

Uniwersytet Warszawski
Wydział Fizyki

Julia Derlikiewicz, Kamila Kotur i Mihai Suster

**Widmo kwazienergii kwantowego układu
dwupoziomowego w okresowym polu
laserowym na przykładzie grafenu**

Projekt wykonany pod kierunkiem
dr hab. Katarzyny Krajewskiej oraz prof. dr. hab. Jerzego Kamińskiego
z Instytutu Fizyki Teoretycznej

Warszawa, maj 2019

Spis treści

1. Cel projektu	4
2. Zabawa liczbami zespolonymi	5
3. Równanie układu dwupoziomowego w okresowym polu laserowym	10
4. Grafen w okresowym polu laserowym	15
5. Perspektywy dalszych badań	24

Rozdział 1

Cel projektu

Celem projektu było napisanie programu numerycznego i przeprowadzenie przykładowych obliczeń dla widma kwazienergii grafenu oddziałującego z zewnętrznym, okresowym polem laserowym. Jako ilustrację obliczeń numerycznych wybrano bi-kołowe pole laserowe.

Rozdział 2

Zabawa liczbami zespolonymi

Historia liczb zespolonych

Właściwa historia liczb zespolonych zaczyna się dopiero w XVI wieku, jednak już w czasach starożytnej Grecji można zauważyć ich ślad. Po raz pierwszy w równaniach Herona z Aleksandrii, który, nawiązując do książki „*Algebra, the x and y of everyday math*” autorstwa M. Willersa [1], jest twórcą wzoru na pole dowolnego trójkąta przy znajomości jego boków. Pozornie prosty w obliczeniach wzór, po drobnych manipulacjach potrafił dać rozwiązania wykraczające poza ówczesnie znaną teorię liczb. Przez kolejne wieki ludzkość ignorowała istnienie liczb ujemnych, a tym bardziej ich pierwiastkowanie. Najprawdopodobniej zostały one uznane za niekonwencjonalne, a co za tym idzie, rozpoczęcie jakichkolwiek rozważań w tej dziedzinie graniczyło z cudem.

Prawdziwy przełom w tej dziedzinie nastąpił dopiero w XVI wieku. Oprócz niezliczonej ilości pytań znalazło się również wielu śmiazków chętnych rozwikłania zagadki istnienia liczb zespolonych. Jednym z nich był włoski lekarz Girolamo Cardano, który w roku 1545 sporządził dzieło „*Arts Magnae*” („*Wielka sztuka*”), w którym rozważył następujący problem: „*Gdyby ktoś kazał Tobie wziąć liczbę 10 i podzielić ją na dwie części, tak by pomnożone jedna z drugą dały 40; odpowiedź niemożliwe. Jednak rozwiążemy to równanie dla Ciebie*”. Rozpisując w tym zagadnieniu układ równań otrzymamy równanie kwadratowe, którego wyróżnik będzie mniejszy od zera, a rozwiązania będą zawierały pierwiastki z liczb ujemnych. Problem nie definiował wprowadzenia liczb zespolonych, ale jego rozwiązanie wynikało z zastosowania ich własności. Cardano posunął się dalej w rozważaniach, korzystając z prywatnych, wcześniej niepublikowanych prac Niccolo Tartaglii, który jako pierwszy rozwiązał równanie trzeciego stopnia. Ich twierdzenia były dla ówczesnych matematyków bardzo kontrowersyjne - zawierały nie tylko liczby ujemne, ale też ich pierwiastki.

Przełom nastąpił 30 lat później, kiedy to inżynier Rafael Bombelli, uważany dziś za „ojca liczb zespolonych”, nie zważając na przekonania środowiska matematycznego po prostu użył pierwiastka z liczb ujemnych i opisał w słynnym dziele „*Algebra*”, w którym wyjaśnił zasady ich działania oraz ich własności. W późniejszych latach liczby, o których pisał Bombelli zostały nazwane liczbami wymagowanymi (urojonymi), a jeszcze później przyjęto oznaczenie i (łac. imaginarius) na jednostkę urojoną, t.j. $i^2 = -1$, które zostało rozpropagowane przez Eulera i zostało z nami do dziś.

Postać algebraiczna i płaszczyzna zespolona

Liczby zespolone rozszerzają zatem klasyczną, jednowymiarową oś liczbową do dwuwymiarowej płaszczyzny zespolonej. Każdą z liczb zespolonych można zapisać w postaci algebraicznej: $a = a_r + ia_i \in \mathbb{C}$, gdzie $a_r \in \mathbb{R}$ jest częścią rzeczywistą, a $a_i \in \mathbb{R}$ - częścią urojoną. Geometrycznie możemy przedstawić je na płaszczyźnie zespolonej, gdzie część rzeczywista i urojona są jej współrzędnymi, a moduł jest długością wektora wychodzącego od środka układu współrzędnych do punktu przedstawiającego liczbę.

Reprezentacja macierzowa - kilka słów o MatLabie

My jednak pójdziemy o krok dalej i liczby zespolone przedstawimy w postaci macierzy rzeczywistych o wymiarze 2×2 , tzn.

$$a \Rightarrow \begin{pmatrix} a_r & -a_i \\ a_i & a_r \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Można przy tym pokazać, że mnożenie takich macierzy jest przemienne, podobnie jak mnożenie samych liczb zespolonych. Posługując się tym przepisem, również macierze zespolone o wymiarze 2×2 ,

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

można rozszerzyć do macierzy rzeczywistych o wymiarze 4×4 , tzn. $\mathcal{A} \Rightarrow A$, gdzie

$$A = \begin{pmatrix} a_{11r} & -a_{11i} & a_{12r} & -a_{12i} \\ a_{11i} & a_{11r} & a_{12i} & a_{12r} \\ a_{21r} & -a_{21i} & a_{22r} & -a_{22i} \\ a_{21i} & a_{21r} & a_{22i} & a_{22r} \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Dzięki takim zabiegom będziemy mogli obliczyć widmo energetyczne układu dwupoziomowego w zmiennym, okresowym polu elektromagnetycznym. Użyjemy do tego jednego z najlepszych programów komputerowych, będącego interaktywnym środowiskiem do wykonywania zaawansowanych obliczeń naukowych i inżynierskich oraz do tworzenia spektakularnych symulacji komputerowych, o wdzięcznej nazwie - MATLAB. Nazwa programu pochodzi od angielskich słów *MATrix LABoratory* z powodu swojego pierwotnego przeznaczenia do numerycznych obliczeń macierzowych. Obecnie program potrafi znacznie więcej, nie ograniczając się tylko do działań na macierzach. Poza nimi będziemy mieli również do czynienia z kolumnami, które także wypełnione zostaną dwiema liczbami zespolonymi, a następnie rozszerzone do kolumny czterech liczb rzeczywistych.

Własności macierzy zespolonych

Tu pojawia się jednak pytanie: Czy wprowadzone przez nas reprezentacje rzeczywiste zachowują oryginalne działania dla macierzy zespolonych 2×2 ? Sprawdziliśmy to!

Na początek sprawdziliśmy mnożenie dla dwóch dowolnych macierzy zespolonych 2×2 , $\mathcal{A}$ oraz $\mathcal{B}$,

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \mathcal{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

gdzie

$$\mathcal{C} = \mathcal{A} \cdot \mathcal{B} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Korzystając z reprezentacji 4×4 macierzy, co definiuje równanie (2.3), stwierdziliśmy, że prowadzą one do tego samego wyniku co (2.5).

A jak postąpić w przypadku mnożenia macierzy zespolonej 2×2 , $\mathcal{A}$, przez liczbę zespoloną $\alpha \in \mathbb{C}$? Rozszerzając definicję (2.1) do macierzy 4×4 , dostajemy

$$\alpha \Rightarrow \begin{pmatrix} \alpha_r & -\alpha_i & 0 & 0 \\ \alpha_i & \alpha_r & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_r & -\alpha_i \\ 0 & 0 & \alpha_i & \alpha_r \end{pmatrix} = \hat{\alpha}. \quad (2.6)$$

W przypadku mnożenia macierzy przez liczbę, mamy

$$\alpha \cdot \mathcal{A} = \begin{pmatrix} \alpha a_{11} & \alpha a_{12} \\ \alpha a_{21} & \alpha a_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

To samo otrzymaliśmy korzystając z reprezentacji (2.3) oraz (2.6). Ponadto, sprawdziliśmy przemienność odpowiednich macierzy 4×4 ,

$$\hat{\alpha} \cdot A = A \cdot \hat{\alpha}, \quad (2.8)$$

skąd wynika przemienność mnożenia liczb i macierzy.

Korzystając ze wzoru (2.6), zauważmy, że jednostkę urojoną i oraz jej sprzężenie zespolone $-i$ możemy przedstawić w postaci macierzowej jako

$$i \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \mathcal{J}; \quad -i \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = -\mathcal{J}. \quad (2.9)$$

Sprawdziliśmy, że zachowują się one analogicznie do klasycznej liczby urojonej, spełniając następujące własności,

$$(-i) \cdot i = 1 \Rightarrow (-\mathcal{J}) \cdot \mathcal{J} = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

$$i \cdot (-i) = 1 \Rightarrow \mathcal{J} \cdot (-\mathcal{J}) = I, \quad (2.11)$$

$$i \cdot i = -1 \Rightarrow \mathcal{J} \cdot \mathcal{J} = -I, \quad (2.12)$$

$$(-i) \cdot (-i) = -1 \Rightarrow (-\mathcal{J}) \cdot (-\mathcal{J}) = I. \quad (2.13)$$

Poza macierzami kwadratowymi będziemy również pracować z wektorami dwuwymiarowymi

o zespolonych współrzędnych, $\chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$, gdzie χ_ℓ , ($\ell = 1, 2$), są liczbami zespolonymi. Taką kolumnę będziemy reprezentowali kolumną czterech liczb rzeczywistych,

$$\chi \Rightarrow X = \begin{pmatrix} \chi_{1r} \\ \chi_{1i} \\ \chi_{2r} \\ \chi_{2i} \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Pokazaliśmy, że definiując je w taki sposób, możemy bez problemu wykazać korespondencję między macierzami i kolumnami wypełnionymi liczbami zespolonymi lub rzeczywistymi,

$$\mathcal{A} \cdot \chi \Rightarrow A \cdot X, \quad (2.15)$$

czyli

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11r} & -a_{11i} & a_{12r} & -a_{12i} \\ a_{11i} & a_{11r} & a_{12i} & a_{12r} \\ a_{21r} & -a_{21i} & a_{22r} & -a_{22i} \\ a_{21i} & a_{21r} & a_{22i} & a_{22r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_{1r} \\ \chi_{1i} \\ \chi_{2r} \\ \chi_{2i} \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Opisane tu działania zilustrujemy teraz na przykładzie macierzy Pauliego, które są szczególnie ważne dla badań nad układami dwupoziomowymi.

Macierze Pauliego

Macierze Pauliego (oznaczane przez nas jako $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$) są to macierze hermitowskie 2×2 , które wraz z macierzą jednostkową, σ_0 , tworzą bazę w przestrzeni zespolonych macierzy 2×2 ,

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Oznacza to, że dowolną zespoloną macierz 2×2 możemy przedstawić w postaci liniowej kombinacji macierzy σ_ℓ ($\ell = 0, 1, 2, 3$),

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = h_0 \sigma_0 + h_1 \sigma_1 + h_2 \sigma_2 + h_3 \sigma_3 = \sum_{\ell=0}^3 h_\ell \sigma_\ell = \begin{pmatrix} h_0 + h_3 & h_1 - ih_2 \\ h_1 + ih_2 & h_0 - h_3 \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

gdzie $h_\ell \in \mathbb{C}$. Wynika stąd, że zachodzą następujące związki,

$$a_{11} = h_0 + h_3, \quad h_0 = \frac{a_{11} + a_{22}}{2}, \quad (2.19)$$

$$a_{12} = h_1 - ih_2, \quad h_1 = \frac{a_{12} + a_{21}}{2}, \quad (2.20)$$

$$a_{21} = h_1 + ih_2, \quad h_2 = \frac{a_{21} - a_{12}}{2}, \quad (2.21)$$

$$a_{22} = h_0 - h_3, \quad h_3 = \frac{a_{11} - a_{22}}{2}. \quad (2.22)$$

Zauważmy, że macierze (2.17) można przedstawić w postaci rzeczywistych macierzy 4×4 , zgodnie z naszym przepisem (2.3),

$$\sigma_0 \Rightarrow \Sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \sigma_1 \Rightarrow \Sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (2.23)$$

$$\sigma_2 \Rightarrow \Sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_3 \Rightarrow \Sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Z kolei reprezentując liczby zespolone h_ℓ w (2.18) zgodnie z przepisem (2.6), sprawdziliśmy, że równość (2.18) jest spełniona również na gruncie reprezentacji macierzami 4×4 ,

$$A = \hat{h}_0 \Sigma_0 + \hat{h}_1 \Sigma_1 + \hat{h}_2 \Sigma_2 + \hat{h}_3 \Sigma_3 = \sum_{\ell=0}^3 \hat{h}_\ell \Sigma_\ell. \quad (2.25)$$

Na koniec, w ramach zabawy liczbami zespolonymi, podajemy jawną postać przyporządkowania $-i\sigma_\ell \Rightarrow S_\ell$, gdzie S_ℓ są macierzami rzeczywistymi 4×4 postaci

$$S_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}; S_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

$$S_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; S_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Przy ich pomocy, potwierdziliśmy, że dla każdego $\ell = 0, 1, 2, 3$ zachodzi

$$S_\ell = -\mathcal{J} \cdot \Sigma_\ell, \quad (2.28)$$

gdzie $\mathcal{J}$ jest zdefiniowane równaniem (2.9).

Rozdział 3

Równanie układu dwupoziomowego w okresowym polu laserowym

Kilka słów o mechanice kwantowej

W przeciwieństwie do Newtonowskiej mechaniki klasycznej, elektrodynamiki Maxwella czy teorii względności Einsteina, mechanika kwantowa nie posiada jednego twórcy. Pod koniec XIX wieku fizyka klasyczna dysponowała wielkim arsenałem wiedzy, a jednak pozostawały problemy świata mikroskopowego, których nie dawało się rozwiązać za pomocą jej praw. Pracowało nad nimi wielu rozpoznawalnych dziś naukowców, takich jak Planck, wspomniany już Einstein czy Bohr. Badania z początku XX wieku zaowocowały rozwojem tego ważnego działu fizyki, jakim jest mechanika kwantowa.

Wprowadzenie do równania Schrödingera

Podstawę nierelatywistycznej mechaniki kwantowej stanowi równanie Schrödingera. Równanie to pozwala przewidzieć ewolucję kwantowo-mechanicznego stanu układu fizycznego. Dla układu dwupoziomowego równanie to przybiera postać

$$i\hbar\partial_t\chi(t) = H(t)\chi(t), \quad (3.1)$$

gdzie

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \chi_1(t) \\ \chi_2(t) \end{pmatrix}; \quad \chi_\ell(t) \in \mathbb{C}, \quad \ell = 1, 2, \quad (3.2)$$

jest spinorową funkcją falową. Z kolei

$$H(t) = \begin{pmatrix} H_{11}(t) & H_{12}(t) \\ H_{21}(t) & H_{22}(t) \end{pmatrix}; \quad H_{\ell k}(t) \in \mathbb{C}, \quad \ell, k = 1, 2, \quad (3.3)$$

jest hamiltonianem opisującym kwantową dynamikę układu.

Będziemy zakładali, że macierz $H(t)$ jest nieosobliwa dla dowolnego czasu t . Wyznacznik tej macierzy musi być zatem różny od zera. Mechanika kwantowa w ogólności zakłada, iż hamiltonian jest macierzą hermitowską. My jednak nie potrzebujemy tego założenia. Okazuje się bowiem, że w pewnych ważnych problemach fizycznych hamiltonian może być macierzą pseudo-hermitowską.

Zgodnie z rozdziałem 1, operator Hamiltona możemy wyrazić poprzez macierze Pauliego:

$$H(t) = h_0(t)\sigma_0 + h_1(t)\sigma_1 + h_2(t)\sigma_2 + h_3(t)\sigma_3, \quad (3.4)$$

gdzie $h_\ell(t)$, $\ell = 0, 1, 2, 3$ mogą być w ogólności zepolonymi funkcjami czasu.

Przykłady realizacji fizycznych

W zależności od badanego układu fizycznego funkcje $h_\ell(t)$, tworzące operator Hamiltona, przyjmują różne wartości. Oto kilka przykładów układów dwupoziomowych:

1. Krecja par fermionowych zależnym od czasu polem elektrycznym. W takiej sytuacji:

$$h_0(t) = h_1(t) = 0, \quad h_3(t) = \omega(t), \quad h_2(t) = \Omega(t), \quad (3.5)$$

gdzie $\omega(t), \Omega(t) \in \mathbb{R}$. Macierz $H(t)$ jest w tym przypadku hermitowska.

2. Krecja par bozonowych zależnym od czasu polem elektrycznym. Wtedy:

$$h_0(t) = h_2(t) = 0, \quad h_3(t) = \omega(t), \quad h_1(t) = i\Omega(t), \quad (3.6)$$

gdzie $\omega(t), \Omega(t) \in \mathbb{R}$. Układ jest pseudo-hermitowski w takim sensie że

$$\sigma_3 H^\dagger(t) \sigma_3 = H(t). \quad (3.7)$$

3. Krecja par elektron-dziura zależnym od czasu polem elektrycznym w grafenie. W tym przypadku:

$$h_0(t) = h_3(t) = 0 \quad (3.8)$$

oraz $h_1(t), h_2(t) \in \mathbb{R}$. W tej sytuacji hamiltonian jest hermitowski. Dokładniej sytuację tę zbadamy w rozdziale 3.

Widmo kwazienergii kwantowego układu dwupoziomowego w okresowym polu elektrycznym

Obecność okresowego pola elektrycznego oznacza, że $h_\ell(t)$ są funkcjami okresowymi. To znaczy, że istnieje takie dodatnie T , że

$$h_\ell(t + T) = h_\ell(t), \quad (3.9)$$

co implikuje okresowość operatora Hamiltona. Mianowicie zachodzi

$$H(t + T) = H(t). \quad (3.10)$$

Możemy się teraz zastanowić, jaki wpływ ma zależność hamiltonianu od czasu, a w szczególności jego okresowość, na rozwiązania równania Schrödingera. W jaki sposób można je charakteryzować? Do tego posłużymy nam macierz ewolucji czasowej $U(t, t')$, gdzie ogólnie zakładamy, że $t > t'$. Jest to macierz unitarna, pozwalająca przewidzieć stan układu w czasie t jeśli znany był jego stan w czasie t' . Macierz ewolucji spełnia równanie

$$i\hbar \partial_t U(t, t') = H(t)U(t, t') \quad (3.11)$$

z warunkiem początkowym

$$U(t', t') = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

W naszych rozważaniach będziemy przyjmowali, że funkcje $h_\ell(t)$ spełniają wszystkie warunki niezbędne do tego, aby powyższe równanie z warunkiem początkowym w sposób jednoznaczny wyznaczały macierz ewolucji. To znaczy, że jeżeli

$$i\hbar\partial_t U(t, t') = H(t)U(t, t'), \quad U(t', t') = I \quad (3.13)$$

i

$$i\hbar\partial_t U_1(t, t') = H(t)U_1(t, t'), \quad U_1(t', t') = I, \quad (3.14)$$

to

$$U(t, t') = U_1(t, t'). \quad (3.15)$$

Własności macierzy ewolucji

1. Macierz ewolucji $U(t, t')$ spełnia prawo składania:

$$U(t, t') = U(t, t_1)U(t_1, t'), \quad t \geq t_1 \geq t'. \quad (3.16)$$

Obie strony spełniają równanie (3.11) oraz warunek początkowy dla $t = t_1 = t'$.

2. Okresowość w obu argumentach:

$$U(t + T, t' + T) = U(t, t'). \quad (3.17)$$

Powyższa własność wynika z jednoznaczności sposobu wyznaczenia macierzy ewolucji oraz okresowości operatora Hamiltona, tzn.

$$i\hbar\partial_t U(t + T, t' + T) = H(t + T)U(t + T, t' + T) = H(t)U(t + T, t' + T) \quad (3.18)$$

oraz

$$U(t' + T, t' + T) = I. \quad (3.19)$$

3. Z powyższych własności wynika zależność

$$U(t + T, t') = U(t + T, t' + T)U(t' + T, t') = U(t, t')U(t' + T, t'). \quad (3.20)$$

Macierz $U(t' + T, t')$ nazywamy macierzą monodromii i oznaczamy $M(T)$. Będziemy zakładali, że macierz monodromii nie jest osobliwa oraz że posiada dwa wektory własne,

$$\mu_\ell = \begin{pmatrix} \mu_{\ell 1} \\ \mu_{\ell 2} \end{pmatrix}; \quad \mu_{\ell j} \in \mathbb{C}, \quad \ell, j = 1, 2, \quad (3.21)$$

takie, że

$$M(t)\mu_\ell = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_\ell T\right)\mu_\ell. \quad (3.22)$$

Wartości E_ℓ nazywamy kwazienergiami. W ogólności wartości te są liczbami zespolonymi. Natomiast dla układów hermitowskich są rzeczywiste.

Na tym etapie można zacząć się zastanawiać, czy kwazienergje na pewno nie zależą od wyboru warunku początkowego. Aby to pokazać, przyjmijmy, że $t'' > t'$. Wówczas ze wzoru (3.20) wynika, że

$$U(t + T, t'') = U(t, t'')U(t'' + T, t''), \quad (3.23)$$

gdzie $M''(T) = U(t'' + T, t'')$. Podobnie,

$$U(t + T, t') = U(t, t')U(t' + T, t'), \quad (3.24)$$

przy czym $M'(T) = U(t' + T, t')$. Z drugiej strony,

$$U(t + T, t') = U(t + T, t'')U(t'', t'). \quad (3.25)$$

Jeśli zdefiniujemy $S = U(t'', t')$, to powyższą równość możemy zapisać w postaci

$$U(t, t') = U(t, t'')S. \quad (3.26)$$

Zatem

$$U(t + T, t') = U(t + T, t'')S = U(t, t'')M''(T)S = U(t, t')S^{-1}M''(T)S, \quad (3.27)$$

przy czym

$$S^{-1}M''(T)S = M'(T). \quad (3.28)$$

Stąd ostatecznie otrzymujemy

$$SM'(T) = M''(T)S. \quad (3.29)$$

Jeśli μ'_ℓ jest wektorem własnym $M'(T)$ o wartości własnej $\exp(-\frac{i}{\hbar}E_\ell T)$, to $S\mu'_\ell = \mu''_\ell$ jest wektorem własnym $M''(T)$ o tej samej wartości własnej. Dalej będziemy przyjmować, że μ_ℓ jest wektorem własnym macierzy monodromii dla pewnego dowolnie wybranego czasu t' .

Do dalszych rozważań wygodnie jest wprowadzić macierz H_F zwaną hamiltonianem Floquet'a, którą definiuje się następująco:

$$M(T) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_F T\right) \quad (3.30)$$

oraz

$$H_F \mu_\ell = E_\ell \mu_\ell. \quad (3.31)$$

Przyjmujemy, że funkcje $h_\ell(t)$ umożliwiają istnienie takiej macierzy. Twierdzenie Floquet'a pozwala wtedy zapisać macierz ewolucji w postaci

$$U(t, t') = F(t, t') \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_F(t - t')\right), \quad (3.32)$$

gdzie $F(t, t')$ jest macierzą okresową o okresie T , co można łatwo udowodnić rozpisując $U(t + T, t')$ na dwa sposoby:

$$\begin{aligned} U(t + T, t') &= F(t + T, t') \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_F(t + T - t')\right) \\ &= F(t + T, t') \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_F(t - t')\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_F T\right) \\ &= F(t + T, t') \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_F(t - t')\right) M(T) \end{aligned} \quad (3.33)$$

bądź

$$\begin{aligned} U(t+T, t') &= U(t+T, t'+T)M(T) = U(t, t')M(T) \\ &= F(t, t') \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_F(t-t')\right) M(T). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Z tego wynika równość $F(t+T, t') = F(t, t')$.

Zatem dla stanów własnych μ_ℓ ma miejsce zależność:

$$U(t, t')\mu_\ell = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_\ell(t-t')\right) F(t, t')\mu_\ell. \quad (3.35)$$

Zauważmy, że $F(t, t')\mu_\ell$ jest kolumną o okresowych współczynnikach. Wprowadzimy więc nowe oznaczenie $\mu_\ell(t, t') = F(t, t')\mu_\ell$, gdzie

$$\mu_\ell(t, t') = \mu_\ell(t+T, t'). \quad (3.36)$$

Kolumnę tę można rozłożyć w szereg Fouriera:

$$\mu_\ell(t, t') = \sum_{N=-\infty}^{\infty} \mu_{\ell N}(t') \exp\left(-2i\pi N \frac{t}{T}\right). \quad (3.37)$$

Inna postać twierdzenia Floqueta mówi, że rozwiązań układu równań o okresowych współczynnikach można szukać w postaci

$$\chi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_\ell t\right) \sum_{N=-\infty}^{\infty} \chi_{\ell N} \exp(-iN\omega t), \quad (3.38)$$

gdzie $\omega = 2\pi/T$.

Rozdział 4

Grafen w okresowym polu laserowym

Struktura grafenu

Aby zrozumieć wyjątkowe właściwości grafenu warto poznać jego budowę. Jest to pojedyncza, wyizolowana warstwa grafitu, który jest powszechnie używanym i dobrze przebadanym materiałem. Wyglądem przypomina plaster miodu złożony z powtarzających się, heksagonalnych komórek. Taka struktura została opisana w 1924 roku przez J. D. Bernala [2], który zwrócił uwagę na to, że wiązania między kolejnymi jej warstwami są bardzo słabe, a atomy w poszczególnych warstwach są połączone silnymi wiązaniami kowalencyjnymi.

Ponad 20 lat później P. R. Wallace [3] przewidział istnienie grafenu pod względem teoretycznym, co zaskutkowało narodzeniem się w nauce idei wyizolowania pojedynczej jego warstwy. Sceptycznie do tego pomysłu podeszli Landau i Peierls [4, 5], którzy stwierdzili, że taka postać grafitu nie może być termodynamicznie stabilna, więc taki dwuwymiarowy kryształ nie ma prawa istnieć. Późniejsze próby eksperymentalne zdawały się potwierdzać te obawy. Jednak w 2004 roku, wbrew powszechnej opinii, na podstawie wcześniejszej pracy P. R. Wallace'a udało się taką warstwę uzyskać. Już 6 lat później, w 2010 roku, Andre Geim i Konstantin Novoselov [6] dostali Nagrodę Nobla z fizyki za udoskonalenie metody otrzymywania grafenu na drodze eksfoliacji.

Właściwości grafenu

W ostatnich latach badanie grafenu niezaprzeczalnie stało się jednym z najbardziej obiecujących i najpowszechniej obieranych kierunków działalności naukowej na całym świecie. Grafen zyskał na popularności głównie ze względu na szereg niezmiernie ciekawych właściwości i wynikających z nich potencjalnych zastosowań. Należą do nich m.in.:

- dalekozasięgowa, dwuwymiarowa, symetryczna struktura - możliwość pokrywania dużych powierzchni;
- niespotykana wysoka ruchliwość elektronów (135 razy większa niż w krzemie, 25 razy większa niż w GaAs) - dzięki czemu grafen może stać się następcą krzemu w technologiach tranzystorowych;
- 100 razy mocniejsza budowa w porównaniu do stali o tej samej grubości - co otwiera duże perspektywy w zastosowaniach militarnych;

- elastyczność, przezroczystość, wysokie przewodnictwo cieplne i elektryczne - mogące znaleźć zastosowania w nowoczesnych panelach fotowoltaicznych oraz związalnych wyświetlaczach dotykowych;
- przepuszczalność wody i jednocześnie nieprzepuszczalność gazów lub soli - z perspektywą konstrukcji filtrów odsalania wody morkiej oraz czujników nowych generacji.

Taki zestaw cech jest jeszcze bardziej imponujący, jeżeli zauważymy, że mowa tu o niemetalicznym półprzewodniku.

Grafen jako układ dwupoziomowy

Ten wyjątkowy materiał jest tematem wielorakich rozważań eksperymentalnych i teoretycznych [7, 8]. Szczególnie interesującym aspektem badań nad grafenem jest jego struktura pasmowa. W strukturze tej występuje pasmo walencyjne ($E < 0$) i przewodnictwa ($E > 0$), które stykają się w sześciu punktach, zwanych punktami Diraca. Dwa spośród tych punktów (K i K') nie są równoważne. Okazuje się, że dynamika elektronów wokół tych punktów daje się opisać równaniem układu dwupoziomowego wspomnianym uprzednio w rozdziale 2.

Dokładniej, przyjmijmy, że grafen leży w płaszczyźnie (x, y) . Odpowiednie równanie falowe dla grafenu oddziałującego z polem laserowym, wokół punktów Diraca, przyjmuje postać

$$i\hbar\partial_t\psi(x, y, t) = v_F \left[s_x\sigma_x(\hat{p}_x - eA_x(t)) + s_y\sigma_y(\hat{p}_y - eA_y(t)) \right] \psi(x, y, t). \quad (4.1)$$

Tutaj, v_F jest tak zwaną prędkością Fermiego, która wynosi $v_F \approx c/300$. Z kolei $s_x = \pm 1$ oraz $s_y = \pm 1$. W szczególności, dla punktu Diraca K mamy $s_x = s_y = 1$. W przypadku punktu K' , wartości tych współczynników zależą od reprezentacji. Ze względu na tę niejednoznaczność, rachunki numeryczne wykonamy tylko dla punktu K . Ponadto, σ_x oraz σ_y to wprowadzone wcześniej macierze Pauliego (2.17). Operatory pędu wynoszą $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$ oraz $\hat{p}_y = -i\hbar\partial_y$, natomiast $A_x(t)$ i $A_y(t)$ to składowe potencjału wektorowego opisującego pole laserowe. W ogólności, $A_x(t)$ i $A_y(t)$ mogą być dowolnymi funkcjami czasu. Dla naszych celów, nakładamy na nie warunek okresowości,

$$A_j(t + T) = A_j(t), \quad j = x, y, \quad (4.2)$$

gdzie okres T definiuje częstość oscylacji pola, $\omega = 2\pi/T$.

W dalszym ciągu wprowadzamy jednostki:

- energii $E_0 = \hbar\omega$,
- pędu $p_0 = E_0/v_F = \hbar\omega/v_F$.

W badaniach nad grafenem typowo używa się terahercowych (THz) pól laserowych [9]. W przypadku takich pól jednostka energii jest rzędu meV (4 meV dla 1 THz). Z kolei jednostka pędu jest kilka rzędów wielkości mniejsza niż jednostka relatywistyczna $m_e c$ ($2 \times 10^{-5} m_e c$ dla 1 THz). Mimo to w takich warunkach możliwe jest testowanie przewidywań fizyki relatywistycznej. Dla kompletności podamy jeszcze, że w pionierskich badaniach nad otrzymaniem silnych pól terahercowych [10], zmierzono amplitudę pola elektrycznego bliską 1.5×10^7 V/m. To z kolei odpowiada intensywności szczytowej około 3×10^7 W/cm². Z tego rodzaju polami laserowymi będziemy mieć do czynienia w badaniach nad grafenem.

Wprowadzając zmienną bezwymiarową $\phi = \omega t$, równanie (4.1) można przepisać w postaci:

$$i\partial_\phi\psi(x, y, \phi) = \left[s_x\sigma_x(\hat{p}_x - eA_x(\phi))/p_0 + s_y\sigma_y(\hat{p}_y - eA_y(\phi))/p_0 \right] \psi(x, y, \phi). \quad (4.3)$$

W nowej zmiennej, funkcje $A_j(\phi)$, $j = x, y$ są okresowe z okresem 2π . Rozwiązań tego równania szukamy w postaci:

$$\psi(x, y, \phi) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y)\right] \chi(\phi), \quad (4.4)$$

co prowadzi do równania zwyczajnego na $\chi(\phi)$,

$$i\frac{d\chi(\phi)}{d\phi} = \left[s_x\sigma_x(p_x - eA_x(\phi))/p_0 + s_y\sigma_y(p_y - eA_y(\phi))/p_0 \right] \chi(\phi). \quad (4.5)$$

Choć funkcje $A_x(t)$ oraz $A_y(t)$ mogą przyjmować dowolną postać, w dalszej analizie przyjmować będziemy, że opisują one pole bi-chromatyczne. A dokładniej, potencjał wektorowy przyjmiemy w postaci

$$\mathbf{A}(\phi) = \mathbf{A}_1(\phi) + \mathbf{A}_2(\phi), \quad (4.6)$$

przy czym

$$\mathbf{A}_1(\phi) = A_{10} \left(\cos \delta_1 \cos(N_1 \phi) \mathbf{e}_x + \sin \delta_1 \sin(N_1 \phi) \mathbf{e}_y \right), \quad (4.7)$$

$$\mathbf{A}_2(\phi) = A_{20} \left(\cos \delta_2 \cos(N_2 \phi + \delta) \mathbf{e}_x + \sin \delta_2 \sin(N_2 \phi + \delta) \mathbf{e}_y \right). \quad (4.8)$$

Po rozpisaniu na współrzędne, mamy

$$\mathbf{A}(\phi) = A_x(\phi) \mathbf{e}_x + A_y(\phi) \mathbf{e}_y, \quad (4.9)$$

gdzie

$$A_x(\phi) = A_{10} \cos \delta_1 \cos(N_1 \phi) + A_{20} \cos \delta_2 \cos(N_2 \phi + \delta), \quad (4.10)$$

$$A_y(\phi) = A_{10} \sin \delta_1 \sin(N_1 \phi) + A_{20} \sin \delta_2 \sin(N_2 \phi + \delta). \quad (4.11)$$

Parametry tu występujące oznaczają po kolei: A_{j0} amplitudy poszczególnych składowych pola, δ_j ich polaryzacje, N_j definiują harmoniczne pól i mogą przyjmować dowolne wartości naturalne, przy czym $N_1 \neq N_2$, natomiast δ wyznacza względną fazę pól składowych. W kolejnym kroku wprowadzamy wielkości bezwymiarowe: $q_x = p_x/p_0$, $q_y = p_y/p_0$, $\mathcal{A}_{10} = -eA_{10}/p_0$ oraz $\mathcal{A}_{20} = -eA_{20}/p_0$. Wówczas równanie falowe (4.5) przyjmuje postać:

$$\begin{aligned} \frac{d\chi(\phi)}{d\phi} = & -i \left[s_x\sigma_x \left(q_x + \mathcal{A}_{10} \cos \delta_1 \cos(N_1 \phi) + \mathcal{A}_{20} \cos \delta_2 \cos(N_2 \phi + \delta) \right) \right. \\ & \left. + s_y\sigma_y \left(q_y + \mathcal{A}_{10} \sin \delta_1 \sin(N_1 \phi) + \mathcal{A}_{20} \sin \delta_2 \sin(N_2 \phi + \delta) \right) \right] \chi(\phi). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Jest to układ dwóch zespolonych równań zwyczajnych o współczynnikach okresowych z okresem 2π . Zastosowanie znajduje tu zatem ogólny schemat wyznaczania widma kwazienergii, przedstawiony w rozdziale 2. Mianowicie, rozwiązań (4.12) szukamy w postaci

$$\chi(\phi) = \exp(-i\varepsilon\phi) \chi_0(\phi), \quad (4.13)$$

przy czym

$$\chi_0(\phi + 2\pi) = \chi_0(\phi), \quad (4.14)$$

zaś ε jest przeskalowaną (bezwymiarową) kwazienergią,

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}. \quad (4.15)$$

Jak widzimy, potencjał wektorowy wprowadza wiele parametrów. Dlatego w rachunkach zajmujemy się szczególnym przypadkiem pola bi-kołowego. Zdefiniujemy je przy użyciu parametrów: $\delta = 0$, $\delta_1 = \pi/4$ oraz $\delta_2 = \pm\pi/4$. Znak “+” odpowiada sytuacji, gdy oba pola składowe spolaryzowane kołowo kręcą się w tym samym kierunku. Z kolei znak “−” odpowiada sytuacji, gdy pola kręcą się w przeciwnych kierunkach. Poza tym amplitudy pól $\mathcal{A}_{10}$ i $\mathcal{A}_{20}$ a także harmoniczne $N_1 \neq N_2$ mogą przyjmować dowolne wartości.

Tego typu modele matematyczne, jeśli zaaplikowane wprost, mogą stać się prawdziwą udręką dla osoby, która próbuje numerycznie zaimplementować je w docelowo szybko wykonujący się program. Aby tego problemu uniknąć, należy przeformułować go w taki sposób, aby w trakcie rozwiązywania zagadnienia własnego macierzy monodromii, zamiast analizować układ równań różniczkowych, sprowadzić wszystkie obliczenia do liniowych operacji na macierzach. Programem idealnym, bo bardzo dobrze zoptymalizowanym do tego typu rachunków, jest MATLAB.

W rzeczywistości, w trakcie realizacji projektu powstały dwie wersje programu obliczające widmo kwazienergii (oraz stanów własnych im odpowiadających, choć problem ten wykraczał poza ramy tego projektu). W pierwszej wersji rozwiązywany jest układ równań różniczkowych z wykorzystaniem wewnętrznej procedury Matlabowskiej *ode45*. Implementacja ta, choć pozwala wyznaczyć widmo kwazienergii z małym błędem numerycznym, wymaga jednak wykonania długich rachunków numerycznych. W drugiej wersji programu ewolucja czasowa dokonuje się w małych krokach czasowych poprzez mnożenie odpowiednich macierzy ewolucji. Zaletą tego podejścia jest to, że warunek unitarności jest zawsze spełniony oraz rachunki są szybkie. Ujemną stroną jest jego mała dokładność, która zależy od ilości przedziałów czasowych użytych w obliczeniach. W przypadku przedstawionych niżej wyników, obie metody dały praktycznie te same rezultaty.

Widmo kwazienergii elektronów w grafenie

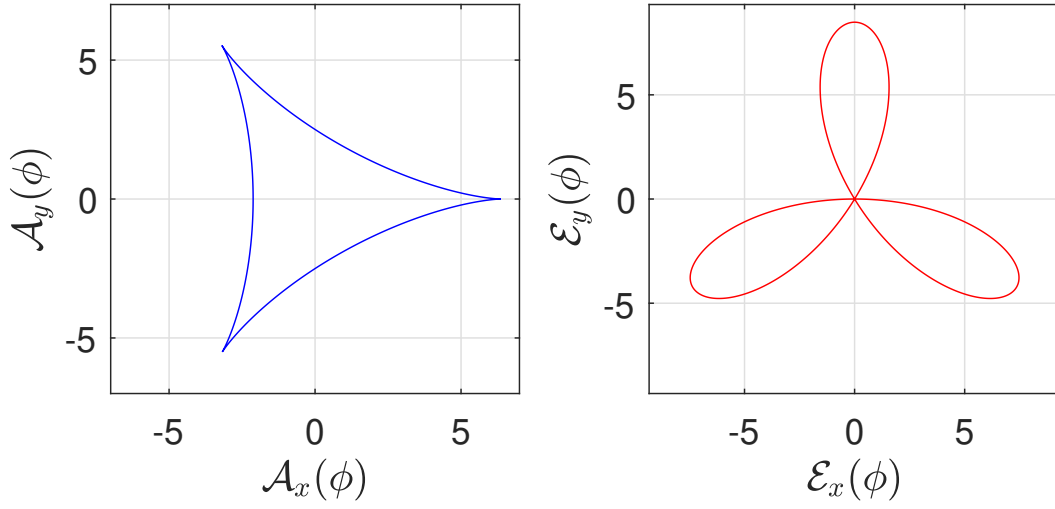
Ilustracje numeryczne wykonane zostały dla grafenu w bi-kołowych polach laserowych, które opisano dokładnie w poprzednim podrozdziale. Dla kompletności, przeskalowany potencjał wybrany został w postaci

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\phi) = & [\mathcal{A}_{10} \cos \delta_1 \cos(N_1\phi) + \mathcal{A}_{20} \cos \delta_2 \cos(N_2\phi + \delta)] \mathbf{e}_x \\ & + [\mathcal{A}_{10} \sin \delta_1 \sin(N_1\phi) + \mathcal{A}_{20} \sin \delta_2 \sin(N_2\phi + \delta)] \mathbf{e}_y. \end{aligned} \quad (4.16)$$

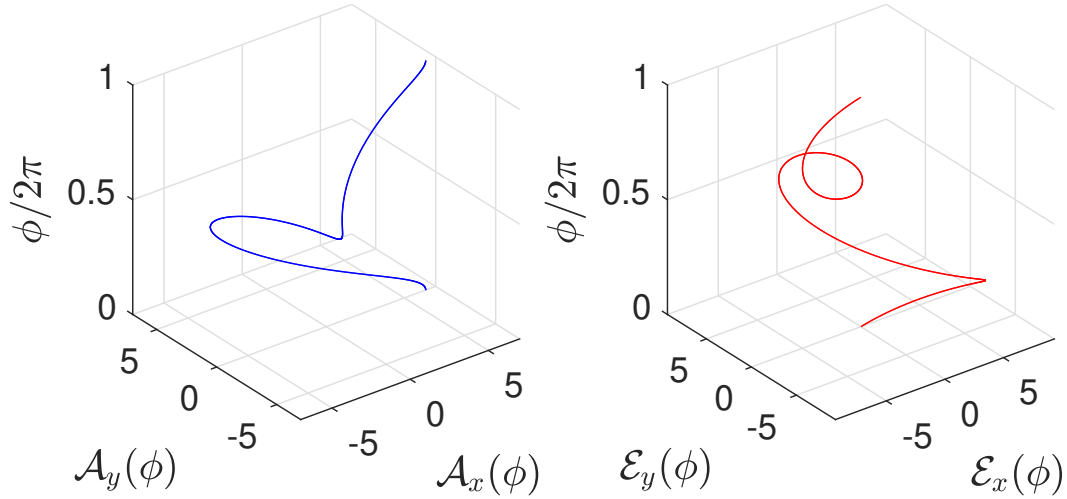
Z kolei przeskalowane pole elektryczne, $\mathcal{E}(\phi) = -\partial_\phi \mathcal{A}(\phi)$,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\phi) = & [\mathcal{A}_{10} N_1 \cos \delta_1 \sin(N_1\phi) + \mathcal{A}_{20} N_2 \cos \delta_2 \sin(N_2\phi + \delta)] \mathbf{e}_x \\ & - [\mathcal{A}_{10} N_1 \sin \delta_1 \cos(N_1\phi) + \mathcal{A}_{20} N_2 \sin \delta_2 \cos(N_2\phi + \delta)] \mathbf{e}_y. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Wybrane tu zostały następujące stałe parametry: $\delta_1 = \pi/4$, $\delta_2 = -\pi/4$, $\delta = 0$, $\mathcal{A}_{10} = 6$ oraz



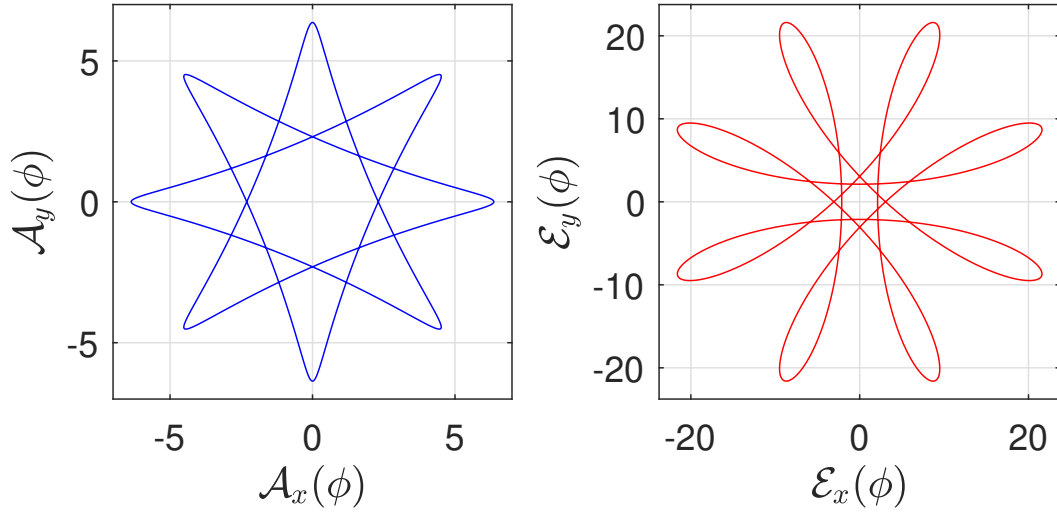
Rysunek 4.1: Przeskalowane potencjał $\mathcal{A}(\phi)$ (lewy panel) i natężenie pola elektrycznego $\mathcal{E}(\phi)$ (prawy panel) rzutowane na płaszczyznę (x, y) dla $\delta_1 = \pi/4$, $\delta_2 = -\pi/4$, $\delta = 0$, $\mathcal{A}_{10} = 6$, $\mathcal{A}_{20} = 3$ i $(N_1, N_2) = (1, 2)$.



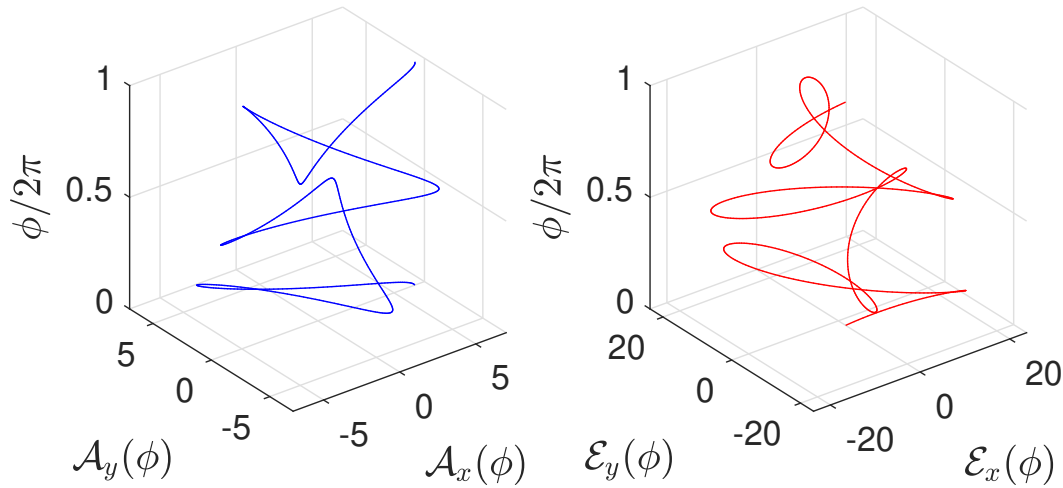
Rysunek 4.2: To samo co na rysunku 4.1, ale zmienność w czasie pól przedstawiona jest jako trójwymiarowa krzywa w układzie, w którym zmienną z jest przeskalowana zmienna czasowa $\phi/2\pi$.

$\mathcal{A}_{20} = 3$. Oznacza to, że obie składowe pola są spolaryzowane kołowo, przeciwnie względem siebie, a stosunek przeskalowanych amplitud to 2:1. Pozostałe parametry pola elektrycznego, (N_1, N_2) , ograniczono do dwóch par: $(1, 2)$ i $(3, 5)$.

Zależności pól dla wybranych par współczynników (N_1, N_2) przedstawiono na rysunkach 4.1, 4.2, 4.3 i 4.4. Widać, że dla $(N_1, N_2) = (1, 2)$ pole ma trzykrotną symetrię obrotową, a dla $(N_1, N_2) = (3, 5)$ ośmiokrotną. Znajduje to również swoje odzwierciedlenie w rozkładzie kwaziennergii. Na rysunkach 4.5, 4.6 i 4.7 przedstawiono kolorowe mapy przeskalowanej kwaziennergii w funkcji przeskalowanych pędów wokół punktu Diraca $\mathbf{p} = \mathbf{0}$. Rysunki te należy rozumieć tak, że odkładamy wartość kwaziennergii jako funkcję składowych pędu, a następnie rzutujemy ten trójwymiarowy wykres na płaszczyznę pędów. Kolor reprezentuje zatem war-



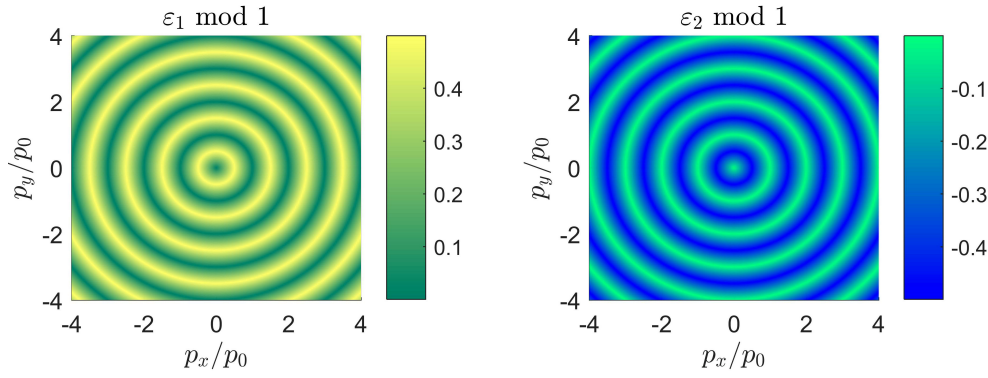
Rysunek 4.3: Przeskalowane potencjał $\mathcal{A}(\phi)$ (lewy panel) i natężenie pola elektrycznego $\mathcal{E}(\phi)$ (prawy panel) zrzutowane na płaszczyznę (x, y) dla $\delta_1 = \pi/4$, $\delta_2 = -\pi/4$, $\delta = 0$, $\mathcal{A}_{10} = 6$, $\mathcal{A}_{20} = 3$ i $(N_1, N_2) = (3, 5)$.



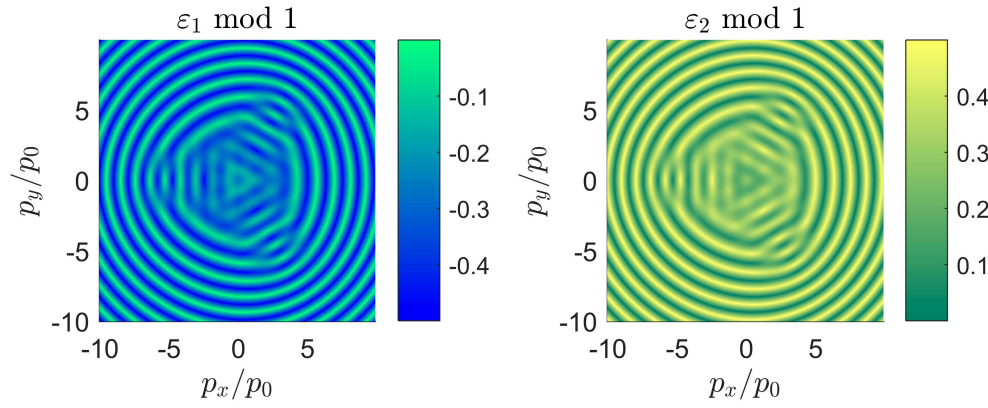
Rysunek 4.4: To samo co na rysunku 4.3, ale zmienność w czasie pól przedstawiona jest jako trójwymiarowa krzywa w układzie, w którym zmienną z jest przeskalowana zmienna czasowa $\phi/2\pi$.

tości przeskalowanej kwazienergii.

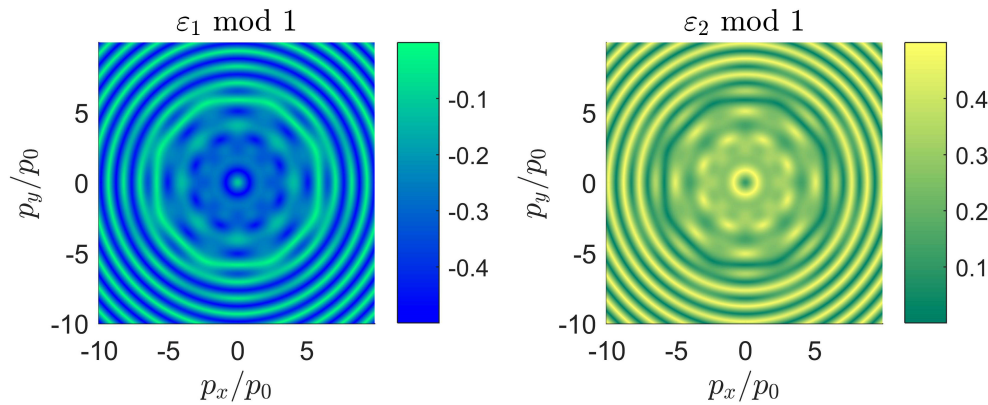
Rysunek 4.5 odpowiada przypadkowi zerowego pola laserowego ($\mathcal{A}_{10} = \mathcal{A}_{20} = 0$) i przedstawia zredukowane do odcinka $[-0.5, 0.5]$ wartości przeskalowanych energii stanów stacjonarnych, tj. stożków $|\mathbf{p}|/p_0$ i $-|\mathbf{p}|/p_0$ (rysunek 4.8). Na rysunku widzimy kołowe pierścienie, których wartości ekstremalne (0 lub ± 0.5) osiągalne są dla połówkowych lub całkowitych wartości $|\mathbf{p}|/p_0$. Odpowiada to sytuacji, gdy różnica energetyczna między pasmami jest całkowitą wielokrotnością energii kwantu pola laserowego $\hbar\omega$. Sytuacjom takim odpowiadają przejścia rezonansowe pomiędzy pasmami, gdy pole laserowe przyjmuje niezerowe wartości. W wyniku takiego oddziaływania w punktach tych dochodzi do rozczepienia widma kwazienergii i pojawiają się niezerowe przerwy energetyczne. Wraz ze wzrostem natężenia pola elektrycznego



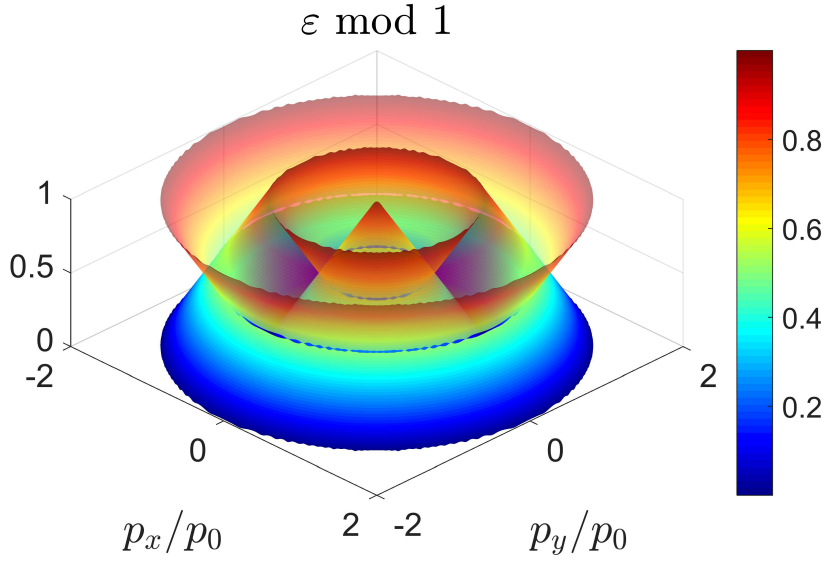
Rysunek 4.5: Rysunek przedstawia kolorowe mapy kwazienergii dla zerowego pola laserowego ($\mathcal{A}_{10} = \mathcal{A}_{20} = 0$). Na rysunkach obserwujemy kołowe pierścienie, których wartości ekstremalne osiągane są dla połówkowych lub całkowitych wartości $|\mathbf{p}|/p_0$ i odpowiadają one przejściom rezonansowym pomiędzy pasmami dla niezerowych pól laserowych.



Rysunek 4.6: Rysunek przedstawia kolorowe mapy kwazienergii dla $(N_1, N_2) = (1, 2)$. Trzykrotna symetria obrotowa (występująca dla pola laserowego, por. rysunek 4.1) pojawia się dla pędów z otoczenia punktu Diraca $(0,0)$.



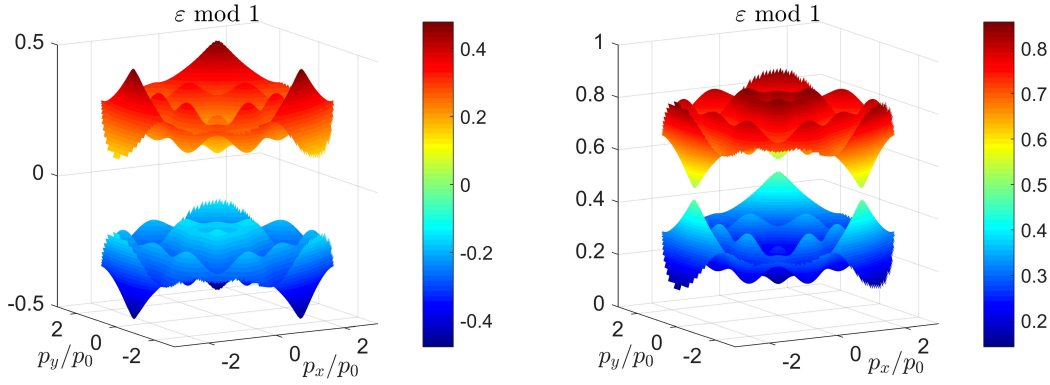
Rysunek 4.7: To samo co na rysunku 4.6, ale dla $(N_1, N_2) = (3, 5)$. Tym razem wyraźnie widzimy ośmiokrotną symetrię obrotową występującą także w zależności czasowej pola laserowego, por. z rysunkiem 4.3.



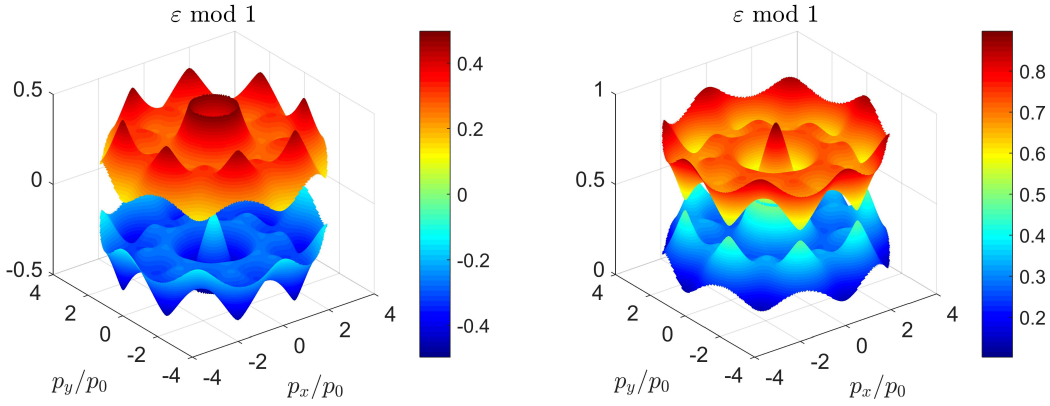
Rysunek 4.8: Rysunek przedstawia widmo kwazienergii dla zerowego pola laserowego, czyli powierzchnie stożków $E_+/\hbar\omega = |\mathbf{p}|/p_0 + n_+$ i $E_-/\hbar\omega = -|\mathbf{p}|/p_0 + n_-$ dla całkowitych n_+ i n_- ograniczone do zakresu $0 \leq E_{\pm}/\hbar\omega \leq 1$. Powierzchnie te przecinają się dla połówkowych lub całkowitych pędów $|\mathbf{p}|/p_0$, co odpowiada całkowitym wartościom $E_+/\hbar\omega - E_-/\hbar\omega$. ‘Strzępy’ pojawiające się w punktach przecięcia i na granicach powierzchni wynikają z niedostatecznie gęsto wybranych wartości pędów w obliczeniach, co podyktowane było czasem ich wykonania.

przerwy te powiększają się i stają się widoczne ‘gołym okiem’ - ich wartość jest większa niż grubość linii na rysunku. Taka sytuacja w pierwszej kolejności zachodzi dla pędów z okolicy punktu Diraca $\mathbf{p} = \mathbf{0}$. Spowodowane jest to tym, że dla takich wartości pędów przejścia rezonansowe wymagają pochłonięcia niewielkiej ilości fotonów z pola laserowego. Oznacza to, że w tej okolicy prawdopodobieństwa przejścia elektronów do pasma przewodnictwa są znacznie większe niż dla pędów odległych od punktu Diraca. Wraz ze wzrostem natężenia pola laserowego struktura przerw i ich rozkład na płaszczyźnie pędowej (p_x, p_y) komplikuje się i przesuwają się ku większym wartościom $|\mathbf{p}|$. Wywołane jest to nieperturbacyjnym oddziaływaniem pola laserowego z elektronami w grafenie, w wyniku czego może również dojść do ‘zamknięcia’ niektórych przerw energetycznych lub do ‘otwarcia’ nowych dla innych wartości pędów. Dla dostatecznie dużych wartości $|\mathbf{p}|$ widmo kwazienergii zawsze przyjmie jednak postać obserwowaną dla zerowego pola laserowego. Bierze się to stąd, że dla dostatecznie odległych od siebie poziomów energetycznych przejścia kwantowe pomiędzy nimi są mało prawdopodobne, gdyż wymagają pochłonięcia dużej ilości fotonów z pola laserowego. Obraz taki jest wyraźnie widoczny na rysunkach 4.6 i 4.7, na których widmo kwazienergii dla dużych $|\mathbf{p}|$ przypomina to obserwowane dla znikającego pola laserowego (rysunek 4.5).

Dla niewielkich pędów, czyli w przybliżeniu takich, że $|\mathbf{p}|/p_0 < \sqrt{\mathcal{A}_{10}^2 + \mathcal{A}_{20}^2}$, widmo kwazienergii jest istotnie zmodyfikowane oddziaływaniem z polem laserowym i przyjmuje symetrię obrotową podobną do tej obserwowanej dla pola laserowego (porównaj z rysunkami 4.1 i 4.3). Podkreśmy, że rozkład przerw energetycznych, a co za tym idzie rozkład dynamicznie generowanych punktów Diraca o niezerowej masie, istotnie zależy od natężeń poszczególnych składowych pola bi-chromatycznego. Dla wybranych przez nas parametrów wyraźnie widzimy



Rysunek 4.9: Trójwymiarowa ilustracja zależności przeskalowanych kwazienergii w funkcji pędów dla opcji $(N_1, N_2) = (1, 2)$. Ponieważ przeskalowane kwazienergije określone są modulo 1, dlatego przedstawiamy dwie wersje przesunięte o 0.5. Dzięki temu wyraźnie widać w widmie trzy punkty Diraca o niezerowej przerwie energetycznej dla niezerowych pędów, dynamicznie wygenerowane polem laserowym. ‘Strzępy’, które pojawiają się na granicy powierzchni kwazienergii spowodowane są niedostatecznie gęsto wybranymi wartościami pędów w obliczeniach.



Rysunek 4.10: To samo co na rysunku 4.9, ale dla opcji $(N_1, N_2) = (3, 5)$. W tym przypadku występuje osiem punktów Diraca o niezerowej przerwie energetycznej.

3 lub 8 takich punktów, rozłożonych symetrycznie na okręgu (rysunki 4.9 i 4.10). Zauważmy również, że dla $(N_1, N_2) = (3, 5)$ w oryginalnym punkcie Diraca dla $|\mathbf{p}| = 0$ pojawia się niewielka przerwa energetyczna, w przeciwieństwie do przypadku $(N_1, N_2) = (1, 2)$, w którym przerwa ta jest duża w skali energetycznej określonej przez kwant energii pola laserowego $\hbar\omega$. Wyjaśnienie tego w sposób intuicyjny jest raczej niemożliwe, ponieważ jest to wynik wysoce nieperturbacyjny. Można się jedynie spodziewać, że dla innych parametrów pola sytuacja mogłaby się odwrócić.

Rozdział 5

Perspektywy dalszych badań

Na zakończenie warto nadmienić, że struktura, lub używając modnego w tym kontekście terminu ‘topologia’, kwazienergii i jej dynamiczna modyfikacja wraz ze zmianą parametrów pola laserowego istotnie wpływa zarówno na rozkład prądów elektrycznych w grafenie, jak i ich zależność czasową. W konsekwencji zjawiska transportu elektronów i dziur oraz generacja wysokich harmoniczných pola promieniowania w grafenie dynamicznie ulegają zmianom wraz ze zmianami konfiguracji pola laserowego. Analiza takich fizycznych, tj. dających się zmierzyć doświadczalnie, następstw wykracza poza zakres niniejszego projektu, lecz byłaby szalenie ciekawą i logiczną kontynuacją rozpoczętych tu badań.

Bibliografia

- [1] M. Willers, *Algebra, the x and y of everyday math*. New York, NY, U.S.A.: Fall River, 2009.
- [2] J. D. Bernal, “The structure of graphite,” *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 106, p. 749, 1924.
- [3] P. R. Wallace, “The band theory of graphite,” *Physical Review*, vol. 71, p. 622, 1947.
- [4] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*. Oxford, Wielka Brytania: Pergamon, 1980.
- [5] R. E. Peierls, “Bemerkungen über umwandlungstemperatur,” *Helvetica Physica Acta*, vol. 7, p. 81, 1934.
- [6] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, “Electric field effect in atomically thin carbon films,” *Science*, vol. 306, p. 666, 2004.
- [7] B. Duplantier, V. Rivasseau, and J.-N. Fuchs, *Dirac Matter*. Cham, Szwajcaria: Birkhauser, 2017.
- [8] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “The electronic properties of graphene,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 81, p. 109, 2009.
- [9] H. A. Hafez, X. Chai, A. Ibrahim, S. Mondal, D. Férachou, X. Ropagnol, and T. Ozaki, “Intense terahertz radiation and their applications,” *Journal of Optics*, vol. 18, p. 093004, 2016.
- [10] D. You, R. R. Jones, P. H. Bucksbaum, and D. R. Dykaar, “Generation of high-power sub-single-cycle 500-fs electromagnetic pulses,” *Optics Letters*, vol. 18, p. 290, 1993.