{i(m-1)\phi} \\ \chi_B(r)e^{im\phi} \\ \chi_C(r)e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

verwendet wird. Mittels der Eigenwertgleichung,

$$H\psi = E_s\psi, \quad (3.24)$$

mit dem Hamilton-Operator aus (3.20) und dem Ansatz aus Gl. (3.23) erhalten wir für das dispersive Band  $E_s = sv_F k$  ( $|\mathbf{k}| = k$ ) mit der Ersetzung  $\chi_B(r) = isf_B(r)$  das Gleichungssystem

$$\left(\partial_r + \frac{m}{r}\right)f_B(r) = k\chi_A, \quad (3.25)$$

$$\left(\partial_r + \frac{m}{r}\right)\chi_A + \left(\partial_r + \frac{m+1}{r}\right)\chi_C = -|k|f_B(r), \quad (3.26)$$

$$\left(\partial_r - \frac{m}{r}\right)f_B(r) = k\chi_C. \quad (3.27)$$

Diese gekoppelten Differentialgleichungen können durch das Einsetzen von  $\chi_{A/C}$  aus der ersten bzw. dritten Gleichung in die zweite Gleichung entkoppelt werden. Dies führt auf die Besselsche Differentialgleichung

$$(kr)^2 \partial_{kr}^2 f_B(kr) + kr \partial_{kr} f_B(kr) + ((kr)^2 - m^2)f_B(kr) = 0 \quad (3.28)$$

mit der Lösung

$$f_B(kr) = \mathcal{Z}_m^{(0,1)}(kr). \quad (3.29)$$

Dabei bezeichnet  $\mathcal{Z}_m^{(0)} = J_m(kr)$  die Besselfunktion und  $\mathcal{Z}_m^{(1)} = H_m(kr)$  die Hankelfunktion mit  $H_m(kr) = J_m(kr) + isY_m(kr)$ , die die Neumann-Funktion  $Y_m(kr)$  beinhaltet. Die Neumann-Funktion ist für  $kr = 0$  divergent, weshalb sie als Lösung nicht zulässig ist. Die Definition der Hankelfunktionen mit dem Bandindex  $s$  garantiert, dass der Brechungsindex für negative Energien negativ und der Wellenvektor entgegengesetzt zur Ausbreitungsrichtung ist. Durch die Rekursionsbeziehungen [44]

$$\frac{2m}{x} \mathcal{Z}_m^{(0,1)}(x) = \mathcal{Z}_{m-1}^{(0,1)}(x) + \mathcal{Z}_{m+1}^{(0,1)}(x), \quad (3.30)$$

$$2 \frac{d}{dx} \mathcal{Z}_m(x) = \mathcal{Z}_{m-1}^{(0,1)}(x) - \mathcal{Z}_{m+1}^{(0,1)}(x) \quad (3.31)$$

können die restlichen Komponenten berechnet werden, was insgesamt auf

$$\psi_{m,E_s}^{(0,1)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} \mathcal{Z}_{m-1}^{(0,1)}(kr)e^{i(m-1)\phi} \\ is\sqrt{2}\mathcal{Z}_m^{(0,1)}(kr)e^{im\phi} \\ -\mathcal{Z}_{m+1}^{(0,1)}(kr)e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

führt. Die Eigenfunktionen des flachen Bands  $E = 0$  lauten

$$\psi_{m,0}^{(0,1)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} \mathcal{Z}_{m-1}^{(0,1)}(kr)e^{i(m-1)\phi} \\ 0 \\ \mathcal{Z}_{m+1}^{(0,1)}(kr)e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

Um die Streuung an einer kreisförmigen Barriere analytisch diskutieren zu können, soll der einlaufende Anteil durch eine ebene Welle beschrieben werden, der sich entlang der  $x$ -Achse ausbreitet

(siehe Abb. 3.3). Hierzu verwenden wir die Eigenfunktionen des freien Teilchens aus Gl. (1.30) mit  $\alpha = 1$  und  $\theta_{\mathbf{k}} = 0$ , dies ergibt

$$\psi_{k,s}^{\text{inc}}(r, \phi) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2s} \\ 1 \end{pmatrix} e^{ikr \cos \phi}. \quad (3.34)$$

Durch Ausnutzen der Jacobi-Anger-Identität

$$e^{iz \cos \phi} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m(z) e^{im\phi} \quad (3.35)$$

kann die ebene Welle (3.34) in Partialwellen entwickelt werden, sodass

$$\psi_{k,s}^{\text{inc}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \begin{pmatrix} J_{m-1}(kr) e^{i(m-1)\phi} \\ is\sqrt{2} J_m(kr) e^{im\phi} \\ -J_{m+1}(kr) e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^{m-1} \psi_{m,E}^{(0)}(r, \phi). \quad (3.36)$$

Da der Gesamtdrehimpuls während des Streuprozesses erhalten ist, kann die reflektierte Welle im Bereich I ( $r > R$ ) durch eine Linearkombination aus unendlich vielen Partialwellen mit den Amplituden  $r_m$

$$\psi_{k,s}^{\text{refl}} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^{m-1} r_m \psi_{m,E_s}^{(1)}(r, \phi) \quad (3.37)$$

formuliert werden. Die transmittierte Welle im Bereich II ( $r < R$ ) wird durch

$$\psi_{q,s'}^{\text{trans}} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^{m-1} t_m \psi_{m,E_{s'}}^{(0)}(r, \phi) \quad (3.38)$$

beschrieben, wobei  $E_{s'}' = s' v_F q + V_0$  und  $t_m$  den Transmissionsamplituden entspricht. Im Raumbereich I ( $r > R$ ) ist die Gesamtwellenfunktion

$$\psi^{\text{I}} = \psi_{k,s}^{\text{inc}} + \psi_{k,s}^{\text{refl}} \quad (3.39)$$

eine Linearkombination bestehend aus der einlaufenden (inc) und reflektierten (refl) Welle. Die Wellenfunktion im Raumbereich II  $r < R$  lautet

$$\psi^{\text{II}} = \psi_{q,s'}^{\text{trans}}. \quad (3.40)$$

**Bestimmung der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten** Um die Streukoeffizienten  $r_m$ ,  $t_m$  zu berechnen, wird die Stetigkeitsbedingung aus Gl. (1.49) mit  $\alpha = 1$ ,  $\tau = 1$  und  $\Theta = \phi$  genutzt. Dies führt auf zwei Gleichungen

$$\psi_B^{\text{I}}(R) = \psi_B^{\text{II}}(R), \quad (3.41)$$

$$e^{i\phi} \psi_A^{\text{I}}(R) + e^{-i\phi} \psi_C^{\text{I}}(R) = e^{i\phi} \psi_A^{\text{II}}(R) + e^{-i\phi} \psi_C^{\text{II}}(R). \quad (3.42)$$

Eine kurze Diskussion der Stromdichte zeigt, dass aufgrund der Stetigkeitsbedingung die radiale Komponente

$$\psi^\dagger \mathbf{e}_r \cdot \mathbf{j}\psi = \sqrt{2v_F} \text{Re} [\psi_B^*(\psi_A e^{i\phi} + \psi_C e^{-i\phi})] \quad (3.43)$$

stetig sein muss, aber nicht zwingend die tangentielle Stromdichte

$$\psi^\dagger \mathbf{e}_\phi \cdot \mathbf{j}\psi = -\sqrt{2v_F} \text{Re} [\psi_B^*(\psi_A e^{i\phi} - \psi_C e^{-i\phi})]. \quad (3.44)$$

Diese Beobachtung wird eine wichtige Rolle spielen.

Anwenden der Stetigkeitsbedingung aus Gl. (3.42) auf die entsprechenden Wellenfunktionen aus Gl. (3.39) und (3.40) ergibt

$$t_m J_m(qR) = ss' (J_m(kR) + r_m H_m(kR)), \quad (3.45)$$

$$t_m (J_{m-1}(qR) - J_{m+1}(qR)) = J_{m-1}(kR) - J_{m+1}(kR) + r_m (H_{m-1}(kR) - H_{m+1}(kR)). \quad (3.46)$$

Das Gleichungssystem besitzt mit der Definition  $\mathcal{Z}_m^{(0,1)}(x) = \mathcal{Z}_{m-1}^{(0,1)}(x) - \mathcal{Z}_{m+1}^{(0,1)}(x)$  die Lösungen

$$r_m = -\frac{J_m(qR)\mathcal{Z}_m^{(0)}(kR) - ss'\mathcal{Z}_m^{(0)}(qR)J_m(kR)}{J_m(qR)\mathcal{Z}_m^{(1)}(kR) - ss'\mathcal{Z}_m^{(0)}(qR)H_m(kR)}, \quad (3.47)$$

$$t_m = \frac{H_m(kR)\mathcal{Z}_m^{(0)}(kR) - \mathcal{Z}_m^{(1)}(kR)J_m(kR)}{H_m(kR)\mathcal{Z}_m^{(0)}(qR) - ss'\mathcal{Z}_m^{(1)}(kR)J_m(qR)}. \quad (3.48)$$

Die Koeffizienten  $r_m$  und  $t_m$  sind unabhängig vom Polarwinkel  $\phi$ , was konsistent mit der  $\phi$ -Symmetrie des Systems ist. Die Funktionen  $J_m, H_m$  erfüllen die Relation  $J_{-m}(x) = (-1)^m J_m(x)$  und  $H_{-m}(x) = (-1)^m H_m(x)$ , sodass  $r_{-m} = r_m$  und  $t_{-m} = t_m$ .

### 3.2.1. Berechnung der Streugrößen

Die Streueffizienz ist eine nützliche Größe um die Streueigenschaften quantitativ zu untersuchen. Sie ist definiert durch das Verhältnis zwischen dem Streuquerschnitt und dem geometrischen Querschnitt [30]

$$Q = \frac{\sigma}{2R}, \quad (3.49)$$

wobei der Streuquerschnitt

$$\sigma = \frac{I^{\text{refl}}}{I^{\text{ein}}/A} \quad (3.50)$$

durch den Quotienten des reflektierten Wahrscheinlichkeitsstroms  $I^{\text{refl}}$  zum gesamten, einfallenden Strom  $I^{\text{ein}}$  pro Einheitsfläche  $A$  gegeben ist. Der einfallende Strom pro Einheitsfläche ist nach Ansatz  $I^{\text{ein}}/A = v_F$ . Der totale, reflektierte Strom wird mit Hilfe eines Wegintegrals entlang eines Weges  $S$  berechnet werden, der die zirkulare Potentialbarriere umschließt

$$I^{\text{refl}} = \oint_S \mathbf{j}^{\text{refl}} \cdot d\mathbf{s} = \int_0^{2\pi} j_r^{\text{refl}} \cdot r d\phi. \quad (3.51)$$

Das Integral entspricht einem Flussintegral in zwei Dimensionen. Da der Pfad  $S$  lediglich das Potential umschließt, berechnen wir das Flussintegral durch die reflektierte Stromdichte  $j_r^{\text{refl}}$  in der Fernfeldnäherung bei  $r \rightarrow \infty$ . Die reflektierte Welle aus Gl. (3.37) kann in Fernfeldnäherung für  $kr \gg 1$  mit Hilfe der Entwicklung der Hankelfunktionen für große Argumente [45]

$$H_m(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{is(x - m\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4})} \quad (3.52)$$

umgeformt werden zu

$$\psi_{k,s}^{\text{refl}} \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi kr}} \sum_m r_m (1 - is) e^{i\frac{\pi}{2}(m-1)(1-s)} \begin{pmatrix} e^{i(m-1)\phi} \\ \sqrt{2} e^{im\phi} \\ e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix}. \quad (3.53)$$

Für die radiale, reflektierte Stromdichte  $j_r^{\text{refl}}$  erhalten wir damit

$$j_\infty^{\text{refl}} = \left( \psi_{k,s}^{\text{refl}} \right)^\dagger \mathbf{e}_r \cdot \mathbf{j} \psi_{k,s}^{\text{refl}} = \frac{2v_F}{\pi r} \left\{ \sum_m \frac{|r_m|^2}{k} + \mathcal{R}e \sum_{\substack{m>l \\ m \neq l}} \frac{r_m r_l^*}{k} \cdot e^{i\frac{\pi}{2}(1-s)(m-l)} e^{i(m-l)\phi} \right\}. \quad (3.54)$$

Mit Gl. (3.54) und der Relation

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-l)\phi} d\phi = 2\pi \delta_{m,l} \quad (3.55)$$

ergibt sich für die Streueffizienz

$$Q = \frac{2}{R} \sum_m \frac{|r_m|^2}{k}, \quad (3.56)$$

da aufgrund von Gl. (3.55) nur die  $m = l$  Terme in Gl. (3.54) berücksichtigt werden. Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho^{\text{static}} = \psi^\dagger \psi$  und die zugehörige Stromdichte  $\mathbf{j} = v_F \psi^\dagger \mathbf{S} \psi$  stellen zwei weitere wichtige Größen dar. Die Stromdichte teilt sich in die beiden Raumbereiche I für  $r > R$  und II für  $r < R$  zusammen. Für den Raumbereich I erhalten wir in  $x$ -Richtung

$$j_x^I = j_x^{\text{inc}} + j_x^{\text{refl}} + j_x^{\text{int}} \quad (3.57)$$

und setzt sich aus den einzelnen Stromdichten der einlaufenden (inc), der reflektierten (refl) Welle und dem Interferenzanteil (int) zusammen. Da der einlaufende Anteil als ebene, auf das Einheitsgebiet normierte Welle gewählt wurde, die in  $x$ -Richtung propagiert, erhalten wir

$$j_x^{\text{inc}} = v_F (\psi_{k,s}^{\text{inc}})^\dagger S_x \psi_{k,s}^{\text{inc}} = v_F. \quad (3.58)$$

Für die übrigen Anteile ergibt sich

$$j_x^{\text{refl}} = v_F (\psi_{k,s}^{\text{refl}})^\dagger S_x \psi_{k,s}^{\text{refl}} \quad \text{und} \quad j_x^{\text{int}} = 2\mathcal{R}e \left\{ (\psi_{k,s}^{\text{inc}})^\dagger S_x \psi_{k,s}^{\text{refl}} \right\}. \quad (3.59)$$

Mittels der Definition der Wellenfunktionen aus Gl. (3.36) und (3.37) berechnet sich der Reflexions- und Interferenzanteil zu

$$j_x^{\text{refl}} = \frac{v_F}{4} \sum_{m,l} i^{m-l+1} r_l^* r_m e^{i(m-l)\phi} \cdot \left[ s H_m(kr) (H_{l-1}^*(kr) e^{i\phi} - H_{l+1}^*(kr) e^{-i\phi}) \right. \\ \left. - s H_l^*(kr) (H_{m-1}(kr) e^{-i\phi} - H_{m+1}(kr) e^{i\phi}) \right] \quad (3.60)$$

und

$$j_x^{\text{int}} = \frac{v_F}{2} \mathcal{R}e \left\{ e^{-ikr \cos \phi} \sum_m i^{m-1} r_m \cdot e^{im\phi} \cdot \left[ i 2s H_m(kr) + s (H_{m-1}(kr) e^{-i\phi} + H_{m+1}(kr) e^{i\phi}) \right] \right\}. \quad (3.61)$$

Die  $y$ -Komponente besteht nur aus dem Reflexions- und Interferenzanteil

$$j_y^I = j_y^{\text{refl}} + j_y^{\text{int}}, \quad (3.62)$$

da der einlaufende Anteil durch eine ebene Welle in  $x$ -Richtung beschrieben wird. Einsetzen der Gl. (3.36) und (3.37) in

$$j_y^{\text{refl}} = v_F (\psi_{k,s}^{\text{refl}})^\dagger S_y \psi_{k,s}^{\text{refl}} \quad \text{und} \quad j_y^{\text{int}} = 2\mathcal{R}e \left\{ (\psi_{k,s}^{\text{inc}})^\dagger S_y \psi_{k,s}^{\text{refl}} \right\} \quad (3.63)$$



führt auf

$$j_y^{\text{refl}} = \frac{v_F}{4} \sum_{m,l} i^{m-l} r_l^* r_m e^{i(m-l)\phi} \cdot [sH_m(kr) (H_{l-1}^*(kr)e^{i\phi} + H_{l+1}^*(kr)e^{-i\phi}) + sH_l^*(kr) (H_{m-1}(kr)e^{-i\phi} + H_{m+1}(kr)e^{i\phi})], \quad (3.64)$$

$$j_y^{\text{int}} = \frac{v_F}{2} e^{-ikr \cos \phi} \mathcal{Re} \left\{ \sum_m i^m r_m \cdot e^{im\phi} \cdot [s(H_{m-1}(kr)e^{-i\phi} + H_{m+1}(kr)e^{i\phi})] \right\}. \quad (3.65)$$

Im Raumbereich II innerhalb des Potentials ( $r < R$ ) erhalten wir

$$j_x^{\text{II}} = v_F (\psi_{q,s'}^{\text{trans}})^\dagger S_x \psi_{q,s'}^{\text{trans}} \quad \text{und} \quad j_y^{\text{II}} = v_F (\psi_{q,s'}^{\text{trans}})^\dagger S_y \psi_{q,s'}^{\text{trans}}, \quad (3.66)$$

was sich mit Gl. (3.38) durch

$$j_x^{\text{II}} = \frac{v_F}{4} \sum_{m,l} i^{m-l+1} t_l^* t_m e^{i(m-l)\phi} \cdot [s'J_m(qr) (J_{l-1}(qr)e^{i\phi} - J_{l+1}(qr)e^{-i\phi}) - s'J_l(qr) (J_{m-1}(qr)e^{-i\phi} - \varphi J_{m+1}(qr)e^{i\phi})] \quad (3.67)$$

und

$$j_y^{\text{II}} = \frac{v_F}{4} \sum_{m,l} i^{m-l} t_l^* t_m e^{i(m-l)\phi} \cdot [s'J_m(qr) (J_{l-1}(qr)e^{i\phi} + J_{l+1}(qr)e^{-i\phi}) + s'J_l(qr) (J_{m-1}(qr)e^{-i\phi} + J_{m+1}(qr)e^{i\phi})] \quad (3.68)$$

explizit berechnen lässt. Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho^{\text{static}}$  kann in einer ähnlichen Art und Weise berechnet werden. Es erfolgt wieder eine Einteilung in die Raumbereiche I und II und Anteile der Wellenfunktionen, wir erhalten

$$\rho^{\text{I}} = \rho^{\text{inc}} + \rho^{\text{refl}} + \rho^{\text{int}} \quad \text{und} \quad \rho^{\text{II}} = \rho^{\text{trans}}. \quad (3.69)$$

Aufgrund der Normierung gilt  $\rho_{\text{inc}} = 1$ . Für die übrigen Anteile lassen sich mit den Gl. (3.36), (3.37) und (3.38) die Ausdrücke

$$\rho^{\text{refl}} = \frac{1}{4} \sum_{m,l} r_m r_l^* \cdot i^{m-l} e^{i(m-l)\phi} [2H_l^*(kr)H_m(kr) + H_{l-1}^*(kr)H_{m-1}(kr) + H_{l+1}^*(kr)H_{m+1}(kr)], \quad (3.70)$$

$$\rho^{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_m \mathcal{Re} \left\{ i^{m-l} r_m [2J_l^*(qr)H_m(kr) + J_{l-1}^*(qr)H_{m-1}(kr) + J_{l+1}^*(qr)H_{m+1}(kr)] \right\}, \quad (3.71)$$

und

$$\rho^{\text{trans}} = \frac{1}{4} \sum_{m,l} t_m t_l^* \cdot i^{m-l} e^{i(m-l)\phi} [2J_l^*(qr)J_m(qr) + J_{l-1}^*(qr)J_{m-1}(qr) + J_{l+1}^*(qr)J_{m+1}(qr)] \quad (3.72)$$

angeben.

### 3.2.2. Charakterisierung des Streuverhaltens

Die Streueigenschaften einer kreissymmetrischen Potentialbarriere werden in Graphen mittels der dimensionslosen Parameter  $X = kR$  und  $\rho = v_0 R$  (normiert durch die Fermi-Geschwindigkeit) in charakteristische Streuregime unterteilt. Das Verhalten der Barriere im Dice-Gitter lässt sich im Wesentlichen in die gleichen Streuregime einordnen, jedoch kommen feine Besonderheiten durch den *Super-Klein-Tunnel-Effekt* hinzu [32]. Die Grundlage der folgenden Darstellungen bietet die Arbeit [32], in der vor allem das Wiederkehren des resonanten Streuregimes, perfekte Kaustiken

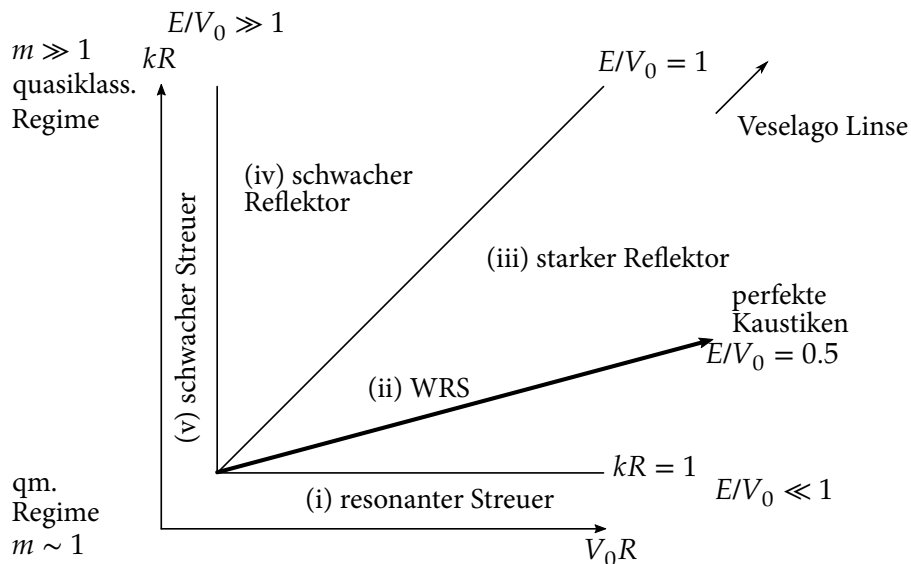


Abbildung 3.4.: Diagramm der Streuregime der zirkularen Potentialbarriere im Dice-Gitter in Abhängigkeit von  $kR$  und  $V_0R$  mit den Regimen (i) resonanter Streuer, (ii) Wiederkehr des resonanten Streuers (WRS), (iii) starker Reflektor, (iv) schwacher Reflektor und (v) schwacher Streuer. Durch  $kR$  wird das quantenmechanische (qm.) [quasiklassische (quasiklass.)] charakterisiert und gibt die maximale Partialwellenzahl  $m$  an.

und isotrope Streuung im niederenergetischen Bereich untersucht worden sind. Wir beschränken uns im weiteren Verlauf auf Beispiele aus dem  $E/V_0 < 1$  Regime.

In der Abb. 3.4 ist das Regimediagramm dargestellt, welches den Parametern  $kR$  und  $V_0R$  Streueigenschaften zuordnet. Auf der  $y$ -Achse ist  $kR$  abgetragen und charakterisiert mit den Grenzfällen  $kR \gg 1$  das quantenmechanische Regime und mit  $kR \ll 1$  das quasiklassische Regime. Im quantenmechanischen Regime ist die Wellenzahl wesentlich größer als der Radius des Potentials  $\lambda \gg R$ , sodass bereits wenige Partialwellen  $m$  die gesamte Information über das Streuverhalten enthalten. Dagegen ist das quasiklassische Regime durch  $R \gg \lambda$  gekennzeichnet, weshalb eine hohe Anzahl an Partialwellen benötigt werden. Für dieses Regime könnte das Streuproblem auch effektiver mittels Strahlenoptik gelöst werden, da die Konvergenz der Partialwellenzerlegung für große Partialwellensummen schlecht ist [31, 32]. Der Brechungsindex  $n = 1 - V_0/E$  beschreibt dann den Streuer als Linse bzw. Veselago Reflektor mit negativen  $n$ , wenn  $E/V_0 < 1$  und  $kR \gg 1$ . Wir werden nun alle Streuregime aus Abb. 3.4 bis auf das Regime des schwachen Reflektors (iv) durch Beispiele charakterisieren und auf Unterschiede zu Graphen hinweisen.

Bevor wir konkrete Beispiele zu den Streuregimen resonanter Streuer (i) und starker Reflektor (iii) aus Abb. 3.4 anführen, wollen wir zunächst das resonante Streuregime (i) analytisch charakterisieren. Dieses Regime zeichnet sich durch die Resonanzen aus, die für  $kR \ll 1$  und  $E/V_0 \ll 1$  auftreten. In diesem Sinne wollen wir zunächst mit Hilfe der Entwicklung der Besselfunktionen für kleine Argumente

$$J_m(x) \approx \begin{cases} \frac{(-1)^m}{(-m)!} \left(\frac{x}{2}\right)^m, & \text{falls } m < 0 \\ 1, & \text{falls } m = 0 \\ \frac{1}{m!} \left(\frac{x}{2}\right)^m, & \text{falls } m > 0 \end{cases}, \quad Y_m(x) \approx \begin{cases} -\frac{(-1)^m(-m-1)!}{\pi} \left(\frac{x}{2}\right)^m, & \text{falls } m < 0, \\ \frac{2}{\pi} \left(\ln \frac{x}{2} + \gamma\right), & \text{falls } m = 0, \\ -\frac{(m-1)!}{\pi} \left(\frac{x}{2}\right)^m, & \text{falls } m > 0 \end{cases} \quad (3.73)$$

und der Definition der Streueffizienz aus Gl. (3.56) bestehend aus den Reflexionskoeffizienten aus Gl. (3.48) eine Resonanzbedingung ableiten. Aus der Definition der Reflexionskoeffizienten folgt

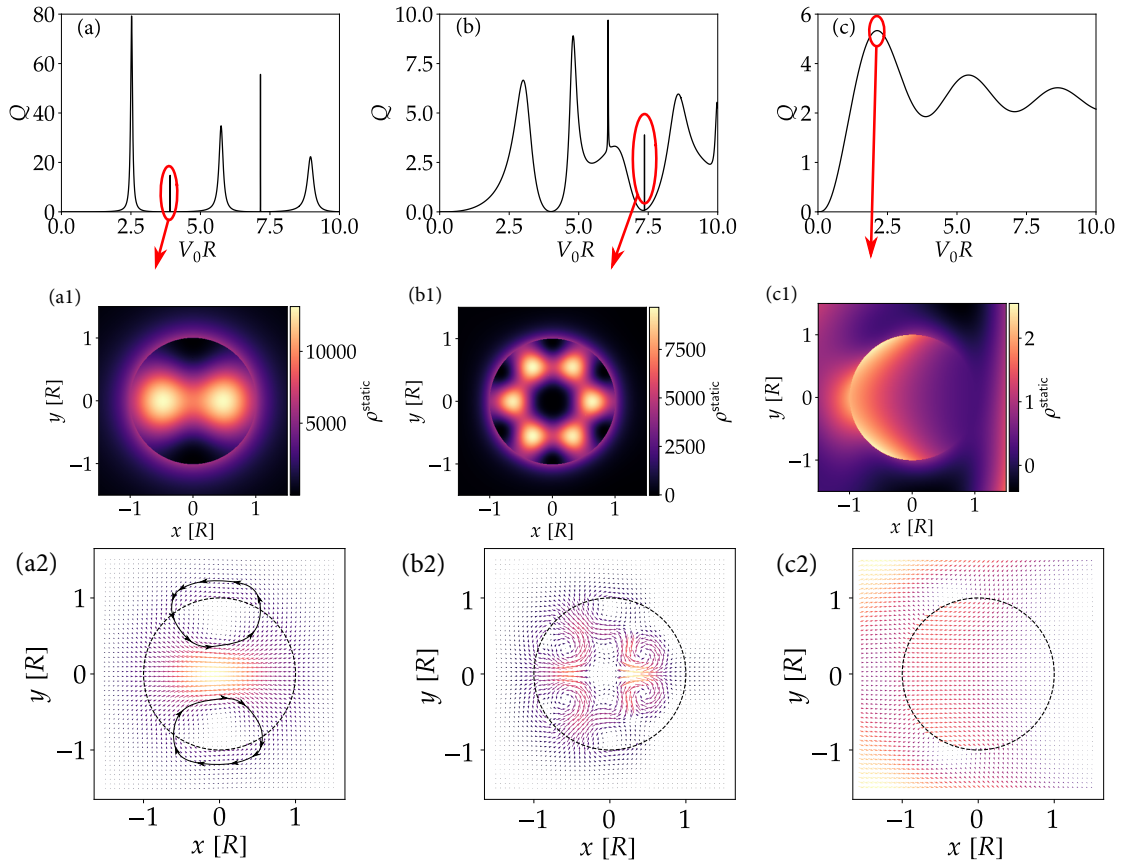


Abbildung 3.5.: (a-c) Statische Streueffizienz  $Q$  für verschiedene relative Energien (a)  $E/V_0 = 0.01$ , (b)  $E/V_0 = 0.1$  und (c)  $E/V_0 = 0.9$  in Abhängigkeit der reduzierten Barrierenstärke  $V_0R$ . (a1-c1) Wahrscheinlichkeitsdichten  $\rho^{\text{static}} = \psi^\dagger \psi$  für die markierten Resonanzen (a1) bei  $V_0R \sim 3.8$  (b1) bei  $V_0R \sim 7.4$ , (c1)  $V_0R \sim 2$ . (a2)-(c2) Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\mathbf{j} = v_F \psi^\dagger \mathbf{S} \psi$  für die markierten Resonanzen entsprechend aus (a)-(c).

eine Darstellung mit Real- und Imaginärteil

$$r_m = \frac{F_m}{F_m + iG_m}. \quad (3.74)$$

Damit  $|r_m|^2$  maximal wird, fordern wir

$$G_m = -J_m(qR) \mathcal{Z}_m^{(2)}(kR) + ss' \mathcal{Z}_m^{(0)}(qR) Y_m(kR) = 0, \quad (3.75)$$

mit der Ersetzung  $\mathcal{Z}_m^{(2)} = Y_{m-1} - Y_{m+1}$ . Aus dieser Forderung erhalten wir mittels den Entwicklungen aus Gl. (3.73) die Resonanzbedingung

$$V_0R \approx \begin{cases} j_{0,p} - kR \ln(\gamma_E kR/2), & \text{falls } m = 0 \\ j_{m,p} + kR, & \text{falls } m \neq 0 \end{cases}, \quad (3.76)$$

wobei  $j_{m,p}$  die  $p$ -te Nullstelle von  $J_m$  ist und  $\gamma_E = \ln \gamma$  die logarithmische Euler-Mascheroni-Konstante bezeichnet.

Die Entwicklung der Reflexionskoeffizienten  $r_0$  und  $r_1$  um die Resonanzbedingung aus Gl. (3.76) ergibt beim Einsetzen in die Streueffizienz

$$Q \approx \frac{2}{kR} \left[ \frac{\Gamma_0^2}{\Gamma_0^2 + (V_0R - j_{0,p} + kR \ln(\gamma_E kR/2))^2} + 2 \frac{\Gamma_1^2}{\Gamma_1^2 + (V_0R - j_{1,p} - kR)^2} \right]. \quad (3.77)$$

Diese Entwicklung ist nur gültig, wenn die Näherungen  $kR \ll 1$  und  $E/V_0 \ll 1$  erfüllt sind. Anhand dieser Entwicklung wird bereits deutlich, dass  $kR$  ein Maß für die am Streuproblem teilnehmenden Partialwellen ist, da für kleine  $kR$  die Anteile der  $m = 0$  und  $m = 1$  Mode die Entwicklung dominieren. Das Linienprofil der Resonanzen aus Gl. (3.77) entspricht einer Lorentzkurve (Breit-Wigner Verteilung) mit den Lebenszeiten

$$\frac{1}{\Gamma_0} = \frac{2}{\pi kR} \quad \text{und} \quad \frac{1}{\Gamma_1} = \frac{2}{\pi(kR)^3}, \quad (3.78)$$

was analog zu Graphen ist. Generell gilt dann aufgrund der stark unterschiedlichen Lebenszeiten  $1/\Gamma_0 \ll 1/\Gamma_1$  da  $kR \ll 1$ , dass die  $m = 0$  Resonanzen breiter sind als die  $m = 1$  Resonanzen. Resonanzen mit höherem  $m$  wären noch schärfer, sodass diese gar nicht mehr aufgelöst werden. Im Limes  $kR \rightarrow 0$  befinden sich die Resonanzen dann exakt bei den Nullstellen der Besselfunktion

$$V_0R = j_{m,p}. \quad (3.79)$$

In Abb. 3.5 ist die Streueffizienz in Abhängigkeit von  $V_0R \in [0.001, 10]$  für (a)  $E/V_0 = 0.01$ , (b)  $E/V_0 = 0.1$  und (c)  $E/V_0 = 0.9$  dargestellt. Die Darstellung (a) ist ein gutes Beispiel des resonanten Streuers (i) (siehe Abb. 3.4), da die Voraussetzungen mit  $kR = 0.1 \ll 1$  und  $E/V_0 = 0.01$  erfüllt sind. Es sind ausgeprägte Resonanzen bei  $V_0R \sim 2.4, 5.5$  und  $8.7$  zu beobachten. Die Resonanzstellen werden also durch die Resonanzbedingung aus Gl. (3.76) mit den ersten drei Nullstelle der Besselfunktion  $J_{m=0}(x)$  identifiziert. Für  $V_0R \sim 3.7$  und  $7$  sind äußerst scharfe Resonanzen zu beobachten, die der ersten bzw. zweiten Nullstelle von  $J_{m=1}(x)$  zugeordnet werden. Neben den Resonanzstellen stimmen auch die Resonanzbreiten mit der analytischen Diskussion überein. Solche scharfen Resonanzen korrespondieren mit gebundenen Zuständen in einem kreisförmigen Potentialtopf. Um die quasigebundenen Zustände weiter zu charakterisieren, ist in Abb. 3.5 (a1) die Wahrscheinlichkeitsdichte der Resonanz bei  $V_0R \sim 3.8$  und  $E/V_0 = 0.01$  dargestellt. Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist innerhalb des Potentials stark konzentriert, was auf einen temporären Einfang eines gebundenen Zustands hinweist. Die zugehörige Stromdichte im Nahfeld ist in Abb. 3.5 (a2) dargestellt und weist zur  $x$ -Achse symmetrische Vortex-Strukturen (schwarze Linie), die typisch für den Einschluss von quasigebundenen Zuständen im resonanten Streuregime sind.

Die Streueffizienz in Abhängigkeit von  $V_0R$  für die relative einfallende Energie von  $E/V_0 = 0.1$  ist in Abb. 3.5 (b) dargestellt. Mit einem größeren Verhältnis von  $E/V_0$  erhöht sich auch  $kR$ , sodass die Anzahl der beitragenden Partialwellen steigt. Dies führt zum Verschmieren der Resonanzen, nichtsdestotrotz sind weiterhin ausgeprägte Resonanzen zu beobachten. Diese Darstellung kann als Übergang vom resonanten Regime in das starke Reflektor Regime verstanden werden, weil der relative Größenparameter maximal den Wert  $kR = 1$  annimmt (siehe Abb. 3.4). Zur Resonanz bei  $V_0R \sim 7.4$  wurde in Abb. 3.5 (b1) die Wahrscheinlichkeitsdichte dargestellt. Sie zeigt im Inneren des Potentials eine starke Lokalisierung eines quasigebundenen Zustands. Der Einschluss erfolgt erneut über Vortizes in der Stromdichte (siehe Abb. 3.5 (b2)).

Die Abbildung 3.5 (c) zeigt die Streueffizienz für  $E/V_0 = 0.9$  in Abhängigkeit von  $V_0R$ . Sie ist repräsentativ für das Regime des starken Reflektors (iii) aus Abb. 3.4. Nun ist der relative Größenparameter so stark angewachsen, dass die Resonanzen völlig ausgewaschen sind und nur noch eine wellige Struktur vorhanden ist. Wir haben das semiklassische Regime erreicht, bei dem das Potential als Veselago Reflektor mit  $n < 0$  agiert. Die charakteristische Wahrscheinlichkeitsdichte und Stromdichte ist entsprechend in Abb. 3.5 (c1) und 3.5 (c2) dargestellt. In der Wahrscheinlichkeitsdichte wird deutlich, dass kein gebundener Zustand angeregt wird, da innerhalb des Potentials keine starke Konzentration der Wahrscheinlichkeitsdichte auftritt. Dies wird zusätzlich durch die Stromdichte unterstützt, da diese keine für den Einfang erforderlichen Vortizes aufweist.

Das Regime schwacher Reflektor (v) ist in jedem der drei Teilabbildungen 3.5 vertreten, denn bei sehr kleinen  $V_0R$  gilt stets  $Q \rightarrow 0$ . Wenn die Streueffizienz verschwindet, dann muss nach Definition die reflektierte Stromdichte verschwinden (siehe Gl. (3.56)). Bei den gewählten Parametern reflektiert das Potential kaum.

### 3.2.2.1. Wiederkehr des resonanten Streuregimes

Ausgehend vom Diagramm in Abb. 3.4 wird nun das Regime (ii) Wiederkehr des resonanten Streuers (WRS) diskutiert. Um die Streuregime in Abhängigkeit der charakteristischen Parameter zu veranschaulichen, ist in Abb. 3.6 die Streueffizienz als Funktion von  $E/V_0$  und  $V_0R$  für  $\alpha = 1$  (Pseudospin-1 Dirac-Weyl Quasiteilchen (blau)) und  $\alpha = 0$  (Pseudospin-1/2 Dirac-Weyl Quasiteilchen (rot)) dargestellt. Für Graphen ist das bekannte Verhalten zu beobachten, bei dem zunächst für kleine  $E/V_0$  ausgeprägte Resonanzen auftreten, die mit steigendem  $E/V_0$  zurückgehen, bis nur noch eine wellenartige Struktur zurückbleibt. Dagegen tritt im Dice-Gitter das besondere Phänomen des WRS-Regimes auf. Nach dem die scharfen Resonanzen abgeklungen sind, treten sie plötzlich bei  $E/V_0 \lesssim 0.5$  wieder auf, nur um kurz danach wieder zurückzugehen. Um dieses Regime genauer zu analysieren, ist in Abb. 3.7 nochmal die Streueffizienz  $Q$  für Pseudospin-1 Teilchen (schwarz) und (b) Pseudospin-1/2 Teilchen (rot) in Abhängigkeit der reduzierten Barrierenstärke  $V_0R$  für  $E/V_0 = 0.49$  dargestellt. Die Streueigenschaften unterscheiden sich stark: Für die Pseudospin-1 Teilchen ist die Streueffizienz resonant, während beim Pseudospin-1/2 eine wellenartige Struktur wie im Regime (iii) (siehe Abb. 3.4) auftritt.

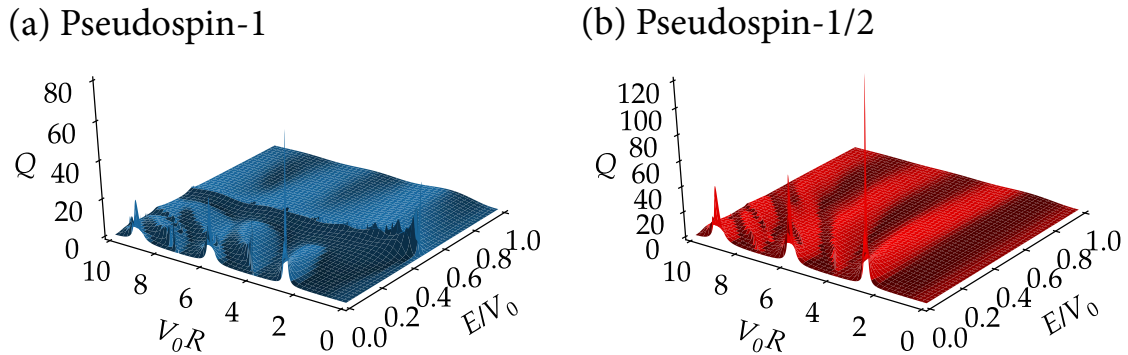


Abbildung 3.6.: Streueffizienz  $Q$  in Abhängigkeit der relativen einfallende Energie  $E/V_0$  und der relativen Streustärke  $V_0R$  für (a) Pseudospin-1 und (b) Pseudospin-1/2 Quasiteilchen.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho^{\text{static}}$  ist für die zweite Resonanz der Streueffizienz aus Abb. 3.7 bei  $V_0R = 0.937573$  in Abb. 3.8 (a) dargestellt. Sie weist eine starke Konzentration der Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Rand des Potentials auf und ist deshalb nicht zu verwechseln mit einer „whispering gallery mode“, die erst für sehr hohe  $kR$  (im Limes der Strahlenoptik) auftritt. Diese Moden entstehen nur im Limes der Strahlenoptik, da dann die Welle wie Strahlen sehr oft entlang des Potentialumfangs reflektiert werden und damit eine ähnliche Darstellung in der Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho^{\text{static}}$  generieren würde. Um zu zeigen, dass der Einschluss nicht durch eine hohe Anzahl an Reflexionen entsteht, ist in Abb. 3.8 (b) die zugehörige Stromdichte  $\mathbf{j}$  dargestellt. Es sind sogenannte „Fusiform“ Vortizes entlang des Potentialrands für die Ausbildung dieses besonderen Zustands verantwortlich, die anders als z.B. im Regime des resonanten Streuers sich nicht hauptsächlich im Potential befinden (vgl. Abb. 3.5 (a2) oder (b2)). Sie breiten sich über den Rand hinaus aus, sodass die Ströme innerhalb und außerhalb genau entgegengesetzt sind. Dies ist möglich, da nach der Definition der Stromdichte der radiale Anteil nach Gl. (3.43) stetig sein muss aber der tangential Anteil in  $\phi$ -Richtung nach Gl. (3.44) unstetig sein darf.

Gehen wir im WRS-Regime in den semiklassischen Grenzfall  $kR \gg 1$  über, dann fungiert bei  $E/V_0 = 0.5$  die kreisförmige Barriere als Linse mit Brechungsindex  $n = -1$ . Innerhalb des Potentials wird die Wahrscheinlichkeitsdichte auf einen Raumpunkt fokussiert. Dafür ist in Abb. 3.9 (a) die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho^{\text{static}}$  und (b) die dazugehörige Stromdichte für die Parameter  $E/V_0 = 0.5$  und  $V_0R = 300$  dargestellt. Es ist eindeutig eine starke Fokussierung auf einen Raumpunkt in beiden Größen zu erkennen. Allgemein wird dieses Phänomen als Ausbilden einer Kaustik bezeichnet. In der Optik beschreibt eine Kaustik die Einhüllende der gebeugten oder reflektierten Lichtstrahlen von einer gebogenen Oberfläche. Die Lichtstrahlen sind an jedem Punkt der Kaustik

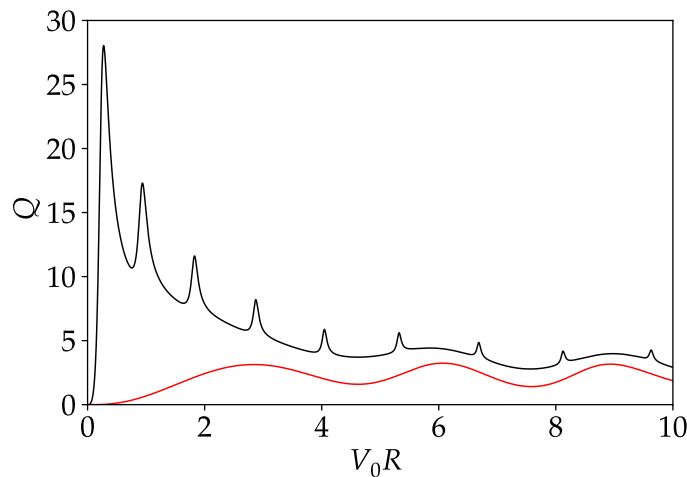


Abbildung 3.7.: Streueffizienz  $Q$  in Abhängigkeit der relativen Streustärke  $V_0 R$  bei  $E/V_0 = 0.49$  für Pseudospin-1 Teilchen (schwarz) und Pseudospin-1/2 Teilchen (rot).

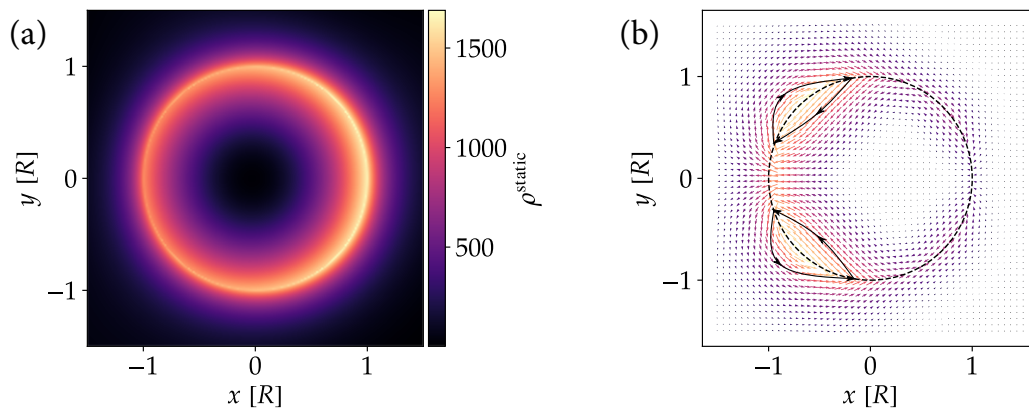


Abbildung 3.8.: (a) Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho^{static}$  und (b) Wahrscheinlichkeitsstromdichte für  $E/V_0 = 0.49$  bei  $V_0 R = 0.937573$ . Der schwarze Kreis stellt die Abmessungen des Potentials dar.

tangential, wodurch die Kaustik einen Rand der Einhüllenden der Lichtstrahlen als Kurve von konzentriertem Licht definiert. Diese Kurve weist häufig eine Singularität auf. Die dargestellte Stromdichte aus Abb. 3.9 (b) ist tangential zur Kaustik und fokussiert sich auf eine Singularität, die in der Wahrscheinlichkeitsdichte aus Abb. (a) als Maximum erkenntlich ist. In Pseudospin-1/2 Systemen ist bekannt, dass durch den verstimmbaren Brechungsindex ebenfalls Kaustiken innerhalb des kreissymmetrischen Potentials erzeugt werden [29]. Die Kaustiken im Pseudospin-1 System werden als „perfekt“ bezeichnet, da sie wesentlich stärker fokussiert bzw. ausgeprägt sind [32]. Es konnte gezeigt werden, dass sie ein direktes Resultat des *Super*-Klein-Tunnel-Effektes sind. Zusätzlich wurde festgestellt, dass für  $E/V_0 \lesssim 0.5$  ebenfalls perfekte Kaustiken im Inneren des Potentials erzeugt werden, da zwar wegen  $E/V_0 \neq 0.5$  kein *Super*-Klein-Tunneln mehr auftritt aber für  $E/V_0 \lesssim 0.5$  dennoch die Transmissionswahrscheinlichkeit relativ unabhängig vom Einfallswinkel ist, also  $T \approx 1$  für fast alle Einfallswinkel.

### 3.2.3. Winkelabhängigkeit der Stromdichte im Fernfeld

Die Analyse der reflektierten, radialen Stromdichte im Fernfeld gibt Aufschluss über die Streueigenschaften. Wir interessieren uns vorwiegend für die Winkelabhängigkeit, weshalb die  $1/r$  Abhängigkeit vom radialen Abstand von  $j_\infty^{refl}(r, \phi)$  aus Gl. (3.54) vernachlässigt wird. Die reflektierte Stromdichte setzt sich dann aus einer Fourierreihe mit konstantem Anteil  $|r_m|^2$  und den Koeffizienten, die durch

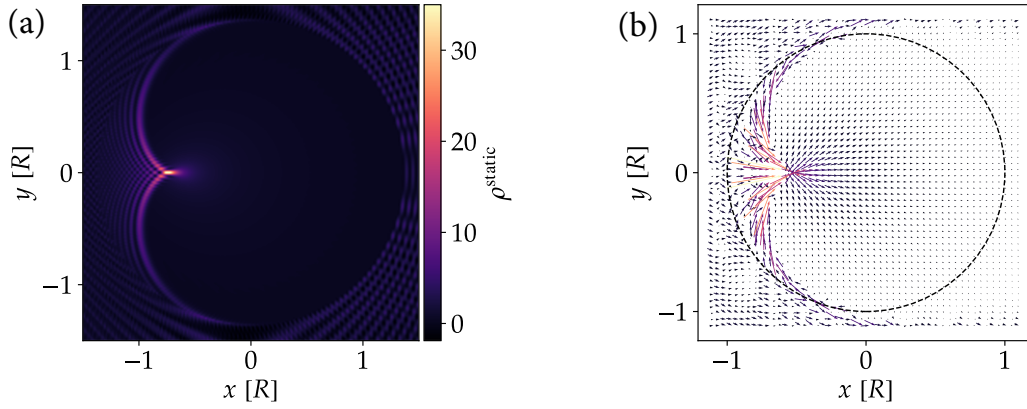


Abbildung 3.9.: (a) Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho^{\text{static}}$  und (b) Stromdichte  $\mathbf{j}$  im Nahfeld für die Parameter  $E/V_0 = 0.5$  und  $V_0 R = 300$ . Der schwarze Kreis stellt die Abmessungen des Potentials dar.

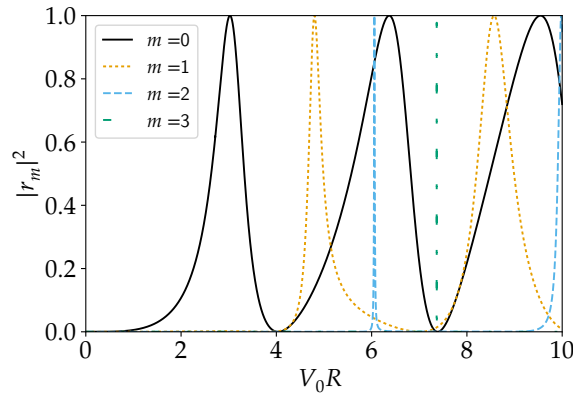


Abbildung 3.10.: Absoluttwert der Reflexionskoeffizienten  $|r_m|^2$  in Abhängigkeit von  $V_0 R$  für die ersten vier Partialwellen  $m = 0$  (durchgezogen),  $m = 1$  (gepunktet),  $m = 2$  (gestrichelt) und  $m = 3$  (gestrichelt gepunktet). Die Parameter sind Abb. 3.5 (b) entnommen.

$r_m \cdot r_l^*$  bestimmt werden, zusammen. Eine der wichtigsten Besonderheiten kann direkt abgelesen werden, wenn angenommen wird, dass für alle  $m \neq 0$  die Koeffizienten  $r_m = 0$  verschwinden. Tritt dieser Fall ein, dann erhalten wir

$$j_{\infty}^{\text{refl}}(\phi) = \frac{2v_F}{\pi} \frac{|r_0|^2}{k}, \quad (3.80)$$

was einer isotropen Streuung entspricht, da der Strom *winkelunabhängig* ist. Diese Beobachtung ist überraschend, denn nach Abschnitt 3.1 über den Klein-Tunnel-Effekt sollte auch im Hinblick auf die erhöhte Transparenz von Potentialbarrieren im Dice-Gitter ( $\alpha = 1$ ) die Vorwärtsstreuung ähnlich wie in Graphen stark bevorzugt sein. Wenn wir die Pseudohelizität  $h = \mathbf{S} \cdot \mathbf{k}/k$  betrachten, dann sind die Eigenwerte aufgrund der Kommutatorrelation  $[H, h] = 0$  während des Streuprozesses erhalten. Wird bei einem Rückstreuprozess die Zeitumkehrsymmetrie betrachtet, dann besteht dieser Prozess aus einem Paar von Streuwegen, dessen Pseudospins um  $2\pi$  relativ zueinander rotiert sind. Die Phasendifferenz zwischen ihnen ist also durch die Berry Phase  $e^{i\Phi_B}$  bestimmt. Nach Gl. (2.18) mit  $\alpha = 1$  und  $\tau = 1$  ist die Berry Phase für dispersive Bänder  $\Phi_B = 0$ . Die beiden Zustände können kohärent interferieren, was für kleine Energien eine isotrope Streuung bedingt. In Graphen berechnet sich die Berry Phase ( $\alpha = 0$ ) zu  $\Phi_B = \pi$ , sodass die beiden Zustände destruktiv interferieren und damit Rückstreuung ausgeschlossen ist.

Um dies an einem Beispiel näher zu untersuchen, sind in Abb. 3.10 die Reflexionskoeffizienten  $|r_m|^2$  mit den Parametern aus Abb. 3.5 (b) für  $m \in [0, 3]$  bei  $E/V_0 = 0.1$  in Abhängigkeit von  $V_0 R$

dargestellt. Aufgrund von  $r_m = r_{-m}$ , beschränken wir uns auf positive  $m$ . Es wurden nur die ersten vier Werte von  $m$  gewählt, da die Koeffizienten mit höherem Index vernachlässigbar klein sind. Da die Reflexionskoeffizienten zur Streueffizienz aus Abb. (3.5) (b) zugehörig sind, können die Resonanzen eindeutig bei  $V_0R \sim 3$  mit der  $m = 0$  Mode, bei  $V_0R \sim 4.8$  mit einer  $m = 1$  und  $m = 0$  Mode, bei  $V_0R \sim 6$  mit einer  $m = 2$  und  $m = 0$  Mode, bei  $V_0R \sim 7.4$  mit einer  $m = 3$  Mode und bei  $V_0R \sim 8.6$  mit einer  $m = 2$  und  $m = 0$  Mode identifiziert werden. Für die erste Resonanz erwarten wir nach den Vorbetrachtungen eine isotrop verteilte, reflektierte Wahrscheinlichkeitsdichte. In der Abb. 3.11 sind die Winkelabhängigkeiten der Stromdichte  $j_{\infty}^{\text{refl}}$  für die Resonanzen der Streueffizienz aus Abb. 3.5 (b) dargestellt. In Teil (a) ist eindeutig eine isotrope Winkelabhängigkeit zu beobachten. Da die Überlagerung von vielen Partialwellen allgemein recht kompliziert ist, führt dies auf eine komplexe Winkelabhängigkeit, die von den angeregten Partialwellen abhängt. Mit Hilfe von höheren Partialwellen wie z.B. mit einer reinen  $m = 3$  Anregung (vgl. Abb. 3.10) aus Abb. 3.11 (d) lassen sich auch komplexere Streurichtungen realisieren. Der größte Unterschied zur Streuung in Graphen besteht in der nicht verbotenen Rückwärtsstreuung, weshalb das Dice-Gitter ein ideales Material ist um einen quantenmechanischen Schalter zu bauen, der die Streurichtung verstellt.



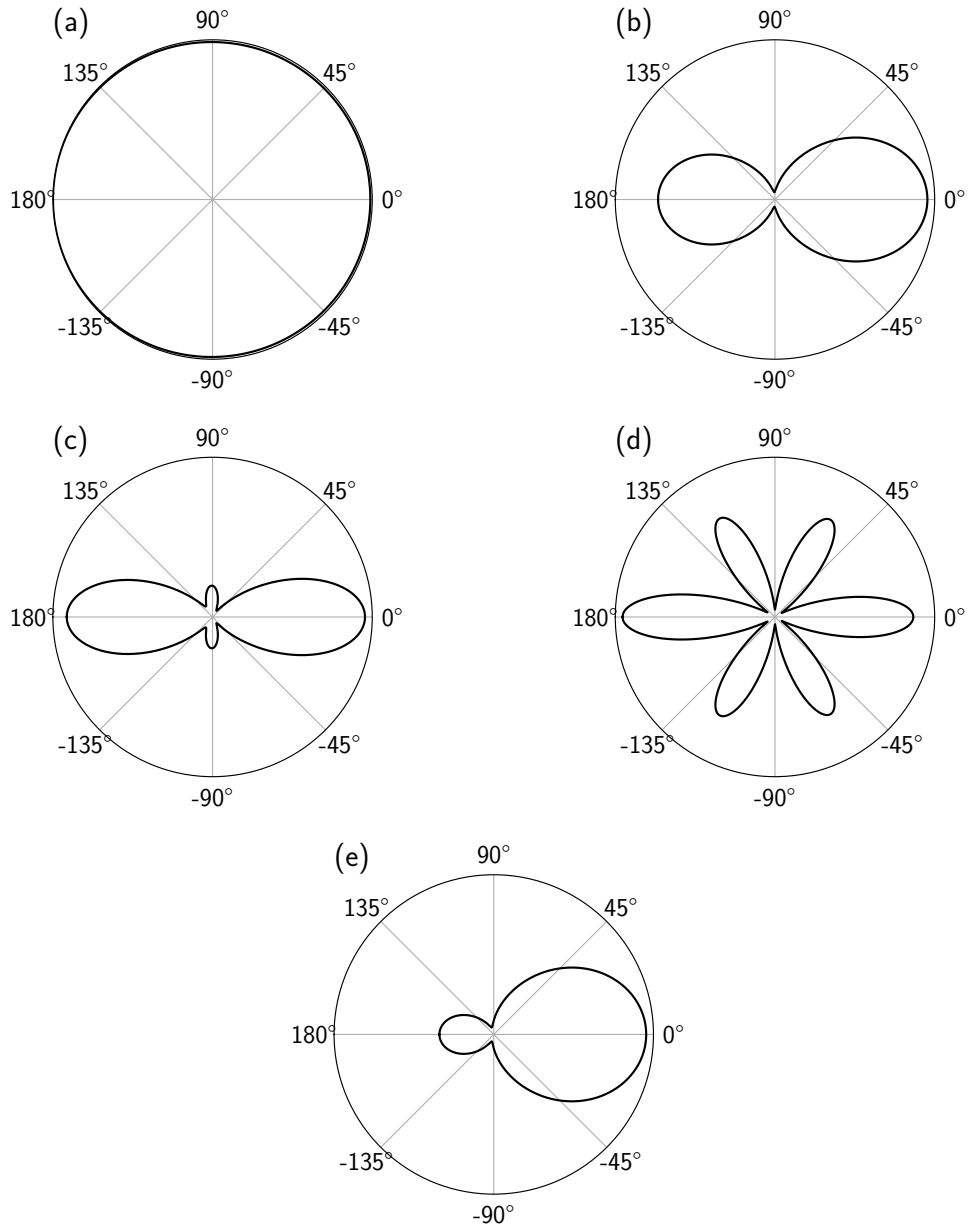


Abbildung 3.11.: Winkelabhängigkeit der reflektierten, fernfeldgenäherten Stromdichte  $j_{\infty}^{\text{refl}}$  im resonanten Streuregime bei  $E/V_0 = 0.1$  für die angeregten Partialwellen bei (a)  $V_0 R \sim 3$  wenn die  $m = 0$ , (b)  $V_0 R \sim 4.8$  wenn die  $m = 1$  und  $m = 0$ , (c)  $V_0 R \sim 6$  wenn die  $m = 2$  und  $m = 0$ , (d)  $V_0 R \sim 7.4$  wenn die  $m = 3$  und (e)  $V_0 R \sim 8.6$  wenn die  $m = 2$  und  $m = 0$  Mode angeregt ist.

### 3.3. Streuung an oszillierenden zirkularen Barrieren

Die Untersuchung einer statischen, zirkularen Potentialbarriere hat gezeigt, dass die Transporteigenschaften stark von der Energie abhängen, sodass ein externes Treiben mit einem zeitabhängigen Potential interessante Effekte hervorbringt. Dies wurde bei der Analyse von Graphen-Strukturen mit rechteckigen oder kreisförmigen Barrieren, die mit der Frequenz  $\omega$  oszillieren, gezeigt [33, 53]. In optomechanischem Graphen konnte durch eine geschickte Konfiguration das oszillierende Potential als Schalter verwendet werden [34]. Für ein Pseudospin-1 System wurden bereits oszillierende, rechteckige Barrieren untersucht [35]. Es konnte beobachtet werden, wie die Oszillation der Potentialhöhe mit der Frequenz  $\omega$  zu inelastischen Streuprozessen führt, bei der die einfallende Welle der Energie  $E$  Energiequanten in natürlichen Vielfachen der Oszillationsfrequenz  $n\omega$  ausgetauscht wird. Die Anregung von und Interferenz mit diesen sogenannten Seitenbändern  $E + n\omega$  führt unter anderem zu einer äußerst anisotropen Winkelabhängigkeit der Transmission und Reflexion von Quasiteilchen.

Im Folgenden Abschnitt werden wir zunächst die zeitabhängigen Wellenfunktionen innerhalb und außerhalb der oszillierenden zirkularen Potentialbarriere mittels Floquet-Theorie berechnen. Anschließend werden die Bestimmungsgleichungen für die Streukoeffizienten aus der Stetigkeit abgeleitet, woraus im darauf folgenden Abschnitt explizite Ausdrücke für Streugrößen angegeben werden. Die Streugrößen werden numerisch berechnet und neben einer Charakterisierung der Streueigenschaften von periodisch getriebenen kreisförmigen Potentialen im Dice-Gitter auch zur Untersuchung und gezielten Kontrolle der anisotropen Winkelabhängigkeit genutzt.

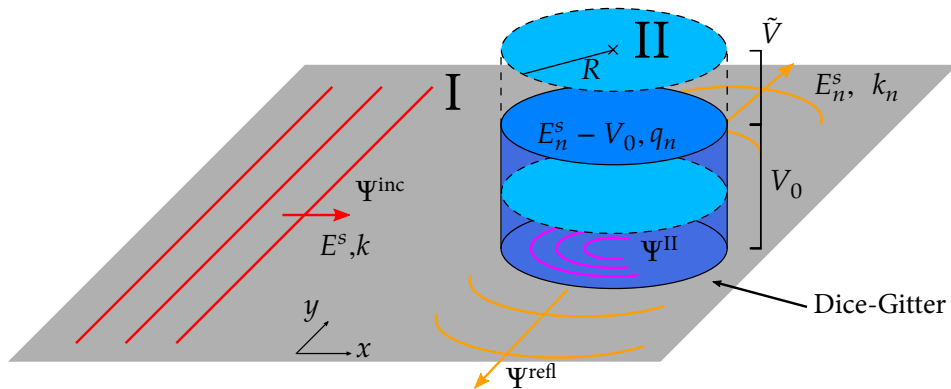


Abbildung 3.12.: Schematische Darstellung der zirkularen Potentialbarriere mit Radius  $R$ , Höhe  $V_0$  und Oszillationsamplitude  $\tilde{V}$  auf einem Dice-Gitter (grauer Untergrund). Von links im Raumbereich I läuft eine ebene Welle  $\psi^{\text{inc}}$  mit der Energie  $E = s v_F k$  und der Wellenzahl  $k$  in  $x$ -Richtung ein. Diese Welle wird in einen reflektierten Anteil  $\psi^{\text{refl}}$  mit der Energie  $E_n^s$  und Wellenzahl  $k_n$  und einen transmittierten Anteil  $\psi^{\text{trans}}$  in den Bereich II mit der Energie  $E_n^s - V_0$  und  $q_n$  gestreut.

#### 3.3.1. Berechnung der Wellenfunktionen mittels Floquet-Theorie

Ausgangspunkt ist der Hamilton-Operator des Dice-Gitters ( $\alpha = 1$ ) in der Nähe des  $K$  Punktes

$$H(\mathbf{r}, t) = v_F \mathbf{S} \cdot \mathbf{p} + V(r, t) \mathbb{1}_{3 \times 3}, \quad (3.81)$$

der durch die Wahl des zeitabhängigen Potentials

$$V(r, t) = (V_0 + \tilde{V} \cos(\omega t)) \Theta(r - R) \quad (3.82)$$

mit dem konstanten Anteil  $V_0$ , der Amplitude  $\tilde{V}$  und der Frequenz  $\omega$  definiert ist. Bis auf den Oszillationsanteil ist  $H$  identisch mit dem Hamilton-Operator aus Gl. (3.18). Das Potential  $V(r, t)$

ist in Abb. 3.12 dargestellt und ist in Raumbereich I  $r > R$  und Raumbereich II  $r < R$  eingeteilt. Wir werden nun die Streuung einer ebenen Welle an einer oszillierenden zirkularen Potentialbarriere untersuchen. Dazu leiten wir die Wellenfunktionen in den Raumbereichen her. Die Besonderheit stellt die zeitabhängige Oszillation der Potentialhöhe dar, aufgrund der die Dirac-Weyl Quasiteilchen nun Energie innerhalb der Potentialregion  $r < R$  in ganzzahligen Vielfachen der Oszillationsfrequenz  $E_n^s = E_s + n\omega$  dazugewinnen. Da die Energie nicht erhalten ist, ist die Streuung inelastisch, weshalb die Wellenfunktionen als Superposition aus Zuständen der Energie  $E_n^s$  formuliert werden müssen. Außerhalb des Potentials im Raumbereich I  $r > R$  kann dies aufgrund der Zeitunabhängigkeit direkt mit den vorherigen Berechnungen aus Abschnitt 3.2 durchgeführt werden. Für dieses zeitunabhängige Problem ist die Zeitentwicklung eines Zustands  $|\Psi(t)\rangle$  durch  $|\Psi(t)\rangle = e^{-iEt} |\psi\rangle$  gegeben, weshalb die einlaufende, ebene Welle der Energie  $E$  durch die statische Wellenfunktion aus Gl. (3.36) multipliziert mit der Zeitentwicklung durch

$$\Psi^{\text{inc}}(r, \phi, t) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta_{n,0} i^{m-1} \psi_{m,E_n^s}^{(0)}(r, \phi) e^{-iE_n^s t} \quad (3.83)$$

gegeben ist. Die Wellenfunktion  $\psi_{m,E_n^s}^{(0)}(r, \phi)$  ist in Gl. (3.32) angegeben. Es wird zusätzlich über alle Seitenbänder  $E_n^s$  summiert.

Für die reflektierte Welle ergibt sich mit der entsprechenden Wellenfunktion aus dem statischen Dot aus Gl. (3.37) die Wellenfunktion

$$\Psi^{\text{refl}}(r, \phi, t) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} r_{mn} i^{m-1} \psi_{m,E_n^s}^{(1)}(r, \phi) e^{-iE_n^s t}, \quad (3.84)$$

mit dem Anteil  $\psi_{m,E_n^s}^{(1)}(r, \phi)$  aus Gl. (3.32). Die gesamte Wellenfunktion im Raumbereich I mit  $r > R$  setzt sich aus

$$\Psi^{\text{I}} = \Psi^{\text{inc}} + \Psi^{\text{refl}} \quad (3.85)$$

zusammen. Im Raumbereich II ( $r < R$ ) ist aufgrund des Potentials  $V(r, t)$  der Hamilton-Operator zeitabhängig, die zugehörige Dirac-Weyl Gleichung ergibt

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{\text{II}} = (v_F \mathbf{S} \cdot \mathbf{p} + V_0 + \tilde{V} \cos(\omega t)) \Psi^{\text{II}}. \quad (3.86)$$

Diese partielle Differentialgleichung lässt sich mit einem Separationsansatz  $\Psi^{\text{II}}(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \tilde{\zeta}(t)$  lösen [54]. Das Einsetzen des Ansatzes ergibt

$$i \frac{\dot{\tilde{\zeta}}(t)}{\tilde{\zeta}(t)} - \tilde{V} \cos(\omega t) = v_F \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{p} \psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})} + V_0, \quad (3.87)$$

wobei beide Seiten von verschiedenen Variablen abhängen. Die Gleichung kann nur erfüllt werden, wenn beide Seiten gleich einer Konstante  $c$  sind. Dann entkoppelt die partielle Differentialgleichung in

$$i \frac{\dot{\tilde{\zeta}}(t)}{\tilde{\zeta}(t)} - \tilde{V} \cos(\omega t) = c \quad (3.88)$$

und

$$v_F \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{p} \psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})} + V_0 = c. \quad (3.89)$$

Die Gleichung (3.89) wird als stationäre Pseudospin-1 Dirac-Weyl Gleichung aufgefasst und wir identifizieren  $c = E$ . Der Zeitanteil  $\tilde{\zeta}(t)$  ergibt sich durch Integration der Gl. (3.88) zu

$$\tilde{\zeta}(t) = c_1 e^{-iEt} \cdot e^{-i \frac{\tilde{V}}{\omega} \sin(\omega t)}. \quad (3.90)$$

Da die Gleichung (3.88) dem Hamilton-Operator des statischen Potentials aus der Gl. (3.38) für den Raumbereich II entspricht, wird dadurch der Ortsanteil bestimmt. Damit erhalten wir

$$\Psi^{\text{II}} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} t_{mn} i^{m-1} \psi_{m, E_n^s - V_0}^{(0)}(r, \phi) e^{-i E_n^s t} e^{i \frac{\tilde{V}}{\omega} \sin(\omega t)} \quad (3.91)$$

und formen dies mittels der Jacobi-Anger-Identität aus Gl. (3.35) um zu

$$\Psi^{\text{II}} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{n, p=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} t_{mn} i^{m-1} \psi_{m, E_n^s - V_0}^{(0)}(r, \phi) e^{-i(E_n^s - p\omega)t} (-1)^p J_p \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right). \quad (3.92)$$

Durch den Separationsansatz  $\Psi^{\text{II}} = \psi(r, \phi) \zeta(t)$  war es möglich, die Zeitabhängigkeit  $\zeta(t)$  durch eine Integration zu bestimmen. Der Zustand  $\Psi^{\text{II}}$  kann auch über einen Floquet-Ansatz berechnet werden. Dazu werden die Lösungen der zeitabhängigen Pseudospin-1 Dirac-Weyl Gleichung

$$H |\Psi(t)\rangle = i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle \quad (3.93)$$

gesucht. Da unser Potential periodisch in der Zeit ist,  $V(r, t + T) = V(r, t)$ , kann das Floquet-Theorem [55] angewandt werden, um zeitabhängige Lösungen zu formulieren. Die zeitabhängige Wellenfunktion  $\Psi^{\text{II}}$  ist dann gegeben durch ein Produkt aus einem periodischen Floquet-Zustand  $|\varepsilon(t)\rangle = |\varepsilon(t + T)\rangle$  mit der Periode  $T = 2\pi/\omega$  und einem komplexen Phasenfaktor  $e^{-i\varepsilon t}$  mit der Quasienergie  $\varepsilon$ . Wir schreiben also

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\varepsilon t} |\varepsilon(t)\rangle. \quad (3.94)$$

Der Floquet-Zustand  $|\varepsilon(t)\rangle$  wird nun durch eine Fourier-Reihe mit Koeffizienten  $c_p$  und der Eigenfunktion  $\psi_{m, E_p^s - V_0}^{(0)}$  des statischen Potentials konstruiert. Für die Konstruktion wird der Floquet-Zustand in eine Fourier-Reihe entwickelt

$$|\varepsilon(t)\rangle = \sum_{p=-\infty}^{\infty} c_p |q_p, s_p\rangle e^{-ip\omega t}, \quad (3.95)$$

wobei  $c_p$  den Fourier-Koeffizienten entspricht und  $|q_p, s_p\rangle$  den Zustand in Abwesenheit der Oszillation beschreibt. Um die Quasienergien  $\varepsilon$  und die Koeffizienten  $c_p$  zu bestimmen, wird der Ansatz aus Gl. (3.95) in die zeitabhängige Dirac-Weyl Gleichung (3.93) eingesetzt. Man erhält

$$\sum_p (\varepsilon + p\omega) c_p \delta_{p, p'} = \sum_p E_p^s(q_p) c_p \delta_{p, p'} + c_p \frac{\tilde{V}}{2} (\delta_{p+1, p'} + \delta_{p-1, p'}). \quad (3.96)$$

Dies führt auf die Floquet-Eigenwertgleichung

$$\mathcal{F} \mathbf{c} = \varepsilon \mathbf{c} \quad (3.97)$$

mit dem Vektor  $\mathbf{c}$ , bestehend aus den Fourierkoeffizienten  $c_p$  und der Floquet-Matrix  $\mathcal{F}$ . Wir erhalten für jedes  $p$

$$p\omega c_p = \frac{\tilde{V}}{2} (c_{p-1} + c_{p+1}) \quad (3.98)$$

bzw.

$$\frac{2p\omega}{\tilde{V}} c_p = c_{p-1} + c_{p+1}. \quad (3.99)$$

Diese Rekursionsrelation ist aus der Theorie der Besselfunktionen bekannt [44], sodass wir  $c_p = J_p(\tilde{V}/\omega)$  identifizieren können. Ein Vergleich des erhaltenen Zustands  $|\Psi(t)\rangle$  zeigt, dass der Separationsansatz äquivalent zur Entwicklung des Floquet-Zustands in eine Fourier-Reihe. Dieser Ansatz ist nicht für jedes zeitlich periodische Problem möglich, insbesondere wenn Intervall-Effekte berücksichtigt werden müssen, weshalb die Entwicklung des Floquet-Zustands wesentlich allgemeiner ist.

### 3.3.2. Bestimmung der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten

Wir berechnen die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten  $r_{mn}$  bzw.  $t_{mn}$  mit Hilfe der Stetigkeitsbedingung aus Gl. (3.42) am Rand des Potentials  $r = R$  und den Wellenfunktionen aus den Gl. (3.85) und (3.92). Das Einsetzen der Wellenfunktionen zeigt, dass die zeitabhängigen Phasenfaktoren übereinstimmen, wenn  $E_k = E_n^s + p\omega$  gilt. Wir erhalten mit  $\mathcal{Z}_m^{(0)}(x) = J_{m-1}(x) - J_{m+1}(x)$  und  $\mathcal{Z}_m^{(1)}(x) = H_{m-1}(x) - H_{m+1}(x)$  zwei Gleichungen

$$\delta_{n,0} \mathcal{Z}_m^{(0)}(k_n R) + r_{mn} \mathcal{Z}_m^{(1)}(k_n R) = \sum_p t_{mp} \mathcal{Z}_m^{(0)}(q_p R) e^{i(p-n)\delta} i^{n-p} J_{n-p} \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right) \quad (3.100)$$

und

$$\delta_{n,0} s_n J_m(k_n R) + r_{mn} s_n H_m(k_n R) = \sum_p t_{mp} s'_p J_m(q_p R) (-1)^{n-p} J_{n-p} \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right), \quad (3.101)$$

die zwei Unbekannte  $r_{mn}$  und  $t_{mn}$  enthalten. Durch Multiplikation der Gl. (3.100) mit  $s_n H_m(k_n R)$  und der Gl. (3.101) mit  $\mathcal{Z}_m^{(1)}(k_n R)$  und anschließender Subtraktion der resultierenden Gleichungen wird  $r_{mn}$  eliminiert. Dies führt auf

$$\sum_p t_{mp} (-1)^{n-p} J_{n-p} \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right) \left( \mathcal{Z}_m^{(0)}(q_p R) H_m(k_n R) - s_n s'_p J_m(q_p R) \mathcal{Z}_m^{(1)}(k_n R) \right) = \delta_{n,0} \left( \mathcal{Z}_m^{(0)}(k_n R) H_m(k_n R) - J_m(k_n R) \mathcal{Z}_m^{(1)}(k_n R) \right). \quad (3.102)$$

Für die Reflexionskoeffizienten ergibt dies

$$r_{mn} = \sum_p t_{mp} s'_p (-1)^{n-p} J_{n-p} \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right) \frac{J_m(q_p R)}{s_n H_m(k_n R)} - \delta_{n,0} \frac{J_m(k_n R)}{H_m(k_n R)}. \quad (3.103)$$

Um aus Gl. (3.102) die Transmissionskoeffizienten  $t_{mn}$  zu bestimmen, wird sie in eine Matrixgleichung umgeschrieben. Mit den Ersetzungen

$$f_m^{(n,p)} = \mathcal{Z}_m^{(0)}(q_p R) H_m(k_n R) - s_n s'_p J_m(q_p R) \mathcal{Z}_m^{(1)}(k_n R), \quad (3.104)$$

$$g_m^{(n)} = \mathcal{Z}_m^{(0)}(k_n R) H_m(k_n R) - J_m(k_n R) \mathcal{Z}_m^{(1)}(k_n R) \quad (3.105)$$

und  $J_{n-p}(\tilde{V}/\omega) = J_{n-p}$  kann die Gl. (3.102) als

$$\delta_{n,0} g_m^{(0)} = \sum_p t_{mp} e^{i(p-n)\delta} i^{n-p} J_{n-p} f_m^{(n,p)} \quad (3.106)$$

geschrieben werden. Wird die rechte Seite als unendliche Matrix aufgefasst, erhalten wir

$$M_m \mathbf{t}_m = \mathbf{g}_m, \quad (3.107)$$

wobei  $\mathbf{g}_m = (\dots, 0, g_m^{(0)}, 0, \dots)$ ,  $\mathbf{t}_m = (\dots, t_{m,-1}, t_{m,0}, t_{m,+1}, \dots)$  und

$$M_m = \begin{pmatrix} & & & \vdots & & \\ & & & & & \\ & J_0 f_m^{(-1,-1)} & -ie^{i\delta} J_{-1} f_m^{(-1,0)} & -e^{i2\delta} J_{-2} f_m^{(-1,1)} & & \\ \dots & ie^{-i\delta} J_1 f_m^{(0,-1)} & J_0 f_m^{(0,0)} & -ie^{i\delta} J_{-1} f_m^{(0,1)} & \dots & \\ & -e^{-i2\delta} J_2 f_m^{(1,-1)} & ie^{-i\delta} J_1 f_m^{(1,0)} & J_0 f_m^{(1,1)} & & \\ & & & \vdots & & \end{pmatrix}. \quad (3.108)$$

Die Matrixgleichung (3.107) ist ähnlich zu der in [33]. Das Gleichungssystem kann nur numerisch gelöst werden. Da die Matrix  $M_m$  aber nach Definition von unendlicher Dimension ist, muss eine

Abbruchbedingung definiert werden, um eine Konvergenz der Streukoeffizienten bei endlicher Dimension zu gewährleisten. Das Verhältnis  $\tilde{V}/\omega$  bestimmt im Wesentlichen die Dimension, dies wird am leichtesten durch den Limes  $\tilde{V} \rightarrow 0$  verständlich. Für kleine  $x$  kann die Besselfunktion  $J_n$  nach Gl. (3.73) entwickelt werden, wodurch für  $x \rightarrow 0$  nur  $J_0(0) = 1$ , denn sonst gilt  $J_n(0) = 0$  für  $n \neq 0$ .

Die Matrix  $M_m$  reduziert sich auf

$$M_m = f_m^{(n,p)} \delta_{n,0} \delta_{p,0}, \quad (3.109)$$

weshalb alle  $t_{mn} = r_{mn} = 0$  für  $n \neq 0$  verschwinden. Wir erhalten nach einigen Umformungen

$$r_{m,0} = - \frac{J_m(qR) \mathcal{Z}_m^{(0)}(kR) - ss' \mathcal{Z}_m^{(0)}(qR) J_m(kR)}{J_m(qR) \mathcal{Z}_m^{(1)}(kR) - ss' \mathcal{Z}_m^{(0)}(qR) H_m(kR)}, \quad (3.110)$$

$$t_{m,0} = \frac{H_m(kR) \mathcal{Z}_m^{(0)}(kR) - \mathcal{Z}_m^{(1)}(kR) J_m(kR)}{H_m(kR) \mathcal{Z}_m^{(0)}(qR) - ss' \mathcal{Z}_m^{(1)}(kR) J_m(qR)} \quad (3.111)$$

mit  $q_0 = q$  und  $k_0 = k$ . Da die Koeffizienten aus Gl. (3.48) im Limes  $\tilde{V} \rightarrow 0$  reproduziert werden, entspricht dies dem statischen Grenzfall.

Die Größe  $\tilde{V}/\omega$  gibt uns eine Abschätzung der Matrixdimension von  $M_m$ , da die Anzahl der relevanten Seitenbänder  $n$  für sehr kleine Verhältnisse von  $\tilde{V}/\omega$  sinkt, bis hin zum statischen Fall für  $\tilde{V}/\omega \rightarrow 0$ . Steigt das Verhältnis an, dann werden immer mehr Seitenbänder benötigt, um eine Konvergenz zu erreichen. In der Praxis wird die Dimension der Matrix  $M_m$  sukzessive erhöht, bis die Streukoeffizienten konvergieren.

### 3.3.3. Berechnung der Streugrößen

Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte im Nahfeld erlaubt uns die (zeitlichen) Einfangprozesse in Form von Wirbeln zu beobachten. Wird im statischen Fall ein quasigebundener Zustand angeregt, lässt sich dies unter anderem in der Stromdichte durch Wirbelbildung innerhalb des Potentials erkennen. Um solche quasigebundenen Zustände näher zu charakterisieren, wird die Wahrscheinlichkeitsdichte berechnet.

Die Stromdichte berechnet sich nach

$$\mathbf{j} = \langle \Psi | v_F \mathbf{S} | \Psi \rangle \quad (3.112)$$

und teilt sich, entsprechend der zwei Raumbereiche, in

$$\mathbf{j}^I = \langle \Psi^I | v_F \mathbf{S} | \Psi^I \rangle \quad \text{falls } r > R \quad \text{und in} \quad \mathbf{j}^{II} = \langle \Psi^{II} | v_F \mathbf{S} | \Psi^{II} \rangle \quad \text{falls } r < R \quad (3.113)$$

auf die separat mit den entsprechenden Wellenfunktionen berechnet werden müssen.

Im Raumbereich I für  $r > R$  teilt sich die  $x$ -Komponente in

$$j_x^I = j_x^{\text{inc}} + j_x^{\text{refl}} + j_x^{\text{int}} \quad (3.114)$$

auf, bestehend aus dem einlaufenden Anteil und dem Reflexions- bzw. Interferenzanteil. Da für die einlaufende Welle eine ebene, auf das Einheitsgebiet normierte Welle gewählt wurde, die in  $x$ -Richtung propagiert, erhalten wir

$$j_x^{\text{inc}} = v_F (\Psi^{\text{inc}})^\dagger S_x \Psi^{\text{inc}} = v_F, \quad (3.115)$$

während sich für die anderen Anteile

$$j_x^{\text{refl}} = v_F (\Psi^{\text{refl}})^\dagger S_x \Psi^{\text{refl}}, \quad j_x^{\text{int}} = 2 \mathcal{R}e \{ (\Psi^{\text{inc}})^\dagger S_x \Psi^{\text{refl}} \} \quad (3.116)$$

ergeben. Das Einsetzen der jeweiligen Wellenfunktionen aus Gl. (3.83) und (3.84) resultiert in

$$j_x^{\text{refl}} = \frac{v_F}{4} \sum_{\substack{m,n \\ l,p}} i^{m-l+1} r_{lp}^* r_{mn} e^{i(m-l)\phi} \cdot e^{i(p-n)\omega t} \cdot \left[ s_n H_m(k_n r) \left( H_{l-1}^*(k_p r) e^{i\phi} - H_{l+1}^*(k_p r) e^{-i\phi} \right) \right. \\ \left. - s_p H_l^*(k_p r) \left( H_{m-1}(k_n r) e^{-i\phi} - H_{m+1}(k_n r) e^{i\phi} \right) \right] \quad (3.117)$$

und

$$j_x^{\text{int}} = \frac{v_F}{2} \mathcal{R}e \left\{ e^{-ikr \cos \phi} \sum_{m,n} i^{m-1} r_{mn} \cdot e^{-in\omega t} \cdot e^{im\phi} \right. \quad (3.118)$$

$$\left. \times \left[ i 2 s_n H_m(k_n r) + s \left( H_{m-1}(k_n r) e^{-i\phi} + H_{m+1}(k_n r) e^{i\phi} \right) \right] \right\}. \quad (3.119)$$

In  $y$ -Richtung besteht die Stromdichte

$$j_y^{\text{I}} = j_y^{\text{refl}} + j_y^{\text{int}} \quad (3.120)$$

aus der Summe des Reflexions- und Interferenzanteils, da der Strom in  $y$ -Richtung für die einlaufende Welle nach Annahme verschwindet.

Man erhält nach Einsetzen der jeweiligen Wellenfunktion aus Gl. (3.83) und (3.84) für die beiden Anteile

$$j_y^{\text{refl}} = v_F (\Psi^{\text{refl}})^\dagger S_y \Psi^{\text{refl}} = \frac{v_F}{4} \sum_{\substack{m,n \\ l,p}} i^{m-l} r_{lp}^* r_{mn} e^{i(m-l)\phi} \cdot e^{i(p-n)\omega t} \\ \times \left[ s_n H_m(k_n r) \left( H_{l-1}^*(k_p r) e^{i\phi} + H_{l+1}^*(k_p r) e^{-i\phi} \right) \right. \\ \left. + s_p H_l^*(k_p r) \left( H_{m-1}(k_n r) e^{-i\phi} + H_{m+1}(k_n r) e^{i\phi} \right) \right] \quad (3.121)$$

und

$$j_y^{\text{int}} = 2 \mathcal{R}e \left\{ (\Psi^{\text{inc}})^\dagger S_y \Psi^{\text{refl}} \right\} = \frac{v_F}{2} e^{-ikr \cos \phi} \mathcal{R}e \left\{ \sum_{m,n} i^m r_{mn} \cdot e^{-in\omega t} \cdot e^{im\phi} \right. \\ \left. \times \left[ s \left( H_{m-1}(k_n r) e^{-i\phi} + H_{m+1}(k_n r) e^{i\phi} \right) \right] \right\}. \quad (3.122)$$

Im Raumbereich II erhalten wir für die Stromdichte in  $x$ -Richtung

$$j_x^{\text{II}} = v_F (\Psi^{\text{trans}})^\dagger S_x \Psi^{\text{trans}}, \quad (3.123)$$

woraus sich mittels Gl. (3.92)

$$j_x^{\text{II}} = \frac{v_F}{4} \sum_{\substack{m,n \\ l,p}} i^{m-l+1} t_{lp}^* t_{mn} e^{i(m-l)\phi} \cdot e^{i(p-n)\omega t} \cdot \left[ s'_n J_m(q_n r) \left( J_{l-1}(q_p r) e^{i\phi} - J_{l+1}(q_p r) e^{-i\phi} \right) \right. \\ \left. - s'_p J_l(q_p r) \left( J_{m-1}(q_n r) e^{-i\phi} - \phi J_{m+1}(q_n r) e^{i\phi} \right) \right] \quad (3.124)$$

ergibt. Die Stromdichte  $y$ -Richtung berechnet sich dann aus

$$j_y^{\text{II}} = v_F (\Psi^{\text{trans}})^\dagger S_y \Psi^{\text{trans}} \quad (3.125)$$

und ergibt unter erneuter Ausnutzung von Gl. (3.92)

$$j_y^{\text{II}} = \frac{v_F}{4} \sum_{\substack{m,n \\ l,p}} i^{m-l} t_{lp}^* t_{mn} e^{i(m-l)\phi} \cdot e^{i(p-n)\omega t} \cdot \left[ s'_n J_m(q_n r) \left( J_{l-1}(q_p r) e^{i\phi} + J_{l+1}(q_p r) e^{-i\phi} \right) \right. \\ \left. + s'_p J_l(q_p r) \left( J_{m-1}(q_n r) e^{-i\phi} + J_{m+1}(q_n r) e^{i\phi} \right) \right]. \quad (3.126)$$

Nach Zeitmittelung reduziert sich jede zeitabhängige Gleichung auf die zugehörige zeitunabhängige Streugröße der statischen Barriere (vgl. Abschnitt 3.2). Zur vollständigen Darstellung wird die zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho = \Psi^\dagger \Psi$  angegeben. Diese berechnet sich wieder aus den Anteilen

$$\rho^I = \rho^{\text{inc}} + \rho^{\text{refl}} + \rho^{\text{int}} \quad \text{und} \quad \rho^{II} = \rho^{\text{trans}} \quad (3.127)$$

der jeweiligen Raumbereiche. Aufgrund der Normierung von  $\Psi^I$  gilt  $\rho_{\text{inc}} = 1$ , die übrigen Anteile berechnen sich durch Einsetzen der Gl. (3.83), (3.84) und (3.92) zu

$$\begin{aligned} \rho^{\text{refl}} &= \frac{1}{4} \sum_{\substack{m,n \\ l,p}} r_{mn} r_{lp}^* \cdot i^{m-l} e^{i(m-l)\phi} e^{i(p-n)\omega t} \\ &\times \left[ 2H_l^*(k_p r) H_m(k_n r) + H_{l-1}^*(k_p r) H_{m-1}(k_n r) + H_{l+1}^*(k_p r) H_{m+1}(k_n r) \right], \\ \rho^{\text{int}} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{m,n \\ l}} \text{Re} \left\{ i^{m-l} r_{mn} e^{in\omega t} \left[ 2J_l^*(kr) H_m(k_n r) + J_{l-1}^*(kr) H_{m-1}(k_n r) + J_{l+1}^*(kr) H_{m+1}(k_n r) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.128)$$

und

$$\begin{aligned} \rho^{\text{trans}} &= \frac{1}{4} \sum_{\substack{m,n \\ l,p}} t_{mn} t_{lp}^* \cdot i^{m-l} e^{i(m-l)\phi} e^{i(p-n)\omega t} \\ &\times \left[ 2J_l^*(q_p r) J_m(q_n r) + J_{l-1}^*(q_p r) J_{m-1}(q_n r) + J_{l+1}^*(q_p r) J_{m+1}(q_n r) \right]. \end{aligned} \quad (3.129)$$

In der Analyse der Streueigenschaften der zirkularen Barriere hat die Streueffizienz und die radiale Stromdichte im Fernfeld eine entscheidende Rolle gespielt (siehe Abschnitt 3.2.2), weshalb wir nun die zugehörigen dynamischen und zeitgemittelten Größen berechnen. Für die reflektierte, radiale Stromdichte ergibt sich

$$j_r^{\text{refl}} = (\Psi^{\text{refl}})^\dagger \mathbf{S} \cdot \mathbf{e}_r \Psi^{\text{refl}} \quad (3.130)$$

mit

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{e}_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi} & 0 \\ e^{i\phi} & 0 & e^{-i\phi} \\ 0 & e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.131)$$

Um Gl. (3.130) in Fernfeldnäherung zu berechnen, wird unter Verwendung der Entwicklung aus Gl. (3.52) die Wellenfunktion aus Gl. (3.84) in 1. Ordnung für  $r \rightarrow \infty$  entwickelt. Wir erhalten

$$\Psi^{\text{refl}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi r}} \sum_{m,n} \frac{r_{mn}}{k_n} (1 - is_n) e^{i\frac{\pi}{2}(m-1)(1-s_n)} \begin{pmatrix} e^{i(m-1)\phi} \\ \sqrt{2} e^{im\phi} \\ e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} \cdot e^{iE_n^s(r-t)}. \quad (3.132)$$

Einsetzen der Gl. (3.132) in Gl. (3.130) führt auf

$$j_r^{\text{refl}} = \frac{2}{\pi r} \sum_{\substack{n,m \\ p,l}} \frac{r_{mn} r_{lp}^*}{\sqrt{k_n k_p}} (1 - is_n)(1 + is_p) e^{i\frac{\pi}{2}(m-1)(1-s_n)} \cdot e^{i\frac{\pi}{2}(1-l)(1-s_p)} e^{i(m-l)\phi} e^{i(E_n^s - E_p)(r-t)}. \quad (3.133)$$

Durch die Ersetzung

$$a_n(\phi) = \sum_m r_{mn} e^{i\frac{\pi}{2}(m-1)(1-s_n)} e^{im\phi} \quad (3.134)$$



kann die Gleichung (3.133) umgeschrieben werden zu

$$j_r^{\text{refl}} = \frac{2}{\pi r} \left[ \sum_n \frac{|a_n(\phi)|^2}{k_n} + \mathcal{R}e \left\{ \sum_{\substack{n>p \\ n \neq p}} \frac{a_n(\phi)a_p^*(\phi)}{\sqrt{k_n k_p}} (1 - is_n)(1 + is_p) e^{i(n-p)\omega(r-t)} \right\} \right] \quad (3.135)$$

Dieser Ausdruck besteht aus einem zeitunabhängigen und zeitabhängigen Teil. Setzt man die Terme für  $a_n(\phi)$  aus Gl. (3.134) ein und formt die Summen um, erhält man letztendlich für die zeitabhängige, reflektierte, fernfeldgenäherte Stromdichte

$$\begin{aligned} j_r^{\text{refl}}(r, \phi, t) = & \frac{2}{\pi r} \left[ \sum_n \left\{ \sum_m \frac{|r_{mn}|^2}{k_n} + \mathcal{R}e \sum_{\substack{m>l \\ m \neq l}} \frac{r_{mn} r_{ln}^*}{k_n} \cdot e^{i\frac{\pi}{2}(1-s_n)(m-l)} \cdot e^{i(m-l)\phi} \right\} \right. \\ & + \mathcal{R}e \left\{ \sum_{\substack{n>p \\ n \neq p}} \frac{(1 - is_n)(1 + is_p)}{\sqrt{k_n k_p}} \cdot e^{i(n-p)\omega(r-t)} \right. \\ & \left. \left. \times \left( \sum_m r_{mn} r_{mp}^* \cdot e^{i\frac{\pi}{2}(m-1)(s_p-s_n)} + 2 \sum_{\substack{m>l \\ m \neq l}} r_{mn} r_{lp}^* \cdot e^{i\frac{\pi}{2}(m-1)(1-s_n)} \cdot e^{-i\frac{\pi}{2}(l-1)(1-s_p)} e^{i(m-l)\phi} \right) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (3.136)$$

Anhand der Gl. (3.136) werden wir im Abschnitt 3.3.4 die Winkel- und Zeitabhängigkeit analysieren und untersuchen, welche Rolle die Seitenbänder spielen. Aus dieser Formel lassen sich leicht die zeitgemittelte reflektierte Stromdichte und die zeitabhängige- bzw. gemittelte Streueffizienz berechnen.

Aus Gl. (3.136) und unter der Verwendung der Relation

$$\frac{1}{T} \int_t^{t+T} e^{i(n-p)\omega t'} dt' = \delta_{np} \quad (3.137)$$

ergibt sich die zeitgemittelte, reflektierte Stromdichte

$$\overline{j_r^{\text{refl}}}(r, \phi) = \frac{2}{\pi r} \sum_n \left\{ \sum_m \frac{|r_{mn}|^2}{k_n} + \mathcal{R}e \sum_{\substack{m>l \\ m \neq l}} \frac{r_{mn} r_{ln}^*}{k_n} \cdot e^{i\frac{\pi}{2}(1-s_n)(m-l)} e^{i(m-l)\phi} \right\}. \quad (3.138)$$

Die Gleichung ist äquivalent zur Gl. (3.54) für die zeitunabhängige, reflektierte Stromdichte.

### 3.3.3.1. Streueffizienz

Die Definition der Streueffizienz nach Gl. (3.49) ist weiterhin gültig. Wir müssen noch den totalen Streuquerschnitt

$$\sigma = \frac{I^{\text{refl}}}{I^{\text{ein}}/A} \quad (3.139)$$

berechnen, der durch das Verhältnis des reflektierten Wahrscheinlichkeitsstroms  $I^{\text{refl}}$  zum gesamten, einfallenden Strom  $I^{\text{ein}}$  pro Einheitsfläche  $A$  definiert ist. Der einfallende Strom pro Einheitsfläche ist nach Ansatz  $I^{\text{ein}}/A = v_F$ , sodass der reflektierte Strom mit

$$I^{\text{refl}} = \oint_S \mathbf{j}^{\text{refl}} \cdot d\mathbf{s} = \int_0^{2\pi} j_r^{\text{refl}} \cdot r d\phi \quad (3.140)$$

berechnet wird. Unter Verwendung der Relation (3.137) und der Gl. (3.136) für den Ausdruck der fernfeldgenährten, zeitabhängigen, reflektierten Wahrscheinlichkeitsstromdichte erhält man die zeitabhängige Streueffizienz

$$Q = \frac{2}{R} \sum_m \left\{ \sum_n \frac{|r_{mn}|^2}{k_n} + \operatorname{Re} \sum_{\substack{n>p \\ n \neq p}} \frac{(1 - is_n)(1 + is_p)}{\sqrt{k_n k_p}} \cdot r_{mn} r_{mp}^* \cdot e^{i\frac{\pi}{2}(m-1)(s_p - s_n)} e^{i(n-p)\omega(r-t)} \right\}. \quad (3.141)$$

Wir erhalten die zeitgemittelte Streueffizienz

$$\bar{Q} = \frac{2}{R} \sum_{m,n} \frac{|r_{mn}|^2}{k_n} \quad (3.142)$$

durch Zeitmittelung aus Gl. (3.137). Da die zeitgemittelte Streueffizienz bis auf die  $n$  Summation identisch mit der zugehörigen Gl. (3.56) des statischen Potentials ist, werden wir erneut das Streuverhalten durch die Streueffizienz charakterisieren.

### 3.3.4. Streuverhalten und Abstrahlcharakteristik

Im Abschnitt 3.2.2 wurden die beiden einheitenlosen Parameter  $kR$  und  $V_0R$  zur Charakterisierung der Streueigenschaften des statischen Potentials aus der Energie der einfallenden Welle  $E$ , der Potentialhöhe  $V_0$  und des Radius  $R$  hergeleitet. Über das Verhältnis  $E/V_0$  lassen sich sogar direkt Vorhersagen über das Streuverhalten angeben, wogegen  $kR$  ein Maß für die Partialwellenzahl angab. Nun betrachten wir eine oszillierende zirkulare Potentialbarriere mit Radius  $R$ , welches neben dem konstanten Anteil  $V_0$  zusätzlich durch die Amplitude  $\tilde{V}$  und Frequenz  $\omega$  beschrieben wird, an dem eine ebene Welle der Energie  $E$  streut. Welche charakteristischen Größen können nun für Vorhersagen über das Streuverhalten genutzt werden?

Zunächst beobachten wir, dass die Parameter  $[E, V_0, \tilde{V}, \omega, R^{-1}] \rightarrow \gamma[E, V_0, \tilde{V}, \omega, R^{-1}]$  mit  $\gamma \in \mathbb{R}$  invariant unter Skalierung sind. Der Parameterraum kann eingegrenzt werden, indem z.B. die Frequenz festgelegt wird. Wir wählen  $\omega = 1$ . Die skalierten Parameter sind dimensionslos und stehen zu den unskalierten (gekennzeichnet durch „ $\hat{\cdot}$ “) mittels  $E = \hat{E}/\omega$ ,  $V_0 = \hat{V}_0/\omega$ ,  $\tilde{V} = \hat{\tilde{V}}/\omega$  und  $R = \hat{R}\omega$  in Relation ( $\gamma = 1/\omega$ ). Die fortan angegebenen Größen entsprechen stets den reskalierten Parametern.

Das oszillierende Potential bewirkt inelastische Streuung durch Anregung der Seitenbänder  $E_n^s$ , weshalb neben der Partialwellenzahl  $m$  auch die Quantenzahl des Seitenbandes  $n$  relevant ist. Wie viele Seitenbänder maßgeblich am Streuproblem teilnehmen, kann durch die Diskussion des statischen Grenzfalls für  $\tilde{V}/\omega \rightarrow 0$  verstanden werden. Der Grenzfall reproduziert die Resultate des statischen Potentials, da nur  $n = 0$  am Streuproblem teilnimmt und die erhaltenden Reflexions- und Transmissionskoeffizienten den statischen Koeffizienten entsprechen. Mit steigendem  $\tilde{V}/\omega$  wächst auch die Zahl der Seitenbänder an. Die Streuregime sind dann auch nicht mehr durch  $kR$  und  $V_0R$  bzw.  $E/V_0$  und  $V_0R$  bestimmt, sondern durch  $k_n R$  und  $V_0R$  bzw.  $E_n/V_0$  und  $V_0R$ . Die Streueigenschaften eines Seitenbandes  $n$  sind durch das Regimediagramm des statischen Potentials aus Abb. 3.4 mit den Größen  $k_n R$  und  $V_0R$  bestimmt. Diese Beschreibung wurde in [34] eingeführt. In der Abb. 3.13 ist die zeitgemittelte Streueffizienz nach Gl. (3.142) in Abhängigkeit von  $V_0R$  und der Amplitude  $\tilde{V}$  für  $E/V_0 = 0.1$  dargestellt. Die Parameter sind identisch mit denen des statischen Potentials aus Abb. 3.5 (b) bzw. zu [33] Fig. 4. Für  $\tilde{V} \rightarrow 0$  wird die Resonanzstruktur des statischen Potentials aus Abb. 3.5 (b) reproduziert (bis auf die  $m = 3$  Resonanz aufgrund der Auflösung). Mit steigender Oszillationsamplitude werden Resonanzen höherer Energie mit  $n \neq 0$  angeregt, wodurch die Superposition und Wechselwirkung von allen Seitenbandanregungen dazu führt, dass die Resonanzstruktur verwäscht und keinerlei scharfe Resonanzen mehr zu beobachten sind. Dies hängt mit den gewählten Parametern zusammen, die die Streuregime der Seitenbänder bestimmen. Dazu betrachten wir das Verhältnis  $E_n/V_0 = 0.1 + n$ , welches für alle  $n$  außerhalb des

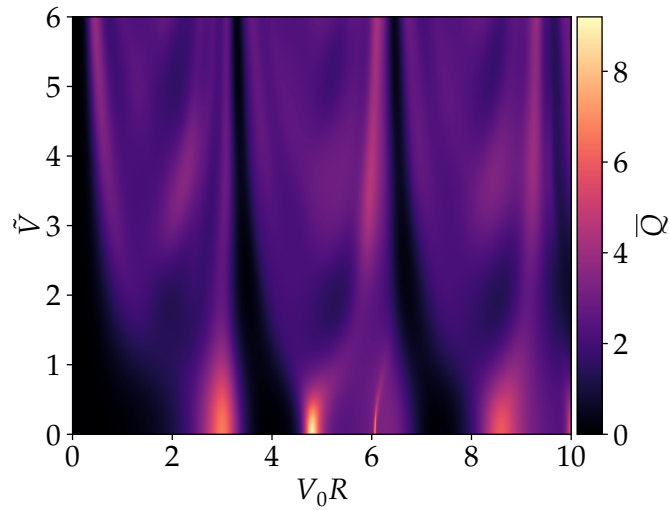


Abbildung 3.13.: Zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}$  in Abhängigkeit von  $V_0 R$  und der Oszillationsamplitude  $\tilde{V}$  bei einer relativen Einfallsenergie  $E/V_0 = 0.1$  und Potentialhöhe  $V_0 = 1$ .

resonanten Streuregimes (i) liegt. Mit steigendem  $\tilde{V}$  müssen immer mehr Seitenbänder  $E_n$  mit  $n \neq 0$  berücksichtigt werden, die alle durch das Regime des starken Reflektors (ii) oder des schwachen Reflektors (iv) (siehe Abb. 3.4) beschrieben werden. Durch diese komplexen Anregungen und damit verbundenen Wechselwirkungen wird die Resonanzstruktur des statischen Grenzfalles zerstört. Die zeitgemittelte Streueffizienz weist eine periodische Struktur für große  $\tilde{V}$  auf, die durch Fabry-Pérot Resonanzen entsteht. Der Abstand zweier aufeinander folgender Minimalstellen der Streueffizienz bei  $\tilde{V} = 6$  beträgt  $\Delta V_0 R = \pi$ .

Wir betrachten nun die Abhängigkeit der Streueigenschaften bei einem konstanten Verhältnis  $E/V_0$  in Abhängigkeit von  $V_0$ . Die Wahl eines konstanten  $E/V_0$  Verhältnisses bewirkt, dass aufgrund von  $\omega = 1$  auch  $E_n/V_0 = E/V_0 + n/V_0$ , dann gilt für  $V_0 \rightarrow \infty$  der Übergang  $E_n/V_0 \rightarrow E/V_0$ , sodass die Streueigenschaften dem des statischen Potentials entsprechen. Die statische Potentialhöhe fungiert also als eine inverse Frequenz. Um zu zeigen, wie  $V_0$  die Streueigenschaften maßgeblich beeinflusst, betrachten wir die Abhängigkeit der Streueffizienz von  $V_0 R$  und  $\tilde{V}$  bei  $V_0 = 16$  in Abb. 3.14 (i). Für  $\tilde{V} \rightarrow 0$  sind erneut die Resonanzen des statischen Potentials aus Abb. 3.5 (b) zu erkennen. Bei anwachsender Oszillationsamplitude bleiben zunächst die statischen Resonanzen bestehen, während zusätzliche Resonanzen entstehen, die sich nicht den statischen Resonanzen zuordnen lassen. Steigt die Oszillationsamplitude noch weiter an, dann tritt wieder das Phänomen der Überlagerung und Wechselwirkung vieler Seitenbänder auf, das die Resonanzstruktur zerstört. Um Unterschiede zum statischen Fall zu charakterisieren, ist in Abb. 3.14 (ii) die statische (rot) bzw. zeitgemittelte Streueffizienz (schwarz) für die Parameter aus (a) und einer Oszillationsamplitude von  $\tilde{V} = 2$  dargestellt. Der direkte Vergleich zeigt, dass durch die Oszillation zwar quantitative Unterschiede auftreten, aber einige Resonanzen des statischen Potentials bestehen bleiben. Insbesondere sind weitere, scharfe Resonanzen durch die inelastische Streuung entstanden, deren Mechanismus anhand zweier Beispiele deutlich wird: Betrachten wir die Resonanzen (b) und (c) zwischen der statischen  $m = 0$  Resonanz bei  $V_0 R \sim 3$  und der statischen  $m = 1$  Resonanz bei  $V_0 R \sim 4.8$  (siehe Abb. 3.10), dann können diese durch die Resonanzbedingung aus Gl. (3.76) (mit  $k_n R$  statt  $kR$ ) für  $m = 1$  mit der Anregung der Seitenbändern  $n = -1$  und  $n = -2$  identifiziert werden. Die komplexe Resonanzstruktur ist also im Wesentlichen durch eine resonante Anregung der Seitenbänder  $E_n$  mit verschiedenen  $m$  zu verstehen, die sich aufgrund von  $E_n/V_0 \approx E/V_0$  im resonanten Streuregime befinden. Dieses Argument wird durch die Abb. 3.15, in der die zeitgemittelte Streueffizienz in Abhängigkeit von  $V_0 R$  und  $V_0$  bei einer Oszillationsamplitude  $\tilde{V} = 2$  dargestellt ist, unterstützt. Die Resonanzen (b) und (c) konvergieren für  $V_0 \rightarrow \infty$  gegen die statische  $m = 1$  Resonanz bei  $V_0 R \sim 4.8$ .

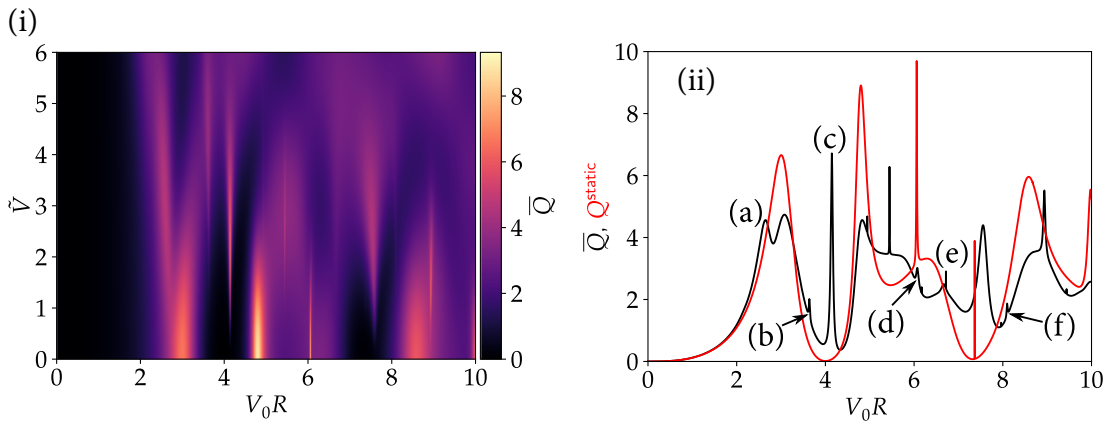


Abbildung 3.14.: (i) Zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}$  in Abhängigkeit von  $V_0R$  und der Oszillationsamplitude  $\tilde{V}$  für  $E/V_0 = 0.1$  und  $V_0 = 16$ . (ii) Zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}$  (schwarz) in Abhängigkeit von  $V_0R$  für  $\tilde{V} = 2$ ,  $E/V_0 = 0.1$  und  $V_0 = 16$ . Statische Streueffizienz (rot) für identische Parameter ohne Oszillation  $\tilde{V} = 0$ .

Allgemein kann die dargestellte Streueffizienz in dieser Abbildung verstanden werden, wenn wir ausgehend von  $V_0 = 100$  die übrigen Resonanzen analysieren. Zunächst treten Resonanzen des statischen Potentials aus Abb. 3.5 (b) auf, die für alle  $V_0 > 10$  bestehen bleiben. Dies ist zu erwarten, da für große  $V_0$  alle Seitenbänder äquivalent sind. Die verschiedenen statischen Resonanzen spalten sich ab einem gewissen  $V_0$  auf und laufen für kleine  $V_0$  auseinander. Wie an den Beispielen (b) und (c) deutlich wurde, entstehen diese Resonanzen aus resonant angeregten Seitenbändern  $E_n$ . Die Anzahl und Stärke dieser Seitenbandresonanzen hängt stark von der Oszillationsamplitude ab, speziell bei der gewählten Amplitude  $\tilde{V} = 2$  sind hauptsächlich Resonanzen der Seitenbänder  $n \in \{-2, \dots, 2\}$  zu beobachten. Durch die Variation von  $V_0$  kann also die Resonanzposition  $V_0R$  der Seitenbänder verändert werden, sodass wir die Interferenz von verschiedenen Partialwellen und Seitenbändern steuern können.

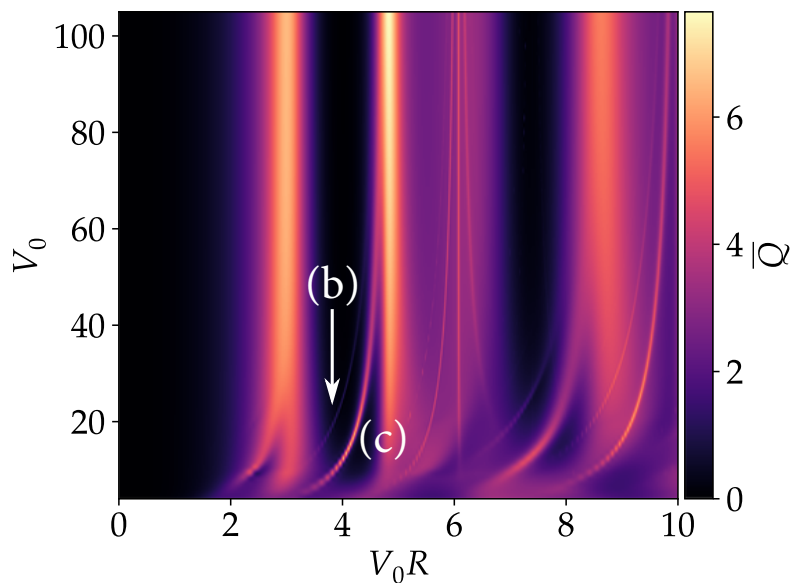


Abbildung 3.15.: Zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}$  in Abhängigkeit von  $V_0R$  und  $V_0$  für  $E/V_0 = 0.1$  und  $\tilde{V} = 2$  mit den markierten Resonanzen (b) und (c) aus Abb. 3.14 (ii).

## 3.3.4.1. Winkelabhängigkeit der radialen Stromdichte im Fernfeld

Die radiale Stromdichte  $j_r^{\text{refl}}$  in der Fernfeldnäherung nach Gl. (3.136) ist eine wichtige Größe zur Analyse des Streuverhaltens. Insbesondere die Frage, wie das Streuverhalten gezielt mit Hilfe der Parameter des Potentials gesteuert werden kann, ist aus der Anwendungsperspektive von hohem Interesse. Die Gleichung (3.136) besteht aus einer Fourierreihe im Winkel, einer Fourierreihe in der Zeit  $r-t$  und einer Kopplung zwischen den beiden Größen. Die Fourierreihe im Winkel setzt sich aus der zeitgemittelten Stromdichte aus Gl. (3.138) bzw. der statischen Größe aus Gl. (3.54) zusammen. Die Zeitabhängigkeit kann mit der Streueffizienz aus Gl. (3.141) identifiziert werden. Die Kopplungsstärke der beiden Größen ist durch  $r_{mn}r_{lp}^*$  gegeben und beschreibt damit die Wechselwirkung von verschiedenen Partialwellen unterschiedlicher Seitenbänder. Um also eine komplexe Winkel- und Zeitabhängigkeit zu konstruieren, muss die Kopplung maximiert werden. Die Abb. 3.16 stellt die reflektierte Stromdichte  $r \cdot j_r^{\text{refl}}$  in Abhängigkeit des Winkels  $\phi$  und der Zeit  $r-t$  nach Gl. (3.136) für die Resonanzen (a)  $V_0R \sim 2.65$ , (b)  $V_0R \sim 3.64$ , (c)  $V_0R \sim 4.14$ , (d)  $V_0R \sim 6.07$  (e)  $V_0R \sim 6.72$  und (f)  $V_0 \sim 8.1$  der Streueffizienz aus Abb. 3.14 (ii) dar. Da wir uns wie im Abschnitt 3.2.3 für die Winkelabhängigkeit interessieren, wird das  $1/r$  Verhalten durch die Multiplikation von  $j_r^{\text{refl}}$  mit  $r$  vernachlässigt. Die Darstellungen (a)-(f) dienen zur Veranschaulichung der möglichen Winkelabhängigkeiten, dabei wurden hier nicht zu jeder angeregten Resonanz eine Abbildung angegeben. Die Abbildung (a) zeigt die isotrope Streuung aus Abschnitt 3.2.3, die nun durch die Oszillation mit Frequenz  $\omega = 1$  bzw. der Periode  $T = 2\pi$  angeregt wird. Die Abbildung (c) entspricht der periodischen Anregung einer  $m = 1$  Mode (vgl. Abb. 3.11 (b)). Die restlichen Winkelabhängigkeiten lassen sich nicht ohne weiteres spezifischen Resonanzen zuordnen. Die Abbildung (b) muss besonders hervorgehoben werden, da sich hier die Vorwärts- und Rückwärtsstreuung perfekt alterniert. Unterstrichen wird dies von den Polardarstellungen in Abb. 3.20, in denen für ausgewählte Zeiten zu den Parametern aus der Abb. 3.16 (b) die radiale Stromdichte winkelaufgelöst dargestellt ist. Es sind äußerst ausgeprägte, sich zeitlich abwechselnde Streurichtungen zu beobachten. In Graphen ist dies aufgrund der verbotenen Rückwärtsstreuung unmöglich [32].

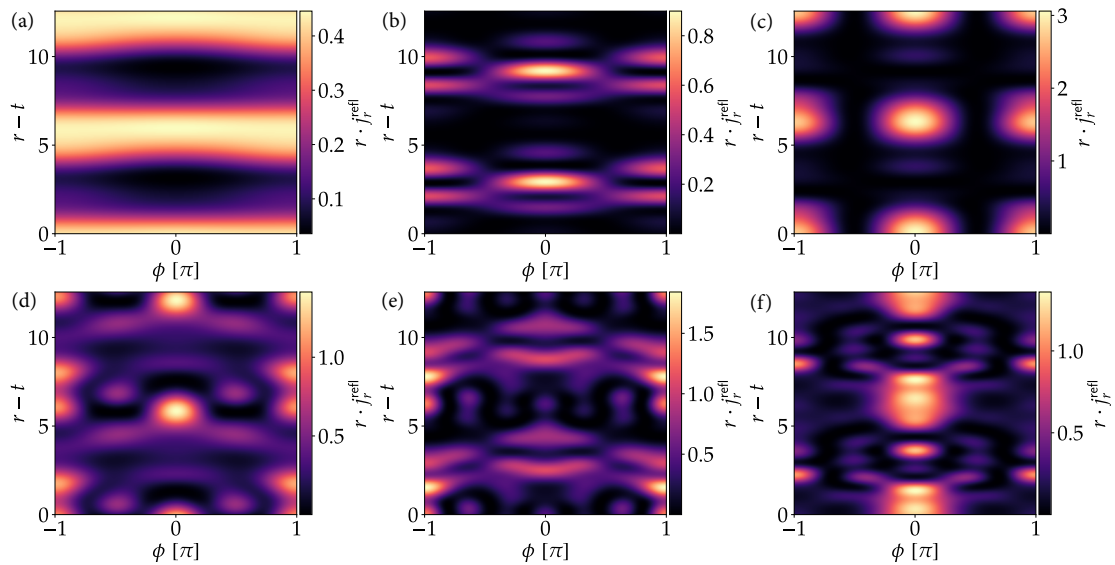


Abbildung 3.16.: Fernfeldgenäherte Stromdichte  $r \cdot j_r^{\text{refl}}$  für (a)  $V_0R = 2.65$ , (b)  $V_0R = 3.6373$ , (c)  $V_0R = 4.144$ , (d)  $V_0R = 6.07$ , (e)  $V_0R = 6.717$  und (f)  $V_0R = 8.097$  für die Resonanzen und Parameter aus Abb. 3.14 (ii) in Abhängigkeit der Zeit  $r-t$  und des Winkels  $\phi$ .

Im vorherigen Abschnitt konnten die Resonanzen (b) und (c) der zeitgemittelten Streueffizienz aus Abb. 3.14 (ii) durch die resonante Anregung der  $m = 1$  Mode der Seitenbänder  $n = -2$  (b) bzw.  $n = -1$  (c) erklärt werden. Trotz des gleichen Ursprungs der Resonanzen ist die Winkelabhängigkeit der radialen Stromdichte im Fernfeld völlig unterschiedlich (siehe Abb. 3.16 (b) und (c)). Um dies

zu erläutern, ist in Abb. 3.17 das Betragsquadrat der Reflexionskoeffizienten  $|r_{m,n}|^2$  nach Gl. (3.103) des  $m = 0$  und  $m = 1$  Anteils (andere  $m$  vernachlässigbar) für die Seitenbänder  $n = -2, \dots, +2$  um die Resonanz (b) und die Resonanz (c) dargestellt. Das Betragsquadrat wurde für  $m = 1$  in Abb. 3.17 (i) zur Visualisierung um einen Faktor 20 gestreckt. Während  $|r_{m=1,n}|^2$  Resonanzen für  $n = -1$  asymmetrische Resonanzen aufweist (siehe Abb. 3.17 (i)), ist die  $m = 0$  Mode nur als Hintergrund angeregt. Die Winkel- und Zeitabhängigkeit der (b) Resonanz entsteht durch ein geschicktes Zusammenspiel aus der  $m = 0$  und  $m = 1$  Mode, die durch ihre Kopplung  $r_{mn}r_{lp}^*$  entsteht. Die Streueffizienz aus Abb. 3.14 (ii) weist trotz des geringen Beitrags von  $|r_{m=1,n}|^2$  eine Resonanz (b) auf, da der in die Berechnung nach Gl. (3.142) eingehende Faktor  $k_n^{-1}$  für  $n < 0$  groß ist. In der Abb. 3.17 (ii) dominiert das Betragsquadrat von  $r_{m=1,n}$  stark während  $r_{m=0,n}$  nur als sehr schwacher Hintergrund angeregt ist. Aus diesem Grund ist die Winkelabhängigkeit in Abb. 3.16 (c) stark von der Winkelabhängigkeit der  $m = 1$  Mode dominiert (siehe Abb. 3.11 (b)).

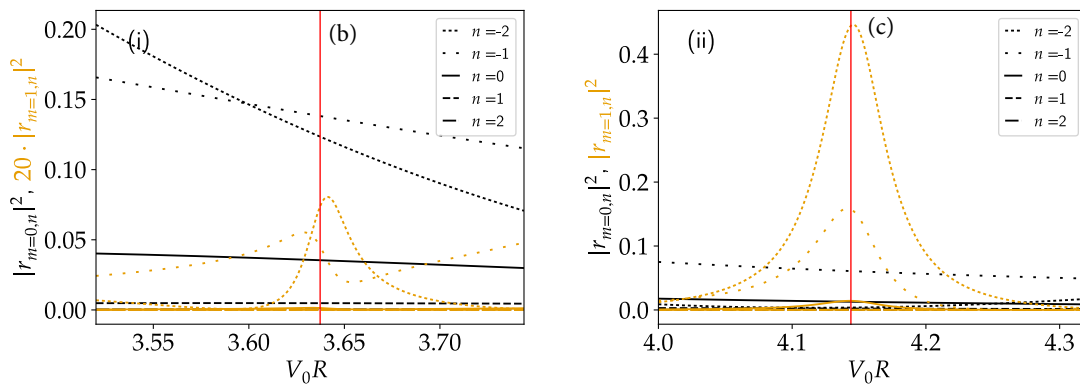


Abbildung 3.17.: Betragsquadrat der Reflexionskoeffizienten  $|r_{m,n}|^2$  in Abhängigkeit von  $V_0 R$  um (i) die Resonanz aus (b) und (ii) die Resonanz aus (c) der Abb. 3.14 (ii) mit identischen Parametern.

Nun analysieren wir die Stabilität der Winkelabhängigkeit von Abb. 3.16 (b) für verschiedene Oszillationsamplituden. Dazu ist in Abb. 3.18 (a)-(d) für  $\tilde{V} = 1, 3, 4, 5$  die radiale Stromdichte  $r \cdot j_r^{\text{refl}}$  für die selben Parameter wie in Abb. 3.16 (b) dargestellt. Die Winkelabhängigkeit bleibt für einen weiten Bereich von Oszillationsamplituden stabil, bis auf  $\tilde{V} = 1$ . Dies liegt daran, dass erst ab einer gewissen Amplitude die nötigen Seitenbänder angeregt worden sind. Für verschiedene Amplituden ist ein genereller Anstieg der Stromdichte zu beobachten (vgl. Farbskalen der Teilabbildungen).

R. Heinisch, et. al. [30] hat die zirkulare (statische) Potentialbarriere in Graphen unter anderem im Hinblick auf die Winkelabhängigkeit der radialen Stromdichte untersucht. Sie haben festgestellt, dass mit Hilfe von Fano-Resonanzen die durch das Klein-Tunneln stark bevorzugte Vorwärtsstreuung unterdrückt werden kann. Fano-Resonanzen entstehen typischerweise durch einen resonanten Streuprozess, der mit einem Kontinuum (Hintergrund) wechselwirkt und sind durch ein asymmetrisches Linienprofil bestehend aus antiresonantem und resonantem Teil gekennzeichnet. Die Abb. 3.19 zeigt die radiale Stromdichte  $r \cdot j_r^{\text{refl}}$  in Abhängigkeit von  $V_0 R$  in der Nähe der Resonanz (b) um  $V_0 R = 3.636$  (rote Markierung) für fünf Zeitschritte im Intervall  $r - t \in [2.63, 3.13]$  um die Vorwärtsstreuung bei  $r - t \sim 2.88$  für den Winkel (a)  $\phi = 0$  und (b)  $\phi = \pm\pi$ . Ein ähnliche Abhängigkeit ist für die anderen Zeiten zu beobachten, in denen die Vorwärts- oder Rückwärtsstreuung ausgezeichnet ist. Die Zeitschritte wurden so gewählt, dass der Übergang der ausgeprägten Vorwärtsstreuung in die Rückwärtsstreuung gerade beginnt (vgl. mit der zeitlichen Breite der Vorwärtsstreuung in Abb. 3.16 (b)). Während in der Vorwärtsrichtung in Teil (a) der Abb. 3.19 man für jeden Zeitschritt typische Resonanzen beobachtet, die nur leicht asymmetrisch sind, weist die radiale Stromdichte in Teil (b) (Rückwärtsrichtung) für jeden Zeitschritt äußerst asymmetrische Linienprofile auf. Für  $r - t \neq 2.88$  treten Fano-Resonanzen auf, die dafür sorgen, dass diese Streurichtung abgeschwächt wird. Bei  $r - t = 2.88$  ist die Vorwärtsstreuung am stärksten ausgeprägt, was sich in der Rückwärtsstreuung als schwache Fano-Resonanz oder fast perfekte Antiresonanz äußert, bei

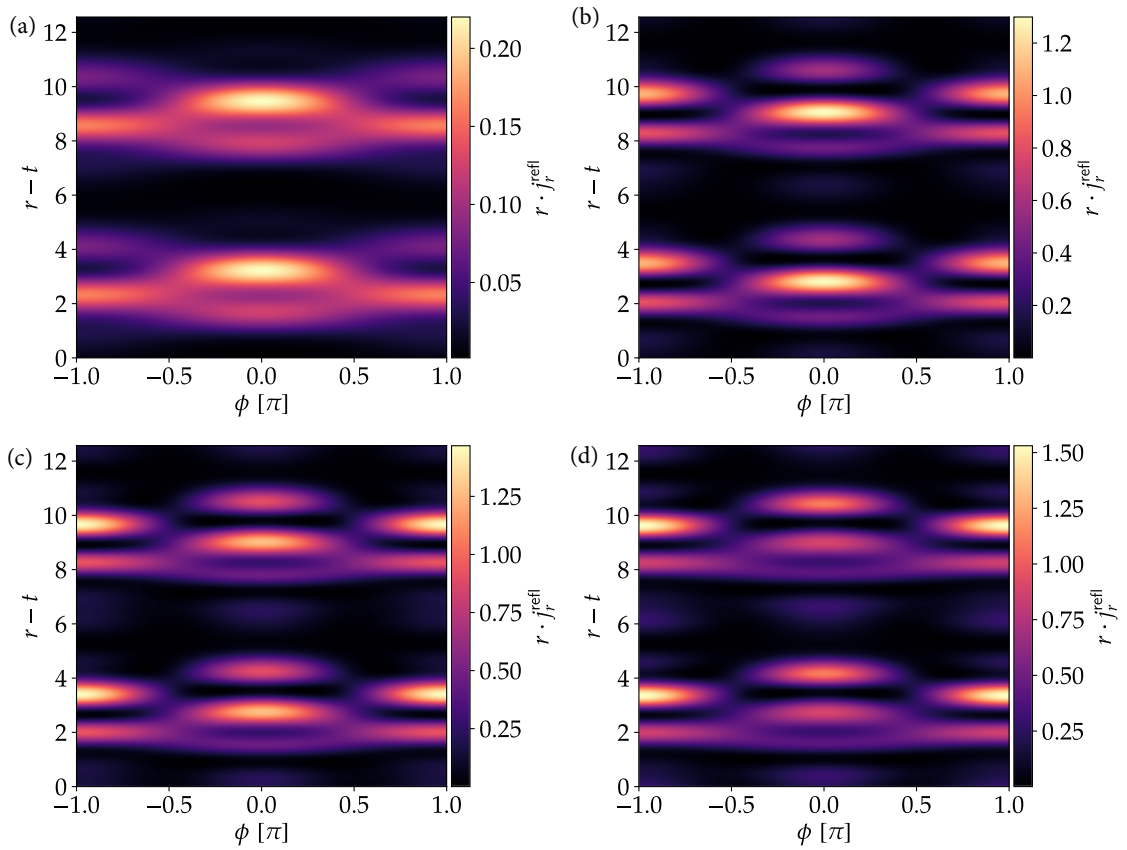


Abbildung 3.18.: Zeitabhängige, fernfeldgenäherte und reflektierte Stromdichte  $r \cdot j_r^{\text{refl}}$  für  $V_0 R = 3.6373$  mit verschiedenen Amplituden (a)  $\tilde{V} = 1$ , (b)  $\tilde{V} = 3$ , (c)  $\tilde{V} = 4$ , und (d)  $\tilde{V} = 5$  bei einer relativen einfallenden Energie von  $E/V_0 = 0.1$  und  $V_0 = 16$  in Abhängigkeit der Zeit  $r - t$  und des Winkels  $\phi$ .

der die Stromdichte fast gänzlich unterdrückt wird. Abschließend betrachten wir in Abb. 3.20 die zeitabhängige Stromdichte im Nahfeld  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  für die Zeitschritte  $r - t$ , in der die Vorwärts- bzw. Rückwärtsstreuung bevorzugt wird. Die dargestellten Stromdichten entsprechen der Stromdichte im Nahfeld des statischen Dots bei  $E/V_0 = 0.1$  für eine  $m = 0$  Anregung (siehe Abb. 3.5 (a2)), doch ändert sich mit jedem Zeitschritt die Orientierung der Wirbel. Diese Beobachtung ist konsistent mit dem vergleichsweise starken Anteil von  $r_{m=0,n}$  aus Abb. 3.17 (i).

Die gezeigten Winkelabhängigkeiten sind nicht einzigartig für die gewählten Parameter, sondern solange  $E/V_0 \ll 1$  und die Kombination aus statischer Potentialhöhe  $V_0$  und Oszillationsamplitude  $\tilde{V}$  so gewählt wurden, sodass die Seitenbänder resonant sind und stark genug angeregt werden, lassen sich viele ähnliche Darstellungen mit noch komplexeren Winkelabhängigkeiten finden. Die dargestellten Winkelabhängigkeiten der radialen Stromdichte sind nicht einzigartig für die gewählten Parameter  $E/V_0 = 0.1$  und  $V_0 = 16$ . Insbesondere ist es stabil für eine Vielzahl von Oszillationsamplituden (vgl. Abb. 3.18. Durch eine Variation von  $V_0$  lassen sich zu Abb. 3.16 (b) viele ähnliche Winkelabhängigkeiten finden. Der Grund dafür liegt in der Abhängigkeit der Resonanzposition  $V_0 R$  der angeregten Seitenbänder, die sich durch  $V_0$  geschickt kontrollieren lässt. Durch resonant angeregte Seitenbänder höherer Partialwellen  $m$  lassen sich noch komplexere Winkelabhängigkeit konstruieren, die sich zeitlich abwechseln. Die Winkelabhängigkeit der Streugrößen der oszillierenden zirkularen Barriere lässt sich im Dice-Gitter ausgezeichnet manipulieren und ist aus einer Anwendungsperspektive von besonderem Interesse.

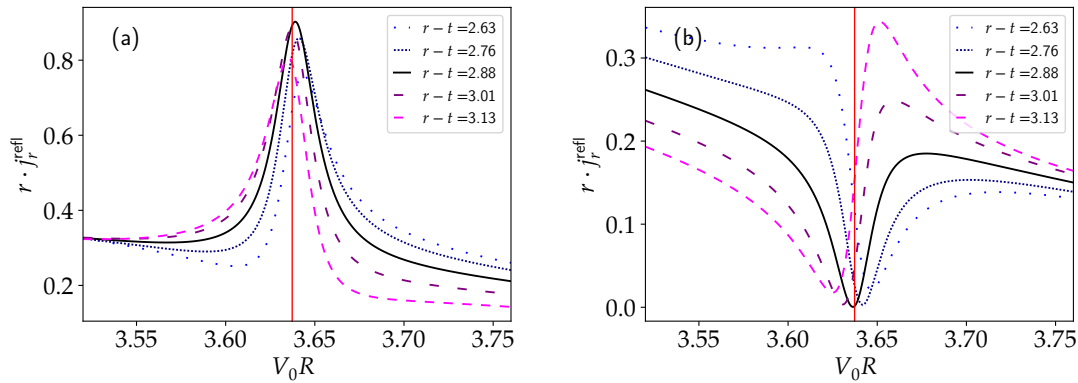


Abbildung 3.19.: Fernfeldgenäherte reflektierte Stromdichte bei  $E/V_0 = 0.1$ ,  $V_0 = 16$ ,  $\tilde{V} = 2$  für (a)  $\phi = 0$ , (b)  $\phi = \pi$  für verschiedene Zeitschritte  $t$  in Abhängigkeit von  $V_0 R$  in der Nähe der vertikalen roten Markierung bei  $V_0 R = 3.6373$ .

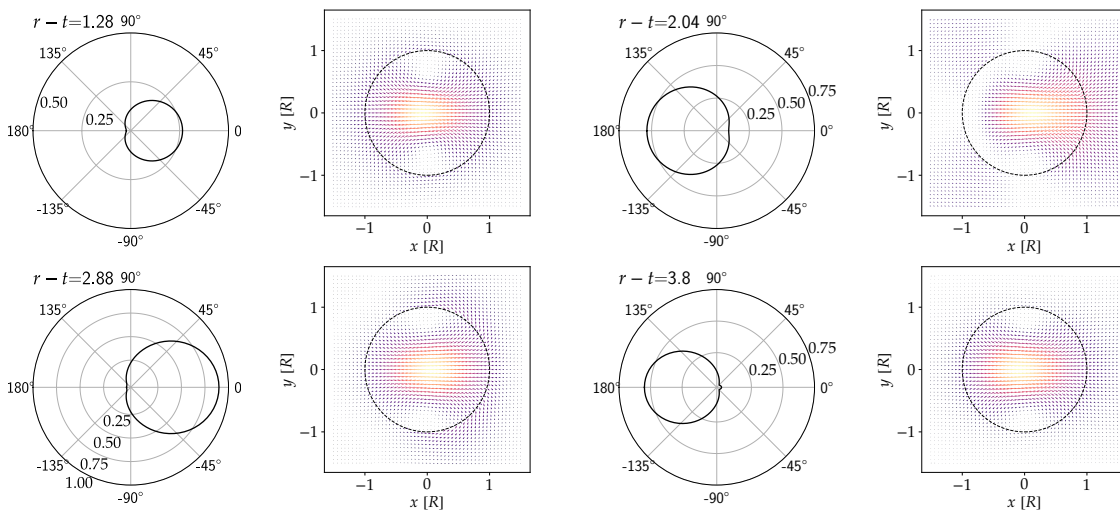


Abbildung 3.20.: Radiale Stromdichte  $j_r^{\text{refl}}$  in Abhängigkeit des Polarwinkels  $\phi$  für ausgewählte Zeitschritte  $r-t$  normiert auf den Maximalwert bei  $r-t = 2.88$ . Rechts daneben die zugehörige Stromdichte im Nahfeld beim zugehörigen Zeitschritt. Die Parameter lauten  $E/V_0 = 0.1$ ,  $V_0 = 16$ ,  $\tilde{V} = 2$  bei  $V_0 R = 3.6373$  (identische Parameter zu Abb. 3.16 (b)).



# Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde durch eine effektive, theoretische Beschreibung der Einfluss externer Felder auf Dirac-Weyl Quasiteilchen im  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter untersucht. Das  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter stellt eine Erweiterung des Graphens dar, indem das Honigwabengitter durch ein weiteres Atom im Zentrum eines jeden Hexagons erweitert und mit einem der Untergitter verbunden wird. Die Kopplungsstärke wird durch einen Parameter  $\alpha$  skaliert, weshalb das Gitter die Grenzfälle Graphen ( $\alpha = 0$ ) und Dice-Gitter ( $\alpha = 1$ ) enthält. Wir haben Dirac-Weyl Quasiteilchen durch niederenergetische Anregungen des  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitters in der Nähe des Neutralitätspunkt betrachtet, die durch eine masselose Dirac-Weyl Gleichung beschrieben werden. Durch die  $\alpha$ -Abhängigkeit der Dirac-Weyl Gleichung konnten wir so Pseudospin-1/2 und Pseudospin-1 Teilchen untersuchen. Neben dem flachen Band besitzt das Gitter eine zu Graphen identische Bandstruktur, dennoch hängen neben den elektronischen Eigenschaften auch die Transporteigenschaften vom Skalierungsparameter  $\alpha$  und damit vom Pseudospin ab. Um den Einfluss von externen Magnetfeldern auf die elektronischen Eigenschaften von Dirac-Weyl Quasiteilchen in abgeschlossenen Systemen zu untersuchen, haben wir zunächst die  $\alpha$ -abhängige Berry Phase abgeleitet. Die algebraische Berechnung der Energieeigenwerte des  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Systems in einem Magnetfeld hat auf die  $\alpha$ -abhängigen Landau-Level geführt. Zur Beschreibung von abgeschlossenen Systemen im  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter haben wir erstmals die Randbedingung unendlicher Masse für beliebige Skalierungsparameter  $\alpha$  hergeleitet. Dies erfolgte über die Hermitizität des Hamilton-Operators auf einem Gebiet, welches von einem stückweise konstanten Massenterm umschlossen ist. Wir haben dann gezeigt, dass die Stromdichte projiziert auf den Normalenvektor der Barriere verschwinden muss. Dies konnte allgemein durch eine Relation zwischen den Komponenten der Wellenfunktion erfüllt werden, die durch die Lösung eines Streuproblems für unendliche Massenterme endgültig festgelegt wurde. Für  $\alpha = 0$  wird die Randbedingung unendlicher Masse von Graphen reproduziert. Aufgrund der verschwindenden Stromdichte der Zustände des flachen Bands wurde deutlich, dass die Randbedingungen der unendlichen Masse solche Zustände stets zulässt. Die Anwendung der Randbedingung unendlicher Masse auf eine Dot-Geometrie im  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter unter dem Einfluss eines externen Magnetfeldes hat auf eine Gleichung geführt, dessen Nullstellen den Energieeigenwerten entsprochen haben. Weder die Randbedingung noch das externe Feld haben jedoch das flache Band in der Dot-Geometrie verändert. Für alle Skalierungsparameter  $\alpha$  konvergieren die Energieeigenwerte für hohe Magnetfelder gegen die entsprechenden  $\alpha$ -abhängigen Landau-Level, was durch eine asymptotische Entwicklung der Eigenwertgleichung bestätigt werden konnte. In Abhängigkeit der Magnetfeldstärke konnten zwei Einschlussregime beobachtet werden. Während die Energieeigenwerte für kleine Feldstärken durch die Randbedingung dominiert werden, wird dieses Verhalten für große Magnetfelder durch die Konvergenz gegen die Landau-Level unterdrückt. Die Spektren für  $\alpha = 0$  haben die Ergebnisse der Literatur zu Graphen-Dots reproduziert. Die Valley-Entartung ist für Graphen gebrochen, da die Randbedingung unendlicher Masse die effektive Zeitumkehrsymmetrie in einem Valley und ein Magnetfeld die echte Zeitumkehrsymmetrie bricht. Im Gegensatz zu Graphen wird die Valley-Entartung durch die Randbedingung unendlicher Masse im Dice-Gitter nicht aufgehoben, was auf den Pseudospin-1 und die intakte effektive Zeitumkehrsymmetrie zurückzuführen ist. Im Übergangsregime zwischen  $\alpha = 0$  und  $\alpha = 1$  ist die Valley-Entartung der Energiespektren stark aufgehoben, was auf die gebrochene Valley-Entartung in Graphen und den kontinuierlichen Übergang durch den Skalierungsparameter zurückzuführen sind. Neben der Graphen-ähnlichen Randbedingung konnte noch eine Dice-Gitter spezifische Bedingung hergeleitet werden, die ebenfalls das flache Band nicht stört. Die Energieeigenwerte konvergieren

ebenfalls gegen die Landau-Level. Zusätzlich wird die Teilchen-Loch-Symmetrie nicht aufgehoben. Die Untersuchung der Transporteigenschaften von Dirac-Weyl Quasiteilchen wurde an verschiedenen externen Potentialfeldern insbesondere für den Pseudospin-1 Fall untersucht. Als erstes haben wir planare Barrieren untersucht, wo wir generell zeigen konnten, dass die Streueigenschaften vom Skalierungsparameter abhängen und mit steigendem  $\alpha$  die Transparenz anwächst. Die Barriere wird im Dice-Gitter sogar völlig transparent, wenn die Energie der einfallenden Teilchen der halben Potentialhöhe entspricht, unabhängig vom Einfallswinkel. Dies wird als *Super-Klein-Tunnel-Effekt* bezeichnet. Anschließend wurde die Streuung von ebenen Wellen an kreisförmigen Potentialbarrieren im Dice-Gitter analysiert. Dazu wurden zunächst die Wellenfunktionen in den durch das Potential abgegrenzten Raumbereichen mittels Partialwellenzerlegung aufgestellt. Die Forderung nach Stetigkeit der Wellenfunktionen hat uns Bestimmungsgleichungen für die Streuamplituden geliefert. Zur Analyse wurde ausgehend von der Kontinuitätsgleichung die Streueffizienz und die radiale Stromdichte mit den Streuamplituden berechnet, mit Hilfe derer sich das Verhalten in Streuregime einteilen ließ. Neben den aus Graphen bekannten Streuregimen weist die kreisförmige Potentialbarriere im Dice-Gitter ein weiteres Regime auf. Das Wiederkehren des resonanten Streuers zeichnet die Streuung von Pseudospin-1 Quasiteilchen dadurch aus, dass es Resonanzen in einem zu Graphen untypischen Parameterbereich aufweist. Die damit einhergehenden quasigebundenen Zustände entstehen durch Einfangvortizes am Rand des Potentials, die durch die Unstetigkeit der tangentialen Stromdichte zulässig sind. Andererseits wurde die Winkelabhängigkeit der reflektierten Stromdichte im Fernfeld näher diskutiert. Es wäre zu erwarten gewesen, dass aufgrund der hohen Transparenz von planaren Potentialbarrieren im Dice-Gitter die Vorwärtsstreuung dominiert und die Winkelabhängigkeit äußerst anisotrop ist. Dennoch hat die reflektierte Stromdichte im Fernfeld Rückstreuungseffekte, wie die niederenergetische isotrope Abstrahlung, aufgewiesen. Die Rückstreuung wird durch die verschwindende Berry Phase ermöglicht, da solch ein Prozess ein Paar von Streupfaden involviert, die nun konstruktiv interferieren können. Schlussendlich wurde die oszillierende zirkulare Barriere im Dice-Gitter untersucht. Das periodische Treiben des Potentials hat den Austausch einzelner Energiequanten in Form von Vielfachen der Kreisfrequenz bewirkt, wodurch Partialwellen neuer Energieniveaus angeregt wurden. Die Wellenfunktion im Inneren des Potentials ließ sich durch die Periodizität des Hamilton-Operators mittels Floquet-Theorie berechnen, weshalb die Wellenfunktionen in beiden Raumbereichen durch eine Superposition von vielen Energieeigenzuständen ausgedrückt wurden. Aus der Stetigkeitsbedingung wurde zur Bestimmung der Streuamplituden eine Matrixgleichung abgeleitet, die numerisch gelöst wurde. Wenn die Oszillationsamplitude genügend klein ist (statischer Grenzfall), werden die statischen Koeffizienten reproduziert. Mittels der Streuamplituden und der Kontinuitätsgleichung wurden die zeitabhängigen Streugrößen abgeleitet. Um die Winkelabhängigkeit der radialen Stromdichte im Fernfeld näher zu analysieren, wurde die Gleichung aufgespalten und die Terme identifiziert, die für eine gleichzeitige Zeit- und Winkelabhängigkeit verantwortlich sind. Allgemein ist das Streuverhalten des oszillierenden Potentials sehr komplex, da durch die Anregung von vielen Seitenbändern und Partialwellen durch Wechselwirkung und Interferenzeffekte eine starke Überlagerung und Unterdrückung von Resonanzen entsteht. Wir konnten aber zeigen, dass das Streuverhalten der Seitenbänder durch die statischen Potentialparameter mit entsprechend verschobenen Seitenbandenergien bestimmt wird. Wir haben im Wesentlichen zwei Situationen betrachtet: Einerseits waren die Seitenbänder nicht resonant, wodurch mit steigender Oszillationsamplitude der resonante Anteil immer mehr durch die Seitenbandanteile gestört wird, bis letztlich keine Resonanzen mehr zu identifizieren sind. Andererseits entstehen verschobene Resonanzen, wenn alle Seitenbänder im resonanten Regime sind. Die Resonanzen können durch die statische Resonanzbedingung mit verschiedenen Partialwellen und spezifischen Seitenbändern identifiziert werden. Durch die verschobenen Resonanzen kann die Wechselwirkung zwischen verschiedenen Seitenbändern und Partialwellen erzielt werden. Besonders interessant ist die Analyse der Abstrahlcharakteristik der radialen Stromdichte solcher Seitenbandresonanzen. Durch eine geschickte Wahl der Parameter kann das oszillierende Potential zwischen Vorwärts- und Rückwärtsstreuung periodisch schalten. Dieses Verhalten ist stabil für eine Vielzahl von Parametern und kann auch auf andere Streurichtungen erweitert werden. Wir

haben gezeigt, dass zur Generierung solcher Abstrahlcharakteristiken die Anregungen von mehreren Partialwellen zu verschiedenen Seitenbändern erforderlich sind. Durch Interferenzeffekte innerhalb des Potentials werden dann die entsprechenden Streurichtungen unterdrückt, was sich durch Fano-Resonanzen und Antiresonanzen im Linienprofil äußert. Die zeitabhängige Stromdichte im Nahfeld zeigt bei diesen Zeitschritten einen Orientierungswechsel der Vortizes auf, die für den Einfang der quasigebundenen Zustände verantwortlich sind.

Die vorgestellten Resultate zur Randbedingung unendlicher Masse bestätigen die Robustheit des flachen Bands, werfen aber auch die Frage auf, wie sich die Randbedingung in Tight-Binding-Kalkulationen verhält. Weiter könnte man auch mit einem Tight-Binding-Modell studiert werden, wie verschiedene Unordnungseffekte die Transporteigenschaften oder die Robustheit des flachen Bands verändert. Dazu könnte man eine Ring-Geometrie aus einem  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter ausschneiden und kontaktieren, um die Leitfähigkeit in Abhängigkeit eines senkrechten Magnetfeldes zu untersuchen. Der so generierte Aharonov-Bohm-Effekt kann effektiv als Interferometer genutzt werden, um Veränderungen der Transporteigenschaften auf einem Ringarm numerisch zu untersuchen. Dies würde eine Verallgemeinerung meiner Bachelorarbeit auf beliebige Skalierungsparameter darstellen. Eine weitere interessante Fragestellung wäre, die Streuung von ebenen Wellen an einer oszillierenden kreisförmigen Potentialbarriere im  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  Gitter zu untersuchen, um die  $\alpha$ -Abhängigkeit der Streueigenschaften zu charakterisieren. In diesem Fall muss aber zusätzlich noch die Skew-Streuung berücksichtigt werden, wodurch die Stromdichte in den einzelnen Valleys nicht mehr entartet ist und sich aufspaltet. Durch die kontrollierbare Abstrahlcharakteristik des Potentials und die Skew-Streuung wäre es so möglich, einen Valley-Filter zu bauen, der Ströme verschiedener Valleys in unterschiedliche Richtungen trennt. Solche Systeme sind für die Valleytronik äußerst interessant.



# Literatur

- <sup>1</sup>K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva und A. A. Firsov, „Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films“, *Science* **306**, 666–669 (2004) (siehe S. 5).
- <sup>2</sup>A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov und A. K. Geim, „The electronic properties of graphene“, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109–162 (2009) (siehe S. 5, 11).
- <sup>3</sup>D. Bercioux, D. F. Urban, H. Grabert und W. Häusler, „Massless Dirac-Weyl fermions in a  $\mathcal{T}_3$  optical lattice“, *Phys. Rev. A* **80**, 063603 (2009) (siehe S. 5, 14, 23).
- <sup>4</sup>D. Leykam, A. Andreanov und S. Flach, „Artificial flat band systems: from lattice models to experiments“, *Advances in Physics: X* **3**, 1473052 (2018) (siehe S. 5).
- <sup>5</sup>B. Sutherland, „Localization of electronic wave functions due to local topology“, *Phys. Rev. B* **34**, 5208–5211 (1986) (siehe S. 5, 11, 14).
- <sup>6</sup>J. Vidal, R. Mosseri, „Aharonov-Bohm Cages in Two-Dimensional Structures“, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5888–5891 (1998) (siehe S. 5).
- <sup>7</sup>F. Wang und Y. Ran, „Nearly flat band with Chern number  $C = 2$  on the dice lattice“, *Phys. Rev. B* **84**, 241103 (2011) (siehe S. 5).
- <sup>8</sup>A. Raoux, M. Morigi, J.-N. Fuchs, F. Piéchon und G. Montambaux, „From Dia- to Paramagnetic Orbital Susceptibility of Massless Fermions“, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 026402 (2014) (siehe S. 5, 11, 19, 23).
- <sup>9</sup>J. D. Malcolm und E. J. Nicol, „Magneto-optics of massless kane fermions: Role of the flat band and unusual Berry phase“, *Phys. Rev. B* **92**, 035118 (2015) (siehe S. 5).
- <sup>10</sup>R. P. Brent, *Algorithms for Minimization Without Derivatives* (Prentice-Hall, New Jersey, 1973, Chapter 4) (siehe S. 5, 33).
- <sup>11</sup>T. Biswas und T. K. Ghosh, „Magnetotransport properties of the  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  model“, *Journal of Physics: Condensed Matter* **28**, 495302 (2016) (siehe S. 5).
- <sup>12</sup>Y. Xu und L.-M. Duan, „Unconventional quantum Hall effects in two-dimensional massive spin-1 fermion systems“, *Phys. Rev. B* **96**, 155301 (2017) (siehe S. 5).
- <sup>13</sup>F. Piéchon, J.-N. Fuchs, A. Raoux und G. Montambaux, „Tunable orbital susceptibility in  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  tight-binding models“, *Journal of Physics: Conference Series* **603**, 012001 (2015) (siehe S. 5, 19).
- <sup>14</sup>T. Louvet, P. Delplace, A. A. Fedorenko und D. Carpentier, „On the origin of minimal conductivity at a band crossing“, *Phys. Rev. B* **92**, 155116 (2015) (siehe S. 5, 21).
- <sup>15</sup>S. F. Islam und P. Dutta, „Valley-polarized magnetoconductivity and particle-hole symmetry breaking in a periodically modulated  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  lattice“, *Phys. Rev. B* **96**, 045418 (2017) (siehe S. 5).
- <sup>16</sup>O. V. Bugaiko und D. O. Oriekhov, „Electronic states of pseudospin-1 fermions in  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  lattice ribbons in a magnetic field“, arXiv e-prints, arXiv:1902.02367 (2019) (siehe S. 5, 19).
- <sup>17</sup>D. O. Oriekhov, E. V. Gorbar und V. P. Gusynin, „Electronic states of pseudospin-1 fermions in dice lattice ribbon“, *Low Temperature Physics* **44**, 1313–1324 (2018) (siehe S. 5, 19).

- <sup>18</sup>Y.-R. Chen, Y. Xu, J. Wang, J.-F. Liu und Z. Ma, „Enhanced magneto-optical response due to the flat band in nanoribbons made from the  $\alpha$ - $\mathcal{T}_3$  lattice“, *Phys. Rev. B* **99**, 045420 (2019) (siehe S. 5, 19, 33).
- <sup>19</sup>B. Dey und T. K. Ghosh, „Photoinduced valley and electron-hole symmetry breaking in  $\alpha$ - $T_3$  lattice: The role of a variable Berry phase“, *Phys. Rev. B* **98**, 075422 (2018) (siehe S. 5).
- <sup>20</sup>M. V. Berry und R. Mondragon, „Neutrino billiards: time-reversal symmetry-breaking without magnetic fields“, *Proc. R. Soc. Lond. A*, 53–74 (1987) (siehe S. 5, 19, 23, 24, 26, 28).
- <sup>21</sup>S. Schnez, K. Ensslin, M. Sigrist und T. Ihn, „Analytic model of the energy spectrum of a graphene quantum dot in a perpendicular magnetic field“, *Phys. Rev. B* **78**, 195427 (2008) (siehe S. 6, 19, 33).
- <sup>22</sup>M. Zarenia, A. Chaves, G. A. Farias und F. M. Peeters, „Electronic and optical properties of a circular graphene quantum dot in a magnetic field: Influence of the boundary conditions“, *Phys. Rev. B* **84**, 205441 (2011) (siehe S. 6, 19, 33).
- <sup>23</sup>J. G. Pedersen und T. G. Pedersen, „Dirac model of an isolated graphene antidot in a magnetic field“, *Phys. Rev. B* **85**, 035413 (2012) (siehe S. 6, 19).
- <sup>24</sup>M. R. Thomsen und T. G. Pedersen, „Analytical Dirac model of graphene rings, dots, and antidots in magnetic fields“, *Phys. Rev. B* **95**, 235427 (2017) (siehe S. 6, 19, 32, 33).
- <sup>25</sup>O. Klein, „Die Reflexion von Elektronen an einem Potentialsprung nach der relativistischen Dynamik von Dirac“, *Zeitschrift für Physik* **53**, 157–165 (1929) (siehe S. 6, 39).
- <sup>26</sup>E. Illes und E. J. Nicol, „Klein tunneling in the  $\alpha - T_3$  model“, *Phys. Rev. B* **95**, 235432 (2017) (siehe S. 6, 23, 39, 40, 43).
- <sup>27</sup>M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov und A. K. Geim, „Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene“, *Nature Physics* **2**, 620–625 (2006) (siehe S. 6, 39, 42).
- <sup>28</sup>D. F. Urban, D. Bercioux, M. Wimmer und W. Häusler, „Barrier transmission of Dirac-like pseudospin-one particles“, *Phys. Rev. B* **84**, 115136 (2011) (siehe S. 6, 16, 17, 39, 42).
- <sup>29</sup>J. Cserti, A. Pályi und C. Péterfalvi, „Caustics due to a Negative Refractive Index in Circular Graphene  $p - n$  Junctions“, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 246801 (2007) (siehe S. 6, 43, 54).
- <sup>30</sup>R. L. Heinisch, F. X. Bronold und H. Fehske, „Mie scattering analog in graphene: Lensing, particle confinement, and depletion of Klein tunneling“, *Phys. Rev. B* **87**, 155409 (2013) (siehe S. 6, 43, 44, 47, 70).
- <sup>31</sup>J.-S. Wu und M. M. Fogler, „Scattering of two-dimensional Dirac electrons by a circular potential barrier“, *Phys. Rev. B* **90**, 235402 (2014) (siehe S. 6, 43, 50).
- <sup>32</sup>H.-Y. Xu und Y.-C. Lai, „Revival resonant scattering, perfect caustics, and isotropic transport of pseudospin-1 particles“, *Phys. Rev. B* **94**, 165405 (2016) (siehe S. 6, 39, 43, 44, 49, 50, 54, 69).
- <sup>33</sup>C. Schulz, R. L. Heinisch und H. Fehske, „Scattering of two-dimensional Dirac fermions on gate-defined oscillating quantum dots“, *Phys. Rev. B* **91**, 045130 (2015) (siehe S. 6, 58, 61, 66).
- <sup>34</sup>C. Wurl und H. Fehske, „Floquet scattering of light and sound in Dirac optomechanics“, *Phys. Rev. A* **98**, 063812 (2018) (siehe S. 6, 58, 66).
- <sup>35</sup>X. Chen und R. Zhu, „Quantum Pumping with Adiabatically Modulated Barriers in Three-band Pseudospin-1 Dirac–Weyl Systems“, *Entropy* **21** (2019) 10.3390/e21020209 (siehe S. 6, 58).
- <sup>36</sup>Y. Betancur-Ocampo, G. Cordourier-Maruri, V. Gupta und R. de Coss, „Super-Klein tunneling of massive pseudospin-one particles“, *Phys. Rev. B* **96**, 024304 (2017) (siehe S. 15, 28).
- <sup>37</sup>E. V. Gorbar, V. P. Gusynin und D. O. Oriekhov, „Electron states for gapped pseudospin-1 fermions in the field of a charged impurity“, *Phys. Rev. B* **99**, 155124 (2019) (siehe S. 15).
- <sup>38</sup>B. Dóra, J. Kailasvuori und R. Moessner, „Lattice generalization of the Dirac equation to general spin and the role of the flat band“, *Phys. Rev. B* **84**, 195422 (2011) (siehe S. 16, 43).

- <sup>39</sup>M. V. Berry, „Quantal phase factors accompanying adiabatic changes“, Proc. R. Soc. Lond. A, 45–57 (1984) (siehe S. 19).
- <sup>40</sup>E. Illes, J. P. Carbotte und E. J. Nicol, „Hall quantization and optical conductivity evolution with variable Berry phase in the  $\alpha$ - $T_3$  model“, Phys. Rev. B **92**, 245410 (2015) (siehe S. 19).
- <sup>41</sup>J. W. McClure, „Diamagnetism of Graphite“, Phys. Rev. **104**, 666–671 (1956) (siehe S. 23).
- <sup>42</sup>A. R. Akhmerov und C. W. J. Beenakker, „Boundary conditions for Dirac fermions on a terminated honeycomb lattice“, Phys. Rev. B **77**, 085423 (2008) (siehe S. 24).
- <sup>43</sup>E. McCann und V. I. F. ko, „Symmetry of boundary conditions of the Dirac equation for electrons in carbon nanotubes“, Journal of Physics: Condensed Matter **16**, 2371–2379 (2004) (siehe S. 24).
- <sup>44</sup>M. Abramowitz und I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, ninth Dover printing, tenth GPO printing (Dover, New York, 1964) (siehe S. 31, 32, 45, 60).
- <sup>45</sup>I. Gradshteyn und I. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, And Products*, Corrected and enlarged Edition (Academic Press, 1980, p. 951-962) (siehe S. 31, 47).
- <sup>46</sup>E. Jones, T. Oliphant, P. Peterson u. a., *SciPy: Open source scientific tools for Python*, [Online; accessed 03.09.2019], 2001– (siehe S. 33).
- <sup>47</sup>P. Recher, B. Trauzettel, A. Rycerz, Y. M. Blanter, C. W. J. Beenakker und A. F. Morpurgo, „Aharonov-Bohm effect and broken valley degeneracy in graphene rings“, Phys. Rev. B **76**, 235404 (2007) (siehe S. 36).
- <sup>48</sup>H.-Y. Xu, L. Huang, D. Huang und Y.-C. Lai, „Geometric valley Hall effect and valley filtering through a singular Berry flux“, Phys. Rev. B **96**, 045412 (2017) (siehe S. 36, 37, 43).
- <sup>49</sup>C. W. J. Beenakker, „Colloquium“, Rev. Mod. Phys. **80**, 1337–1354 (2008) (siehe S. 37).
- <sup>50</sup>F. Schwabl, *Quantenmechanik (QM 1)*, Bd. 7 (Springer, 2007) (siehe S. 39).
- <sup>51</sup>P. E. Allain und J. N. Fuchs, „Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons“, The European Physical Journal B **83**, 301 (2011) (siehe S. 42).
- <sup>52</sup>C Wurl und H. Fehske, „Light-sound interconversion in optomechanical Dirac materials“, Scientific Reports **7**, 9811 (2017) (siehe S. 43).
- <sup>53</sup>M. A. Zeb, K. Sabeeh und M. Tahir, „Chiral tunneling through a time-periodic potential in monolayer graphene“, Phys. Rev. B **78**, 165420 (2008) (siehe S. 58).
- <sup>54</sup>G. Platero und R. Aguado, „Photon-assisted transport in semiconductor nanostructures“, Physics Reports **395**, 1–157 (2004) (siehe S. 59).
- <sup>55</sup>G. Floquet, „Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques“, fr, Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure **2e série, 12**, 47–88 (1883) (siehe S. 60).





## Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei all denjenigen bedanken, die zum Erfolg der Arbeit beigetragen haben. Zuerst gebührt mein Dank Herrn Prof. Fehske, der meine Masterarbeit betreut und begutachtet hat. Für die hilfreichen Anregungen und die konstruktive Kritik bei der Erstellung dieser Arbeit möchte ich mich herzlich bedanken. Ebenfalls möchte ich mich bei Dr. Christian Wurl für sein Engagement in der fachlichen Betreuung bedanken, der mich durch seine Anregungen für dieses Thema begeistern konnte und der durch die zahlreichen Debatten maßgeblich zum Gelingen der Arbeit beigetragen hat. Ich bedanke mich auch bei Lennard Berg, der durch seine unermüdliche Unterstützung beim Text- und Formelsatz in  $\LaTeX$  bei der Gestaltung mitgewirkt hat. Meinen Freunden und Kommilitonen möchte ich dafür danken, dass sie bei der Erstellung der Arbeit und während meines Studiums in Greifswald stets hilfsbereit bei vielen kleinen Fragen waren. Abschließend möchte ich meinen Eltern für deren Unterstützung in jeglicher Hinsicht während der Erstellung dieser Arbeit und der Dauer meines Studiums meinen Dank aussprechen. Mein größter Dank gilt meiner Freundin, die mich immer wieder ermutigte und mit vielen nützlichen Tipps einen wesentlichen Teil zur Masterarbeit beigetragen hat.