

Klein-Tunneln in Graphen

Bachelor-Arbeit im Fach Physik



an der Universität Greifswald
am 12. Juli 2012
eingereicht von

Christian Schulz

1. Gutachter: Prof. Dr. H. Fehske
2. Gutachter: Prof. Dr. K. Fesser

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation	1
2	Klein-Tunneln	2
2.1	Dirac-Gleichung	2
2.2	Tunneleffekt	3
3	Dirac-Elektronen in Graphen	6
4	Streuung an ebenen Stufenpotentialen	8
4.1	Lösungen der Weyl-Gleichung	8
4.2	Erwartungswerte und Erhaltungssätze	9
4.3	Abwesenheit von Rückstreuung	10
4.4	Streuung an der Potentialstufe	11
4.4.1	Reflexions- und Brechungsgesetz	11
4.4.2	Reflexions- und Transmissionskoeffizient	12
4.4.3	Energie kleiner als Stufenhöhe	12
4.4.4	Energie größer als Stufenhöhe	13
4.5	Streuung an der Potentialbarriere	13
4.5.1	Energie kleiner als Stufenhöhe	14
4.5.2	Energie größer als Stufenhöhe	15
5	Streuung an einem kreisförmigen Stufenpotential	16
5.1	Lösungen der Weyl-Gleichung in Polarkoordinaten	16
5.2	Radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte und Streueffizienz	18
5.2.1	Berechnung der Streukoeffizienten	18
5.2.2	Radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte j_r^{T} der gestreuten Welle	20
5.2.3	Streueffizienz Q	21
5.3	Ergebnisse	22
5.3.1	Streueffizienz Q	22
5.3.2	Winkelverteilung	23
5.3.3	Detailstruktur der Streuung	24
6	Zusammenfassung	30
A	Streuung eines Schrödinger-Elektrons am kreisförmigen Stufenpotential	31
A.1	Lösungen der Schrödinger-Gleichung	31
A.2	Berechnung der Streukoeffizienten	32
A.3	Radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte j_r^{T} der gestreuten Welle	33
A.4	Streueffizienz Q	33

1 Motivation

Der Tunneleffekt eines nichtrelativistischen Teilchens durch eine Potentialbarriere war einer der ersten Anwendungen der Quantenmechanik und ermöglichte die Erklärung des Alpha-Zerfalls [1] und der Feldemission [2]. Er erlaubt den Übergang eines Teilchens zwischen zwei klassisch erlaubten Bereichen durch eine klassisch undurchdringbare Barriere. Die Transmissionswahrscheinlichkeit für das Teilchen nimmt dabei exponentiell mit der Höhe und Breite der Barriere ab. Für eine Stufe, d.h. eine unendlich breite Barriere, verschwindet die Transmission entsprechend der Erwartung, dass ein Teilchen nur endlich tief in einen klassisch verbotenen Bereich eindringen kann [3, 4]. Im Gegensatz dazu fand Oskar Klein 1929 für massive Elektronen, die der relativistischen Dirac-Gleichung genügen und mit einer Energie E auf eine Potentialstufe der Höhe $P > E$ treffen, dass ein Bruchteil der Elektronen für $mc^2 < E < P - mc^2$ transmittiert wird [5]. Die Beobachtung dieses Klein-Tunneleffektes ist nur möglich, wenn der Potentialabfall $\approx mc^2$ über der Compton-Wellenlänge $\frac{\hbar}{mc}$ ist [6]. Dies kann beispielsweise durch ein starkes elektrisches Feld der Größenordnung $10^{16} \frac{\text{V}}{\text{cm}}$, oder durch andere, experimentell schwer umsetzbare Bedingungen realisiert werden. Aus diesem Grund war ein direkter experimenteller Nachweis des Klein-Tunnelns lange Zeit nahezu unmöglich [6].

In Graphen - einer zweidimensionalen Schicht aus Kohlenstoffatomen, die ein Bienenwabengitter bilden - haben niederenergetische Elektronen eine lineare Dispersion. Zustände mit Energie $E > 0$ gehören dabei zum Leitungsband und Zustände mit $E < 0$ zum Valenzband. Dieses pseudorelativistische Verhalten der Elektronen ermöglicht die Beschreibung niederenergetischer Elektronen mit einer masselosen Dirac-Gleichung, in der ein Pseudospin die Zugehörigkeit des Elektrons zu einem der beiden Untergitter des Bienenwabengitters angibt. Die Existenz oszillatorischer Zustände mit negativer Energie und die Erhaltung des Pseudospins ermöglichen das Klein-Tunneln in Graphen, welches eine große Ähnlichkeit mit dem Klein-Tunneln massiver Elektronen aufweist [5, 6, 7]. Erste experimentelle Hinweise für das Klein-Tunneln in Graphen wurden bereits beobachtet [8, 9, 10, 11].

In dieser Arbeit geben wir einen Überblick über die Klein-Tunneleffekte in Graphen an ebene Stufen und Barrieren [6, 7] und betrachten den bisher nicht untersuchten Fall des Klein-Tunnelns an einer kreisförmigen Potentialstufe.

Die Arbeit ist folgendermaßen gegliedert. In Abschnitt 2 zeigen wir die charakteristischen Effekte für das Klein-Tunneln massiver Elektronen mit einer zweidimensionalen Dirac-Gleichung. Abschnitt 3 führt die Beschreibung niederenergetischer Elektronen in Graphen mit einer masselosen Dirac-Gleichung ein. In Abschnitt 4 besprechen wir die Streuung von Elektronen in Graphen an ebenen Stufenpotentialen und geben einen detaillierten Überblick über die auftretenden Klein-Tunneleffekte. In Abschnitt 5 untersuchen wir die Klein-Tunneleffekte an einer kreisförmigen Potentialstufe. Abschnitt 6 gibt eine Zusammenfassung der Ergebnisse.

2 Klein-Tunneln

Als Erstes werden wir mit Blick auf das Klein-Tunneln in Graphen das ursprünglich formulierte Problem des Klein-Tunnelns rekapitulieren [5, 12]. Dazu muss zunächst eine Vorbetrachtung der Dirac-Gleichung und dem dazugehörigen Wahrscheinlichkeitsstrom vorgenommen werden [13].

2.1 Dirac-Gleichung

Für ein freies relativistisches Teilchen gilt die Energie-Impuls-Beziehung

$$E^2 = m^2 + \mathbf{p}^2. \quad (2.1)$$

Die quantenmechanische Beschreibung eines relativistischen Spin 1/2 - Teilchens gelingt mittels der Dirac-Gleichung, deren Form analog zur Schrödinger-Gleichung durch

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_{\text{Dirac}} \psi \quad (2.2)$$

gegeben ist. Damit Lorentz-Kovarianz gesichert ist, muss H_{Dirac} linear in \mathbf{p} sein. Es bietet sich daher der Ansatz

$$H_{\text{Dirac}} \psi = (-i \boldsymbol{\alpha} \nabla + \beta m) \psi = E \psi \quad (2.3)$$

an, in dem $\boldsymbol{\alpha}$ und β noch unbestimmte Größen sind. Diese lassen sich unter Ausnutzung der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung (2.1) bestimmen. Einerseits gilt wegen Gleichung (2.1)

$$H_{\text{Dirac}}^2 \psi = \mathbf{p}^2 + m^2 = - \sum_{k=1}^3 \partial_k^2 + m^2, \quad (2.4)$$

wobei $\partial_k = \frac{\partial}{\partial x_k}$. Andererseits gilt wegen Gleichung (2.3)

$$H_{\text{Dirac}}^2 \psi = - \sum_k \alpha_k^2 \partial_k^2 - \sum_{k < l} (\alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k) \partial_k \partial_l - im \sum_k (\alpha_k \beta + \beta \alpha_k) \partial_k + m^2 \beta^2. \quad (2.5)$$

Durch den Vergleich von Gleichung (2.5) mit Gleichung (2.4) folgen nun Bedingungen an α_k und β :

$$\alpha_k^2 = 1, \quad \{\alpha_k, \alpha_l\} = 0 \quad \text{für } k \neq l, \quad \{\alpha_k, \beta\} = 0, \quad \beta^2 = 1, \quad (2.6)$$

wobei $\{a, b\} = ab + ba$ der Antikommutator ist. Diese Bedingungen können nicht durch komplexe Zahlen erfüllt werden. Es lässt sich zeigen, dass die einfachsten Formen von α_k und β vierdimensionale, hermitesche Matrizen sind, die in verschiedenen Darstellungen formuliert werden können [13]. In diesem Fall ist ψ ein Vektor mit 4 Einträgen und wird Bispinor genannt. Mit Hilfe der γ -Matrizen $\gamma^0 = \beta$ und $\gamma^k = \beta \alpha_k$ ist es möglich, die Dirac-Gleichung (2.2) in eine kovariante Form zu bringen. Mit $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ und der Einstein-Summenkonvention ergibt sich die kovariante Form der Dirac-Gleichung:

$$(i \gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi = 0. \quad (2.7)$$

Diese Formulierung der Dirac-Gleichung ist unabhängig von der gewählten Darstellung.

Für die weiteren Berechnungen ist es notwendig, die Wahrscheinlichkeitsdichte und die Wahrscheinlichkeitsstromdichte eines Dirac-Teilchens zu definieren. Adjungieren von Gleichung (2.7) und anschließende Multiplikation mit γ^0 von rechts ergibt den Ausdruck

$$i \left(\partial_\mu \psi^\dagger \right) \gamma^0 \gamma^\mu + m \psi^\dagger \gamma^0 = 0. \quad (2.8)$$

Dabei wurden die Identitäten $(\gamma^k)^\dagger = -\gamma^k$ und $(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0$ benutzt. Multipliziert man Gleichung (2.7) mit $\psi^\dagger \gamma^0$ von links und Gleichung (2.8) mit ψ von rechts, ergibt die Summation beider erhaltenen Gleichungen unter Ausnutzung der Produktregel den Ausdruck $0 = \partial_\mu (\psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \psi)$. Jetzt kann die Viererstromdichte

$$j^\mu = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \psi \quad (2.9)$$

definiert werden, welche die Kontinuitätsgleichung $0 = \partial_\mu j^\mu$ erfüllt. Dabei stellen $j^0 = \psi^\dagger \psi$ die Wahrscheinlichkeitsdichte und $j^k = \psi^\dagger \alpha_k \psi$ mit $k = 1, 2, 3$ die Komponenten der Wahrscheinlichkeitsstromdichte dar.

In Hinblick auf die Analyse des Klein-Tunnels in Graphen ist es angebracht, schon jetzt die zweidimensionale Formulierung der Dirac-Gleichung zu verwenden. Wird die z -Richtung als dritte Raumdimension vernachlässigt, folgt aus Gleichung (2.3) der Zusammenhang

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = (\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + m\beta) \psi. \quad (2.10)$$

Es werden also 3 Matrizen α_x , α_y , β gesucht, welche die Bedingungen (2.6) erfüllen. Für die Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

gelten die Beziehungen

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \quad \{\sigma_x, \sigma_y\} = \{\sigma_y, \sigma_z\} = \{\sigma_z, \sigma_x\} = 0. \quad (2.12)$$

Wenn $\alpha_x = \sigma_x$, $\alpha_y = \sigma_y$ und $\beta = \sigma_z$ gesetzt werden, entsprechen die Bedingungen (2.12) gerade den Bedingungen (2.6). Gleichung (2.10) lässt sich jetzt schreiben als

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = (\sigma_x p_x + \sigma_y p_y + m\sigma_z) \psi, \quad (2.13)$$

wobei ψ ein Vektor mit 2 Einträgen ist. Die entsprechende Eigenwert-Gleichung der Energie lautet

$$(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y + m\sigma_z) \psi = E\psi. \quad (2.14)$$

Mit der Ersetzung $\beta = \sigma_z$ und $\alpha_k = \sigma_k$ mit $k = 1, 2$ ergibt sich im zweidimensionalen Fall die Wahrscheinlichkeitsstromdichte zu

$$\mathbf{j} = \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi. \quad (2.15)$$

2.2 Tunneleffekt

Mit den bisherigen Ergebnissen sind wir nun in der Lage, die Streuung eines relativistischen Elektrons der Masse m an einem Stufenpotential der Form

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ V_0 & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (2.16)$$

mit $V_0 > 0$ zu untersuchen [5, 12]. Der Einfachheit halber soll das Elektron senkrecht auf die Potentialstufe einfallen, d.h. $\mathbf{p} = (p, 0)$ für $x < 0$.

Unter Berücksichtigung eines Potentials $V(x)$ in der Eigenwertgleichung (2.14) ergeben sich mit $\psi = (\psi_1, \psi_2)$ nach Ausmultiplikation der Matrizen die beiden Gleichungen

$$-i \frac{d}{dx} \psi_2 = [E - V(x) - m] \psi_1, \quad -i \frac{d}{dx} \psi_1 = [E - V(x) + m] \psi_2, \quad (2.17)$$

Die Form des Potentials trennt den Raum in zwei Bereiche I und II. In Raumbereich I gilt die Dispersion $E^2 = m^2 + k^2$ und die Lösung schreibt sich als Überlagerung der einfallenden Welle ψ_e und der gestreuten Welle ψ_r , d.h. $\psi_I = \psi_e + r\psi_r$. In II gilt $(E - V_0)^2 = m^2 + q^2$ und die Lösung ist die transmittierte Welle, $\psi_{II} = t\psi_t$. Dabei sind die komplexen Koeffizienten r und t über die Stetigkeitsbedingung für ψ an der Stelle $x = 0$ bestimmt.

Es sei angemerkt, dass q eine positive reelle Größe ist, solange $|V_0| > E \pm m$. Für diesen Fall existieren oszillatorische Zustände unterhalb der Potentialstufe. Ist jedoch $|V_0| < E \pm m$, wird q imaginär und die Wellenlösung ist exponentiell abklingend. Für diesen Fall tritt Totalreflexion auf und der Transmissionskoeffizient verschwindet. Im Folgenden wird der interessantere Fall $V_0 > E + m$ angenommen.

Der Ansatz für ψ_e lautet

$$\psi_e = \begin{pmatrix} 1 \\ B \end{pmatrix} e^{ikx}. \quad (2.18)$$

Nach Einsetzen von Gleichung (2.18) in den Gleichungen (2.17) ergeben sich die beiden Gleichungen $kB = (E - m)$ und $k = (E + m)B$, aus denen

$$B = \pm \sqrt{\frac{E - m}{E + m}} = \pm \gamma. \quad (2.19)$$

folgt. Setzt man diesen Zusammenhang in die zweite Gleichung von (2.17) ein, ergibt sich

$$\frac{\pm k}{\sqrt{E^2 - m^2}} = 1. \quad (2.20)$$

Damit lässt sich die Lösung in Raumbereich I angeben als

$$\psi_I = \begin{pmatrix} 1 \\ \gamma \end{pmatrix} e^{ikx} + r \begin{pmatrix} 1 \\ -\gamma \end{pmatrix} e^{-ikx}, \quad \gamma = \sqrt{\frac{E - m}{E + m}}. \quad (2.21)$$

Der Ansatz für ψ_t lautet

$$\psi_t = \begin{pmatrix} 1 \\ D \end{pmatrix} e^{iqx}. \quad (2.22)$$

Ein analoges Vorgehen wie oben führt auf die Gleichung $\mp q = \left((E - V_0)^2 - m^2 \right)$ und die Lösung für den Raumbereich II lautet demnach

$$\psi_t = \begin{pmatrix} 1 \\ -1/\delta \end{pmatrix} e^{iqx}, \quad \delta = \sqrt{\frac{V_0 - E - m}{V_0 - E + m}}. \quad (2.23)$$

Die Berechnung der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten würde an dieser Stelle in der Schrödinger-Quantenmechanik über Stetigkeitsbedingungen der Wellenfunktionen und ihrer Ableitungen erfolgen, da die Schrödinger-Gleichung eine Differentialgleichung zweiter Ordnung ist [3, 4]. Hier genügt jedoch die Forderung nach der Stetigkeit der Wellenfunktionen, da die Dirac-Gleichung eine Differentialgleichung erster Ordnung ist [13]. Durch die zwei Einträge des Vektors ψ ergeben sich dann zwei Bestimmungsgleichungen für r und t . Die Stetigkeit der Wellenfunktionen ψ_I und ψ_{II} an der Stelle $x = 0$ liefert die Bedingung

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \gamma \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} 1 \\ -\gamma \end{pmatrix} = t \begin{pmatrix} 1 \\ -1/\delta \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Nach Lösen des entstehenden Gleichungssystems ergibt sich der Reflexionskoeffizient zu

$$R = |r|^2 = \left(\frac{1 + \gamma\delta}{1 - \gamma\delta} \right)^2 > 1. \quad (2.25)$$

Die bisherigen Annahmen führen zu einem $R > 1$, was einer Erzeugung von Elektronen entspricht. Um dieses unphysikalische Ergebnis korrigieren zu können, betrachte man die Gruppengeschwindigkeit v_G unterhalb der Potentialstufe:

$$v_G = \left(\frac{dq}{dE} \right)^{-1} = \frac{q}{E - V_0}. \quad (2.26)$$

Solange $q > 0$ ist offensichtlich $v_G < 0$, d.h. der Elektronenstrom unterhalb der Stufe zeigt nach links. Wenn q durch $-q$ substituiert wird, schreibt sich die Lösung der transmittierten Welle als

$$\psi_t = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/\delta \end{pmatrix} e^{-iqx} \quad (2.27)$$

und der Reflexionskoeffizient lautet

$$R = \left(\frac{1 - \gamma\delta}{1 + \gamma\delta} \right)^2 < 1. \quad (2.28)$$

Für den Fall $V_0 \rightarrow \infty$ ergibt sich daraus

$$R_\infty = \frac{E - k}{E + k}. \quad (2.29)$$

Solange $V_0 > E + m$ gilt, können die Elektronen die Potentialstufe mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit durchtunneln - selbst dann, wenn V_0 einen unendlich großen Wert annimmt. Dieses Verhalten ist auf die Existenz oszillatorischer Zustände mit negativer Energie zurückzuführen und steht im Gegensatz zur Schrödinger-Quantenmechanik, in der unterhalb eines Potentials nur abklingende Wellenlösungen existieren. Auch die Tatsache, dass unterhalb der Potentialstufe die Phasengeschwindigkeit der Gruppengeschwindigkeit entgegengesetzt ist, ist ungewöhnlich. Dieses Verhalten des Elektrons ist charakteristisch für den Klein-Tunneleffekt und zeigt sich, wie wir später sehen werden, auch in Graphen.

3 Dirac-Elektronen in Graphen

Es folgt nun eine effektive Beschreibung der niederenergetischen Elektronen in Graphen durch die Dirac-Gleichung [6, 7, 12, 14]. Mit dieser werden wir später in der Lage sein, den Klein-Tunneleffekt in Graphen zu analysieren.

Graphen ist eine zweidimensionale Schicht aus Kohlenstoffatomen. Die Atome sind in einem hexagonalen Gitter angeordnet, welches einem Dreiecksgitter mit zwei-atomiger Basis entspricht. Das Gitter lässt sich also in zwei Untergitter A und B zerlegen, wobei jedes Atom aus dem einen Untergitter drei nächste Nachbarn aus dem anderen Untergitter besitzt (siehe *Abbildung 3.1*).

In Graphen hybridisieren das 2s- und zwei der drei 2p-Orbitale eines Kohlenstoffatoms zu sp^2 -Orbitalen, während das dritte 2p-Orbital nicht hybridisiert und stattdessen eine delokalisierte π -Bindung ausbildet. An den Bindungen zwischen den Kohlenstoffatomen sind demnach nur die sp^2 -Orbitale beteiligt. Die π -Bindungs-Orbitale stehen senkrecht zur Gitterebene und entsprechen den Leitungselektronen, die für die weitere Analyse von Bedeutung sein werden. Aufgrund der Existenz der Untergitter kann ein π -Bindungs-Elektron dem Untergitter A oder B zugehörig sein. Dieser Untergitter-Freiheitsgrad wird durch eine Pseudospin-Quantenzahl σ charakterisiert und ist nicht mit dem Spin des Elektrons zu verwechseln, der im Folgenden vernachlässigt werden soll.

Den Leitungselektronen ist es erlaubt, von dem momentan besetzten Kohlenstoffatom zu einem der drei benachbarten Kohlenstoffatome mit der Sprungamplitude $t \approx 3\text{eV}$ zu springen. Zum Auffinden der Dispersionsrelation dieser Elektronen lässt sich das *tight-binding-model* verwenden [15]. Damit ergibt sich [7]

$$E = \pm t \left[1 + 4\cos^2(k_y a) + 4\cos(k_y a) \cos(k_x \sqrt{3}a) \right], \quad (3.30)$$

wobei $a = 2.46\text{\AA}$ die Gitterkonstante, also den Abstand zweier benachbarter Atome eines Untergitters, bezeichnet. Der Abstand zweier benachbarter Kohlenstoffatome im Bienenwabengitter ist durch $\frac{a}{\sqrt{3}}$ gegeben. In *Abbildung 3.2* ist Gleichung (3.30) für die erste Brillouin-Zone graphisch dargestellt [7]. Es sind sechs Verbindungsstellen von Leitungs- und Valenzband zu erkennen, die im Folgenden als Dirac-Punkte bezeichnet werden. Weiter existieren zwei inäquivalente Dirac-Punkte K und K'. Für den Fall des undotierten Graphens befindet sich die Fermi-Energie E_F auf Höhe der Dirac-Punkte, also bei $E = 0$. Zudem ist für diesen Fall das Valenzband voll mit Elektronen besetzt und das Leitungsband leer.

Zur Beschreibung der niederenergetischen Elektronen muss die Dispersion in der Nähe eines Dirac-Punktes gefunden werden. Für den Fall $E \rightarrow 0$ nimmt Gleichung (3.30) nach

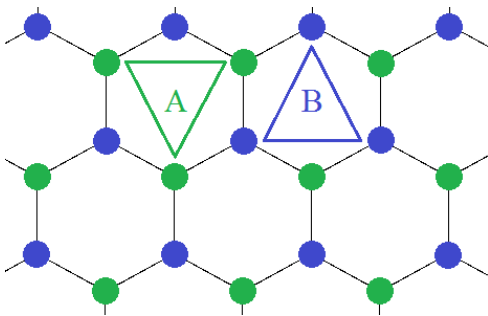


Abbildung 3.1: Atomgitter von Graphen. Das Gitter besteht aus 2 Untergittern A und B.

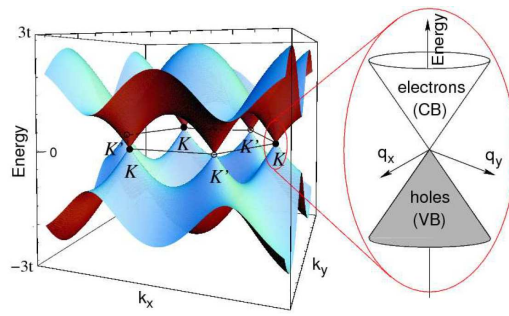


Abbildung 3.2: Bandstruktur von Graphen. Vergrößert dargestellt ist die lineare Dispersion am Dirac-Punkt.

Entwicklung die Form

$$E = \pm v_F k \quad (3.31)$$

an. Die Energie der Elektronen am Dirac-Punkt ist also linear von der Wellenzahl abhängig. Der entstehende Dirac-Kegel des K-Punktes ist in *Abbildung 3.2* vergrößert dargestellt. Die lineare Dispersion hat zur Folge, dass die effektive Masse des Elektrons verschwindet,

$$m = \frac{d^2 k}{dE^2} = 0. \quad (3.32)$$

Da die Elektronen in Graphen eine Pseudospin-Quantenzahl σ besitzen und in der Nähe des Dirac-Punktes masselos sind, weisen sie dort ein pseudorelativistisches Verhalten auf. Die effektive Beschreibung dieser Elektronen muss daher durch die Dirac-Gleichung erfolgen. Ausgehend von Gleichung (2.14) lautet die Dirac-Gleichung mit $v_F \equiv 1$ und Gleichung (3.32)

$$H\psi = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{k}\psi = E\psi, \quad (3.33)$$

wobei $\psi = (\psi_A, \psi_B)$. Gleichung (3.33) wird auch als Weyl-Gleichung bezeichnet. Die Indizes der Eingänge ψ_A und ψ_B korrespondieren zu den entsprechenden Untergittern A und B. Es sei angemerkt, dass für die Dirac-Punkte K und K' jeweils eine Gleichung gemäß (3.33) gültig ist. Im Fall kleiner Energien genügt es, sich bei der Beschreibung der Elektronen auf einen Dirac-Punkt zu beschränken. Dieses Vorgehen ist auch bei Berücksichtigung eines Potentials legitim, solange dieses schwach über der Gitterkonstante a variiert, da dann der Streueffekt zwischen K und K' vernachlässigt werden kann [7]. Bei Berücksichtigung eines sich über a schwach ändernden Potentials $V(x)$ in Gleichung (3.33) kann ausgenutzt werden, dass dieses gleichermaßen auf ψ_A und ψ_B wirkt. Somit ist $V(x)$ im Untergitterraum diagonal und Gleichung (3.33) schreibt sich als

$$H\psi = [\boldsymbol{\sigma}\mathbf{k} + V(x)]\psi = E\psi. \quad (3.34)$$

Diese Dirac-Gleichung für masselose Elektronen ist der Ausgangspunkt für die Untersuchung von Klein-Tunneln in Graphen.

4 Streuung an ebenen Stufenpotentialen

Wir analysieren nun mit Hilfe der Gleichung (3.34) die Streuung eines masselosen Dirac-Elektrons an stückweise konstanten Potentialen $V(x)$ [6, 7, 12].

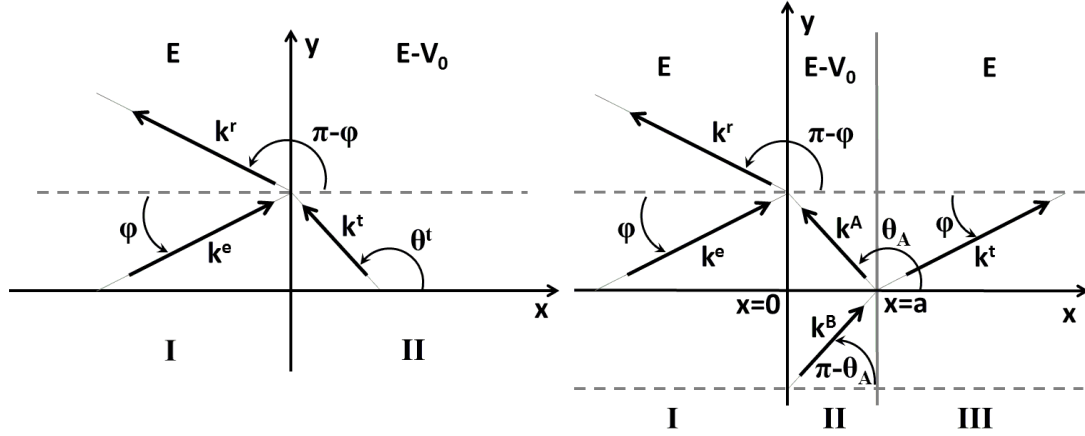


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der Wellenzahlvektoren der Wellenfunktionen in den verschiedenen Raumbereichen des Stufenpotentials (links) und der Potentialbarriere (rechts).

4.1 Lösungen der Weyl-Gleichung

Um Reflexions- und Transmissionskoeffizienten wie in Abschnitt 2.2 berechnen zu können, müssen zunächst die Lösungen der Weyl-Gleichung (3.34) gefunden werden. Unter Benutzung von Polarkoordinaten lautet Gleichung (3.34) bei Anwesenheit eines konstanten Potentials V_0 in Matrixform

$$\begin{pmatrix} V_0 & ke^{-i\varphi} \\ ke^{i\varphi} & V_0 \end{pmatrix} \psi = E\psi, \quad (4.1)$$

wobei $\mathbf{k} = k(\sin\varphi, \cos\varphi)$. Zum Lösen dieser Eigenwert-Gleichung bietet sich der Ansatz einer ebenen harmonischen Welle

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = e^{ik_y y} e^{ik_x x} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

an. Im Folgenden sei k_y eine reelle positive Größe. Es lässt sich eine Fallunterscheidung in oszillierende und abklingende Wellenlösungen vornehmen.

Für die oszillierenden Lösungen gilt $k_x^2 > 0$. Aus (4.1) resultieren zwei Eigenwerte $k_+ = E - V_0$ und $k_- = V_0 - E$ mit den zwei normierte Eigenvektoren

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\varphi} \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Hier gibt A die Fläche des Integrationsgebiets an, die im Folgenden 1 gesetzt wird. Mit dem Bandindex $\alpha = \text{sgn}(E - V_0)$ lässt sich abkürzend schreiben:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

mit $k = \alpha(E - V_0)$ und $E_{\text{kin}} = \alpha\sqrt{k_x^2 + k_y^2}$.

Für die abklingenden Lösungen gilt $k_x^2 < 0$, daher ist $k_x = \pm i\kappa$, wobei $\kappa \in \mathbb{R}^+$. Setzt man

dies in Gleichung (4.4) ein, ergeben sich nach Vereinfachung die Lösungen

$$\psi \sim e^{ik_y y} e^{-\kappa x} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha i \sqrt{\frac{k_y + \kappa}{k_y - \kappa}} \end{pmatrix}, \quad \psi \sim e^{ik_y y} e^{\kappa x} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha i \sqrt{\frac{k_y - \kappa}{k_y + \kappa}} \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Falls $k_x^2 = -k_y^2$ wird $E_{\text{kin}} = 0$ und es gilt $k_x = \pm i k_y$. Für diesen Sonderfall führt die Lösung der Eigenwert-Gleichung (4.1) auf

$$\psi \sim e^{ik_y y} e^{-k_y x} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \psi \sim e^{ik_y y} e^{k_y x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

4.2 Erwartungswerte und Erhaltungssätze

Der Geschwindigkeitsoperator lässt sich als Zeitableitung des Ortsoperators definieren. Im Heisenberg-Bild gilt

$$\mathbf{v} = \frac{d}{dt} \mathbf{r} = i[H, \mathbf{r}] = \boldsymbol{\sigma}. \quad (4.7)$$

Stellt $|\mathbf{k}, \alpha\rangle$ den Eigenzustand der Eigenwert-Gleichung $H|\mathbf{k}, \alpha\rangle = E|\mathbf{k}, \alpha\rangle$ mit $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}, \alpha \rangle$ dar, so ist der Erwartungswert der Geschwindigkeit

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \langle \alpha, \mathbf{k} | \mathbf{v} | \mathbf{k}, \alpha \rangle = \int \psi^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \psi(\mathbf{r}) d^2 r. \quad (4.8)$$

Mit Gleichung (4.4) folgt

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \alpha \frac{\mathbf{k}}{k} \underbrace{\int d^2 r}_{=A \equiv 1} = \alpha \frac{\mathbf{k}}{k}. \quad (4.9)$$

Der Geschwindigkeitsvektor des Elektrons ist also entweder parallel oder antiparallel zum Wellenzahlvektor, je nachdem ob es sich im Leitungs- oder Valenzband befindet (siehe *Abbildung 4.2*).

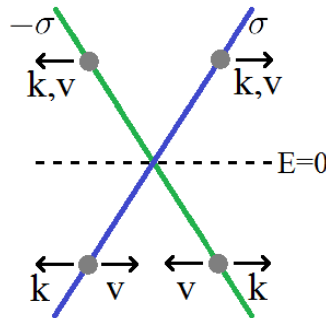


Abbildung 4.2: Vergrößerung eines Dirac-Kegels. Die Zugehörigkeit des Elektrons zum einem der Untergitter ist farblich gekennzeichnet und korrespondiert zu einer Pseudospin-Quantenzahl σ .

Da das Potential nicht von der Zeit abhängen soll, ist die Energie eine Erhaltungsgröße. Desweiteren soll das Potential nur über eine räumliche Dimension variieren: $V = V(x)$. In der klassischen Mechanik entspricht dies der Situation, bei der die Lagrange-Funktion unter y -Translation invariant ist. Aus diesem Grund stellt k_y eine Erhaltungsgröße dar, wie sich auch nach dem Auswerten der Heisenberg-Bewegungsgleichung,

$$\frac{d}{dt} k_y = i[H, k_y] = i[V(x), k_y] = 0, \quad (4.10)$$

herausstellt. Weiterhin ist wegen $\nabla \mathbf{j} = 0$ der Wahrscheinlichkeitsstrom in x -Richtung erhalten,

$$j_x = \text{const.} \quad (4.11)$$

Die Erhaltungssätze werden wichtig sein, wenn die Transmissions- und Reflexionskoeffizienten berechnet werden.

4.3 Abwesenheit von Rückstreuung

Unter Benutzung der bisherigen Ergebnisse lässt sich zeigen, dass die Transmissionswahrscheinlichkeit eines masselosen Dirac-Elektrons bei senkrechtem Einfall auf ein Potential der Form $V(x)$ stets 1 ergibt. Im Folgenden werden wir diskutieren, aus welchen Gründen die Rückstreuung für diesen Fall ausbleibt und wie dieses Verhalten mit der Helizität und der Erhaltung des Pseudospins in Zusammenhang steht [7, 12, 13].

Der Helizitätsoperator ist definiert als

$$\hat{h} = \frac{\boldsymbol{\sigma} \mathbf{k}}{k} \quad (4.12)$$

und entspricht der Projektion des Pseudospins (allg. Teilchenspin) auf die Bewegungsrichtung des Teilchens. Demnach existieren zwei mögliche physikalische Zustände, je nachdem ob der Pseudospin entlang oder entgegen der Bewegungsrichtung des Teilchens gerichtet ist. Aus Gleichung (3.33) ist ersichtlich, dass \hat{h} gerade dem reduzierten freien Hamiltonoperator $\hat{h} = H/k$ entspricht und die Eigenwertgleichung von \hat{h} lautet

$$\hat{h}\psi_{\pm} = \pm\psi_{\pm}. \quad (4.13)$$

Die Eigenwerte von \hat{h} sind ± 1 und entsprechen dem Bandindex α . Da dieser für die einfallende und gestreute Welle gleich ist, ist die Helizität im entsprechenden Raumbereich eine Erhaltungsgröße. Falls nun Rückstreuung bei einem Einfallswinkel von $\varphi = 0$ eintreten soll, muss sich der Impulsvektor \mathbf{p} umkehren. Der Pseudospin $\boldsymbol{\sigma}$ hat sich dann ebenso umzukehren, da die Helizität eine Erhaltungsgröße ist,

$$\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p} \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{\sigma} \rightarrow -\boldsymbol{\sigma}. \quad (4.14)$$

Es bleibt zu prüfen, ob der Pseudospin eine Erhaltungsgröße ist. Wenn dies der Fall ist, wird keine Rückstreuung auftreten, da dann eine Umkehrung des Impulsvektors ausbleibt. Die zeitliche Ableitung des Pseudospins σ_x in x -Richtung ist bei Berücksichtigung eines Potentials $V(x)$ im Heisenbergbild gegeben als

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\sigma_x &= i[H, \sigma_x] \\ &= i \underbrace{[k_x \sigma_x, \sigma_x]}_{=0} + i [k_y \sigma_y, \sigma_x] + i \underbrace{[V(x), \sigma_x]}_{=0} \\ &= 2k_y \sigma_z. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Hierbei wurde die Identität

$$[\sigma_i, \sigma_k] = 2i\varepsilon_{ikl}\sigma_l \quad (4.16)$$

ausgenutzt, wobei ε_{ikl} das Levi-Cevita-Symbol

$$\varepsilon_{ikl} = \begin{cases} 1 & \text{für gerade Permutationen von } 1, 2, 3 \\ -1 & \text{für ungerade Permutationen von } 1, 2, 3 \\ 0 & \text{für mindestens zwei gleiche Indizes} \end{cases} \quad (4.17)$$

darstellt und über doppelt auftretende Indizes summiert wurde. Bei senkrechtem Einfall mit $k_y = 0$ ergibt sich die zeitliche Änderung des Erwartungswertes zu

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_x \rangle = \langle \psi(0) | \underbrace{2k_y(t)}_{=0} \sigma_z(t) | \psi(0) \rangle = 0. \quad (4.18)$$

Damit ist gezeigt, dass der Pseudospin erhalten ist und bei senkrechtem Einfall Rückstreuung ausbleibt.

Jetzt lässt sich auch verstehen, weshalb die x -Komponente des Wellenzahlvektors unterhalb des Potentials der x -Komponente der Gruppengeschwindigkeit entgegengesetzt ist (Vgl. Abschnitt 2.2). Wegen Gleichung (4.7) fordert die Erhaltung des Pseudospins gleichzeitig die Erhaltung der Geschwindigkeit (in Einklang mit Abwesenheit von Rückstreuung). Für ein einfallendes Elektron mit positivem σ_x wird demnach unterhalb des Potentials dessen Gruppengeschwindigkeit in die positive x -Richtung zeigen. In *Abbildung 4.2* ist erkennbar, dass sich für diesen Fall die x -Komponente des Wellenzahlvektors umkehrt (siehe blauer Ast).

4.4 Streuung an der Potentialstufe

Es soll nun die Streuung eines masselosen Dirac-Elektrons an einem Potential der Form

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } x > 0 \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad (4.19)$$

mit $V_0 > 0$ untersucht werden [6, 7, 12].

4.4.1 Reflexions- und Brechungsgesetz

Analog wie in Abschnitt 2.2 trennt das Potential den Raum in zwei Bereiche I und II (Vgl. *Abbildung 4.1*). Trifft die Elektronenwelle in Raumbereich I mit $E > 0$ unter einem Winkel φ auf die Potentialstufe, dann gilt für den entsprechenden Wellenzahlvektor \mathbf{k}^e der Zusammenhang

$$\mathbf{k}^e = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

Da k_y eine Erhaltungsgröße ist, kann sich der Wellenzahlvektor der gestreuten Welle \mathbf{k}^r von \mathbf{k}^e nur in der x -Komponente unterscheiden. Wegen der Erhaltung der Energie muss daher $k_x^r = -k_x^e$ gelten. Der zugehörige Reflexionswinkel wird mit θ_r bezeichnet. Desweiteren gilt in Raumbereich II mit dem Bandindex α die Dispersion $k^t = \alpha(E - V_0)$ und das transmittierte Elektron nimmt einen Winkel θ_t zur x -Achse ein,

$$\mathbf{k}^r = \begin{pmatrix} -k_x \\ k_y \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \cos\theta_r \\ \sin\theta_r \end{pmatrix}, \quad \mathbf{k}^t = \begin{pmatrix} q_x \\ k_y \end{pmatrix} = \alpha(E - V_0) \begin{pmatrix} \cos\theta_t \\ \sin\theta_t \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Aus der Erhaltung von k_y folgen durch Vergleich von Gleichung (4.21) mit Gleichung (4.20) Reflexions- und Brechungsgesetz:

$$\theta_r = \pi - \varphi, \quad E \sin\varphi = \alpha(E - V_0) \sin\theta_t. \quad (4.22)$$

Werden nun die Energien E und $E - V_0$ mit den Brechungsindizes n_1 und n_2 in Verbindung gebracht, zeigen die Gleichungen aus (4.22) eine Analogie zu dem Reflexions- und Brechungsgesetz der Optik [16]. Charakteristisch für die 'Optik' der Elektronen in Graphen ist, dass gemäß dieser Entsprechung der Brechungsindex n_2 für $\alpha = -1$ einen negativen Wert annimmt. Dies verursacht den Effekt, dass unterhalb der Potentialstufe der Wellenzahlvektor der Gruppengeschwindigkeit entgegengesetzt ist (Vgl. *Abbildung 4.1*). Aufgrund der Analogie lässt sich weiterhin vermuten, dass für die Streuung der Elektronen in Graphen kritische Winkel φ_c existieren, für die Totalreflexion auftreten kann.

4.4.2 Reflexions- und Transmissionskoeffizient

Zum Auffinden des Reflexionskoeffizienten R und des Transmissionskoeffizienten T kann wie in Abschnitt 2.2 vorgegangen werden. Die Wellenfunktionen für die einzelnen Raumbereiche lauten (Vgl. *Abbildung 4.1*)

$$\psi_{\text{I}} = e^{ik_y y} \left[e^{ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} + r e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \right], \quad (4.23)$$

$$\psi_{\text{II}} = t e^{ik_y y} e^{iq_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha e^{i\theta_t} \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Durch das Auswerten der Stetigkeitsbedingung $\psi_{\text{I}}(x=0) = \psi_{\text{II}}(x=0)$ ergeben sich aus den Komponenten der Wellenfunktionen zwei Bestimmungsgleichungen für die Koeffizienten r und t :

$$1 = t - r, \quad e^{i\varphi} = r e^{-i\varphi} + \alpha t e^{i\theta_t}. \quad (4.25)$$

Die Erhaltung des Wahrscheinlichkeitsstromes j_x verlangt, dass $j_x^e + j_x^r = j_x^t$. Mit Gleichung (2.15) folgt daraus

$$1 = |r|^2 + \alpha \frac{\cos\theta_t}{\cos\varphi} |t|^2. \quad (4.26)$$

Dieser Ausdruck erlaubt wegen $1 = R + T$ folgende Identifikation des Reflexions- und Transmissionskoeffizienten:

$$R = |r|^2, \quad T = \alpha \frac{\cos\theta_t}{\cos\varphi} |t|^2. \quad (4.27)$$

Da $\alpha = \pm 1$, sind zwei Fälle bezüglich der Energie zu unterscheiden.

4.4.3 Energie kleiner als Stufenhöhe

Für $E < V_0$ ist $\alpha = -1$ und man erhält mit θ_t aus Gleichung (4.22) und der Substitution $\varepsilon = \frac{E}{V_0}$

$$T = -\frac{\cos\theta_t \cos\varphi}{\sin^2\left(\frac{\varphi+\theta_t}{2}\right)}, \quad \theta_t = \arcsin\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon-1}\sin\varphi\right) + \pi. \quad (4.28)$$

In *Abbildung 4.3* ist $T(\varphi)$ für unterschiedliche Werte von ε aufgetragen. Der Abbildung ist zu entnehmen, dass für alle Kurven mit wachsendem Betrag von φ die Transmissionswahrscheinlichkeit abnimmt. An der Stelle $\varphi = 0$ ist das Potential transparent: Dort hat T sein Maximum mit $T = 1$. Für die Kurven mit $\varepsilon < \frac{1}{2}$ verschwindet T ab einem Winkel von $\varphi = \pm\frac{\pi}{2}$, da dann die einfallende Elektronenwelle nicht mehr am Potential gestreut wird. Ist $\varepsilon > \frac{1}{2}$, existiert ein kritischer Winkel $\pm\varphi_c$, ab dem das Elektron totalreflektiert wird. Wie sich später zeigen wird, liegt der Grund für die Existenz dieses Totalreflexionswinkels darin, dass für Winkel $|\varphi| > |\varphi_c|$ nur noch exponentiell abklingende Wellen unterhalb des Potentials existieren (Vgl. Abschnitt 4.5.1). Da die Potentialstufe eine unendlich große Ausdehnung besitzt, wird die transmittierte Wellenfunktion im Unendlichen auf Null sinken und der Transmissionskoeffizient verschwinden. Der Betrag von φ_c folgt aus dem Brechungsgesetz (4.22) mit $\theta_t = \frac{\pi}{2}$,

$$\sin\varphi_c = \frac{V_0 - E}{E} = \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon}. \quad (4.29)$$

Die Bedingung für die Existenz von φ_c ist $E > \frac{V_0}{2}$ bzw. $\varepsilon > \frac{1}{2}$, da sonst $\sin\varphi_c > 1$.

Es lässt sich für einige Grenzfälle T analytisch angeben:

$$T \xrightarrow{E \ll V_0} \frac{2\cos\varphi}{1 + \cos\varphi}, \quad T \xrightarrow{E \rightarrow \frac{V_0}{2}} \cos^2\varphi, \quad T \xrightarrow{E \rightarrow V_0} \begin{cases} 1 & \text{für } \varphi = 0 \\ 0 & \text{für } \varphi \neq 0 \end{cases}. \quad (4.30)$$

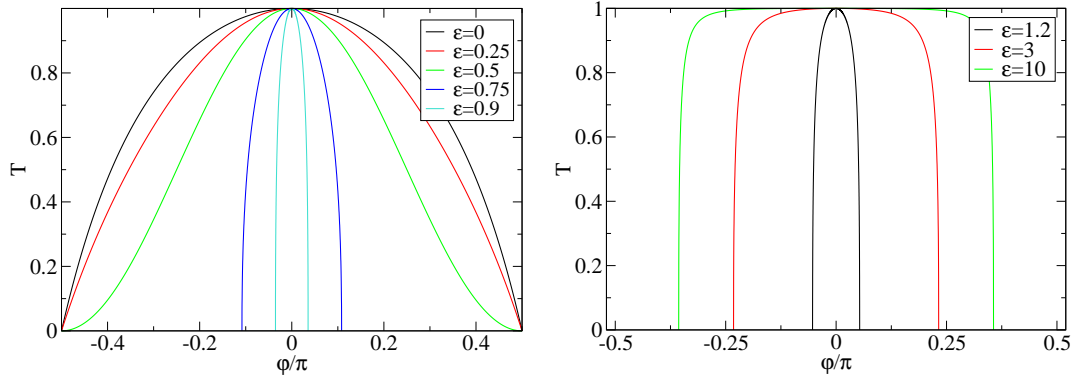


Abbildung 4.3: Transmissionskoeffizient T für eine Potentialstufe ($V_0 > 0$) in Abhängigkeit des Einfallswinkels φ für verschiedene Werte von $\varepsilon = \frac{E}{V_0}$ mit $\alpha = -1$ (links) und $\alpha = 1$ (rechts).

4.4.4 Energie größer als Stufenhöhe

Für $E > V_0$ ist $\alpha = 1$ und man erhält

$$T = \frac{\cos\theta_t \cos\varphi}{\cos^2\left(\frac{\varphi+\theta_t}{2}\right)}, \quad \theta_t = \arcsin\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon-1}\sin\varphi\right). \quad (4.31)$$

Abbildung 4.3 zeigt erneut, dass die Potentialstufe bei $\varphi = 0$ unabhängig von ε transparent ist. Mit steigendem Betrag von φ sinkt der Transmissionskoeffizient bis zu einem kritischen Winkel $|\varphi_c|$ auf den Wert 0. Dieser Totalreflexionswinkel ist durch die Gleichung

$$\sin\varphi_c = \frac{\varepsilon-1}{\varepsilon} \quad (4.32)$$

bestimmt, die sich wie in Abschnitt 4.4.3 finden lässt. Alle Kurven besitzen einen Totalreflexionswinkel, da $V_0 > 0$ die einzige Bedingung für die Existenz von φ_c ist. Für den Grenzfalle $E \gg V_0$ gilt unabhängig vom Winkel $T = 1$.

4.5 Streuung an der Potentialbarriere

Wir wollen nun die Streuung an einem Potential der Form

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } 0 < x < a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.33)$$

mit $V_0 > 0$ untersuchen [6, 7, 12].

Die Vorgehensweise zur Berechnung von R und T ist die Gleiche wie in Abschnitt 4.4. Das Potential trennt den Raum in drei Bereiche mit den entsprechenden Wellenzahlvektoren \mathbf{k}^e und \mathbf{k}^r in Raumbereich I, \mathbf{k}^A und \mathbf{k}^B in Raumbereich II, sowie \mathbf{k}^t in Raumbereich III (Vgl. Abbildung 4.1). Unter Benutzung des Reflexionsgesetzes und der Erhaltung der Energie ergeben sich die Wellenfunktionen zu

$$\psi_{\text{I}} = e^{ik_y y} \left[e^{ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} + r e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \right], \quad (4.34)$$

$$\psi_{\text{II}} = e^{ik_y y} \left[A e^{iq_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha e^{i\theta_A} \end{pmatrix} + B e^{-iq_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha e^{i(\pi-\theta_A)} \end{pmatrix} \right], \quad (4.35)$$

$$\psi_{\text{III}} = t e^{ik_y y} e^{ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (4.36)$$

wobei die Koeffizienten r , t , A und B aus der Stetigkeit der Wellenfunktionen an den Stellen $x = 0$ und $x = a$ bestimmt werden können.

4.5.1 Energie kleiner als Stufenhöhe

Das Auswerten der Stetigkeitsbedingungen $\psi_{\text{I}}(x = 0) = \psi_{\text{II}}(x = 0)$ und $\psi_{\text{II}}(x = a) = \psi_{\text{III}}(x = a)$ führt auf 4 Bestimmungsgleichungen für r , A , B und t . Löst man das entstandene Gleichungssystem, erhält man mit $\alpha = -1$ den Ausdruck

$$t = \frac{-\cos\varphi \cos\theta_A}{\sin^2\left(\frac{\varphi+\theta_A}{2}\right) - \cos^2\left(\frac{\varphi-\theta_A}{2}\right) e^{2iq_x a}}. \quad (4.37)$$

Für den Transmissionskoeffizienten ergibt sich damit

$$T = |t|^2 = \frac{\cos^2\varphi \cos^2\theta_A}{\cos^2\varphi \cos^2\theta_A \cos^2(q_x a) + \sin^2(q_x a) (1 + \sin\theta_A \sin\varphi)^2}. \quad (4.38)$$

Dabei sind θ_A und q_x noch unbestimmte Größen, die über das Brechungsgesetz gefunden werden müssen. Dazu betrachte man die Wellenzahlvektoren

$$\mathbf{k}^e = E \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{pmatrix}, \quad \mathbf{k}^A = -(E - V_0) \begin{pmatrix} \cos\theta_A \\ \sin\theta_A \end{pmatrix}. \quad (4.39)$$

Aus der Erhaltung von k_y folgt das Brechungsgesetz $E \sin\varphi = -(E - V_0) \sin\theta_A$, womit θ_A bestimmt ist zu

$$\theta_A = \arcsin\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon - 1} \sin\varphi\right) + \pi. \quad (4.40)$$

Für q_x gilt wegen Gleichung (4.39)

$$q_x = -(E - V_0) \cos\theta_A. \quad (4.41)$$

Das Einsetzen von Gleichung (4.40) in Gleichung (4.41) ergibt mit $\varepsilon = \frac{E}{V_0}$ den Ausdruck

$$q_x = -V_0 \sqrt{1 - 2\varepsilon + \varepsilon^2 \cos^2\varphi}. \quad (4.42)$$

Mit den Gleichungen (4.38), (4.40) und (4.42) lässt sich T in Abhängigkeit von φ für verschiedene Werte von ε darstellen (siehe *Abbildung 4.4*). Dabei wurde der Wert von $V_0 a / 2\pi$ festgelegt zu $V_0 a / 2\pi = 4.8$. Für die Kurven mit $\varepsilon < \frac{1}{2}$ verschwindet T ab einem Winkel von $\varphi = \pm \frac{\pi}{2}$, da dann die Elektronenwelle nicht mehr am Potential gestreut wird. Für $\varepsilon > \frac{1}{2}$ existieren wie schon bei der Potentialstufe kritische Winkel φ_c , die sich bestimmen lassen, indem die Bedingung für exponentiell abklingende Wellen $q_x^2 < 0$ mit Gleichung (4.42) ausgewertet wird. Es ergibt sich

$$\sin\varphi_c = \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon}, \quad (4.43)$$

also dieselbe Bestimmungsgleichung wie für die Potentialstufe (4.29). Der Unterschied zur Potentialstufe liegt hier in der Tatsache, dass die Potentialbarriere eine endliche Ausdehnung besitzt und diese von dem Elektron deshalb auch oberhalb des kritischen Winkels mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit durchtunnelt wird. Für die Potentialbarriere existiert daher kein Totalreflexionswinkel¹.

¹In *Abbildung 4.4* ist der Transmissionskoeffizient nur bis zu einem kritischen Winkel (falls dieser existiert) gezeichnet, da der Verlauf der Kurve oberhalb des kritischen Winkels von untergeordneter Bedeutung ist.

Weiter kann man der *Abbildung 4.4* entnehmen, dass bei $\varphi = 0$ der Transmissionskoeffizient für alle Kurven den Wert 1 annimmt. Das Elektron wird bei senkrechtem Einfall perfekt transmittiert. Für die Kurve mit $\varepsilon = 0.35$ sinkt T mit steigendem Betrag von φ zunächst, nimmt dann jedoch bei einem bestimmten Winkel $|\varphi|$ wieder den Wert 1 an. Offensichtlich existieren für bestimmte Werte von ε und $V_0 a/2\pi$ Winkel φ_F , bei denen eine Resonanz auftritt. Diese Resonanzen sind auf stehende Wellen unterhalb der Potentialbarriere zurückzuführen, die gewissermaßen als ein Fabry-Pérot-Interferometer fungiert. Die Resonanzwinkel φ_F lassen sich finden, indem die Bedingung für stehende Wellen $q_x a = n\pi$ mit $n = 1, 2, \dots$ mit Gleichung (4.42) ausgewertet wird. Es ergibt sich

$$|\varphi_F| = \arccos \left(\frac{1}{\varepsilon} \sqrt{\left(\frac{n\pi}{V_0 a} \right)^2 - 1 + 2\varepsilon} \right). \quad (4.44)$$

Die Bedingung für die Existenz von $|\varphi_F|$ ist

$$n^2 < \left(\frac{(\varepsilon - 1) V_0 a}{\pi} \right)^2. \quad (4.45)$$

Es lässt sich für einige Grenzfälle T analytisch angeben:

$$T \xrightarrow{E \ll V_0} \frac{\cos^2 \varphi}{1 - \sin^2 \varphi \cos^2(q_x a)}, \quad T \xrightarrow{E \rightarrow V_0} \frac{\cos^2 \varphi}{\cosh^2(k_y a) - \sin^2 \varphi}. \quad (4.46)$$

4.5.2 Energie größer als Stufenhöhe

Für diesen Fall ist $\alpha = 1$ und es ergibt sich nach einer analogen Rechnung

$$\theta_A = \arcsin \left(\frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon} \sin \varphi \right), \quad (4.47)$$

während in T lediglich die Substitution $\theta_A \rightarrow -\theta_A$ vorgenommen werden muss. In *Abbildung 4.4* ist $T(\varphi)$ für $\varepsilon = 1.2$ und $V_0 a/2\pi = 4.8$ dargestellt. Der kritische Winkel ist durch die Gleichung

$$\sin \varphi_c = \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon} \quad (4.48)$$

bestimmt, der sich wie in Abschnitt 4.5.1 finden lässt. Alle Kurven mit $\alpha = 1$ besitzen einen kritischen Winkel, da $V_0 > 0$ die einzige Bedingung für die Existenz von φ_c ist. Für den Grenzfall $E \gg V_0$ ergibt sich dieselbe Gleichung, wie für den Grenzfall $E \ll V_0$.

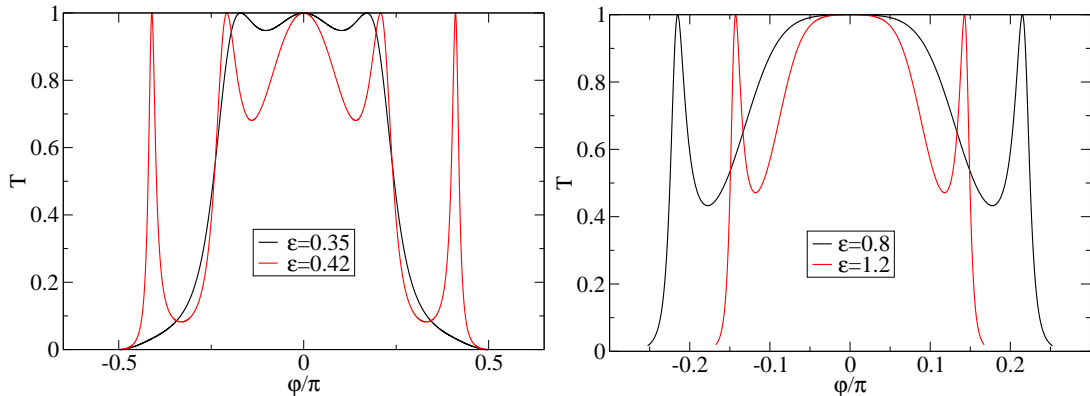


Abbildung 4.4: Transmissionskoeffizient T für eine Potentialbarriere in Abhängigkeit vom Einfallswinkel φ für verschiedene Werte von $\varepsilon = \frac{E}{V_0}$ mit $V_0 a/2\pi = 4.8$.

5 Streuung an einem kreisförmigen Stufenpotential

Bisher wurde die Streuung masseloser Dirac-Elektronen an ebenen Stufen der Form $V(x)$ untersucht. Die Existenz oszillatorischer Zustände unterhalb des Potentials ermöglichte dabei das Klein-Tunneln, welches durch Effekte wie der perfekten Transmission bei senkrechtem Einfall und Fabry-Pérot-Resonanzen charakterisiert ist (Vgl. Abschnitt 4). Im Folgenden untersuchen wir die Streuung des Elektrons an einem kreisförmigen Stufenpotential der Form

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } r < 0 \\ 0 & \text{für } r > 0 \end{cases} \quad (5.1)$$

mit der Fragestellung, wie sich die Effekte des Klein-Tunnelns für dieses Problem äußern werden.

5.1 Lösungen der Weyl-Gleichung in Polarkoordinaten

Um Aussagen über das Streuverhalten der Elektronen treffen zu können, müssen vorerst wieder die Lösungen der Weyl-Gleichung gefunden werden. In Polarkoordinaten lautet die freie Weyl-Gleichung

$$H\psi(r, \varphi) = E\psi(r, \varphi), \quad (5.2)$$

wobei der Hamiltonoperator gemäß Gleichung (3.33) gegeben ist durch

$$H = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \left(-i\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\ e^{i\varphi} \left(-i\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} \right) & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

Um Lösungen der Weyl-Gleichung (5.2) zu konstruieren, bietet es sich an, zunächst einen vollständigen Satz kommutierender Observablen zu finden. Für ein zweidimensionales Zentralfeldproblem eines Schrödinger-Teilchens ist ein solcher gegeben durch die Energie H und dem Bahndrehimpuls L_z [3, 4]. Für ein masseloses Dirac-Elektron stellt der Bahndrehimpuls L_z jedoch keine Erhaltungsgröße dar, da das Elektron zusätzlich einen Pseudospin σ_z besitzt [13]: Für den Kommutator von L_z und dem Hamilton-Operator $H = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} = \sigma_x p_x + \sigma_y p_y$ ergibt sich

$$\begin{aligned} [L_z, H] &= [xp_y - yp_x, p_x \sigma_x + p_y \sigma_y] \\ &= [xp_y, p_x \sigma_x] + \underbrace{[xp_y, p_y \sigma_y]}_{=0} - \underbrace{[yp_x, p_x \sigma_x]}_{=0} - [yp_x, p_y \sigma_y] \\ &= x \underbrace{[p_y, p_x \sigma_x]}_{=0} + [x, p_x \sigma_x] p_y - y \underbrace{[p_x, p_y \sigma_y]}_{=0} - [y, p_y \sigma_y] p_x \\ &= i(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \neq 0. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Es gilt weiter $[\sigma_z, H] = [\sigma_z, \sigma_x] p_x + [\sigma_z, \sigma_y] p_y$ und unter Verwendung der Beziehung (4.16) folgt daraus

$$[\sigma_z, H] = -2i(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x). \quad (5.5)$$

Folglich stellt der Gesamtdrehimpuls $J_z = L_z + \frac{1}{2}\sigma_z$ eine Erhaltungsgröße dar, denn mit den Ergebnissen (5.4) und (5.5) folgt mit $J \equiv J_z$ und $L \equiv L_z$

$$[J, H] = \left[L + \frac{1}{2}\sigma_z, H \right] = 0. \quad (5.6)$$

Wegen Gleichung (5.6) besitzen J und H ein gemeinsames Eigenfunktionensystem, was ausgenutzt werden kann, um die Eigenfunktionen ψ der Gleichung (5.2) in Radial- und

Winkelanteil zu separieren. Zunächst müssen für dieses Vorgehen aber die Eigenfunktionen von J gefunden werden. Da $[J, L] = 0$ und $[J, \sigma_z] = 0$, sind die Eigenfunktionen von J Produktzustände aus Eigenfunktionen von L und σ_z . Um diese zu finden, sind die Eigenwertgleichungen bezüglich des Pseudospins und des Bahndrehimpulses

$$\frac{1}{2}\sigma_z |\uparrow\downarrow\rangle = s |\uparrow\downarrow\rangle, \quad L\chi_m(\varphi) = m\chi_m(\varphi) \quad (5.7)$$

zu lösen, wobei $L = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$. Die Lösungen sind gegeben durch

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

mit den Eigenwerten $s = \pm 1/2$ und

$$\chi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (5.9)$$

mit den Eigenwerten $m \in \mathbb{Z}$, wobei $\chi_m(\varphi) = \langle \mathbf{r} | \chi_m \rangle$. Die Eigenzustände von J ergeben sich aus dem Produkt der Zustände $|\chi_m\rangle$ und $|\uparrow\downarrow\rangle$,

$$J|\chi_m\rangle|\uparrow\downarrow\rangle = \underbrace{(m+s)}_{=j} |\chi_m\rangle|\uparrow\downarrow\rangle, \quad \text{mit } j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \dots \quad (5.10)$$

Der allgemeinste Eigenzustand von J zum Eigenwert j ist eine Linearkombination von Produktzuständen $|\xi_m^+\rangle = |\chi_m\rangle|\uparrow\rangle$ und $|\xi_{m+1}^-\rangle = |\chi_{m+1}\rangle|\downarrow\rangle$ mit den i.A. komplexen Koeffizienten f_m^+ und f_{m+1}^- ,

$$J|j\rangle = J(f_m^+|\xi_m^+\rangle + f_{m+1}^-|\xi_{m+1}^-\rangle) = j|j\rangle. \quad (5.11)$$

Wir suchen nun den Eigenzustand von J , der auch ein Eigenzustand von H ist. Da die Produktzustände $|\xi_m^+\rangle$ lediglich eine Winkelabhängigkeit besitzen, stellen die Koeffizienten f_m^+ und f_{m+1}^- die Radialanteile dar, die mit der Dirac-Gleichung (5.2) bestimmt werden können. Mit $\langle \mathbf{r} | \xi_m^\pm \rangle = \xi_m^\pm(\varphi)$ und

$$\psi_m(r, \varphi) = f_m^+(r) \xi_m^+(\varphi) + f_{m+1}^-(r) \xi_{m+1}^-(\varphi) \quad (5.12)$$

folgen schließlich die Eigenwertgleichungen $J\psi_m(r, \varphi) = j\psi_m(r, \varphi)$ und $H\psi_m(r, \varphi) = E\psi_m(r, \varphi)$. Mit Gleichung (5.12) ist letztlich die Separation von $\psi_m(r, \varphi)$ in einen Radial- und Winkelanteil erfolgt. Das Anwenden von H auf diesen Zustand ergibt unter Benutzung der Beziehung

$$Hf_m^\pm(r) \xi_m^\pm(\varphi) = \left(-i\frac{\partial}{\partial r} f_m^\pm(r) \pm \frac{im}{r} f_m^\pm(r) \right) \xi_{m\pm 1}^\mp \quad (5.13)$$

und der Orthogonalität der $\xi_m^\pm(\varphi)$ die Gleichungen

$$-i\frac{\partial}{\partial r} f_m^+(r) + i\frac{m}{r} f_m^+(r) = E f_{m+1}^-(r), \quad (5.14)$$

$$-i\frac{\partial}{\partial r} f_{m+1}^-(r) - i\frac{m+1}{r} f_{m+1}^-(r) = E f_m^+(r), \quad (5.15)$$

mit denen die Radialanteile $f_m^+(r)$ und $f_{m+1}^-(r)$ bestimmt werden können. Mit den Substitutionen $z = Er$, $f_{m+1}^-(z) = Z_{m+1}(z)$ und $if_m^+(z) = Z_m(z)$ ergeben sich aus den Gleichungen (5.14) und (5.15) die Relationen

$$\frac{m}{z} Z_m(z) - \frac{\partial}{\partial z} Z_m(z) = Z_{m+1}(z), \quad (5.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} Z_{m+1}(z) + \frac{m+1}{z} Z_{m+1}(z) = Z_m(z). \quad (5.17)$$

Es lässt sich zeigen, dass die Gleichungen (5.16) und (5.17) die Rekursionsbeziehungen der Bessel-Funktionen $Z_m(z)$

$$\frac{2m}{z} Z_m(z) = Z_{m-1}(z) + Z_{m+1}(z), \quad (5.18)$$

$$2 \frac{\partial}{\partial z} Z_m(z) = Z_{m-1}(z) - Z_{m+1}(z) \quad (5.19)$$

erfüllen [16, 17]. Damit sind die Eigenfunktionen von H gegeben als

$$\psi_m(r, \varphi) = -i Z_m(Er) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + Z_{m+1}(Er) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.20)$$

Die Bessel-Funktionen $Z_m(Er)$ können in vier Arten unterschieden werden [16, 17]. Die Besselfunktionen erster Art werden mit $J_n(Er)$ bezeichnet, die Bessel-Funktionen zweiter Art (Neumann-Funktionen) mit $Y_n(Er)$. Die letzten beiden Arten entsprechen den Hankel-Funktionen $H_n^{(1)}(Er)$ und $H_n^{(2)}(Er)$, die aus den Bessel-Funktionen erster und zweiter Art gemäß $H_n^{(1)/(2)}(Er) = J_n(Er) \pm iY_n(Er)$ gebildet werden können.

5.2 Radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte und Streueffizienz

5.2.1 Berechnung der Streukoeffizienten

Es müssen für die verschiedenen Raumbereiche Wellenfunktionen angesetzt werden, deren komplexe Streuamplituden über Stetigkeitsbedingungen bestimmt werden können (siehe *Abbildung 5.1*). Im Folgenden wird angenommen, dass für die Energie des einfallenden Elektrons $E > 0$ gilt.

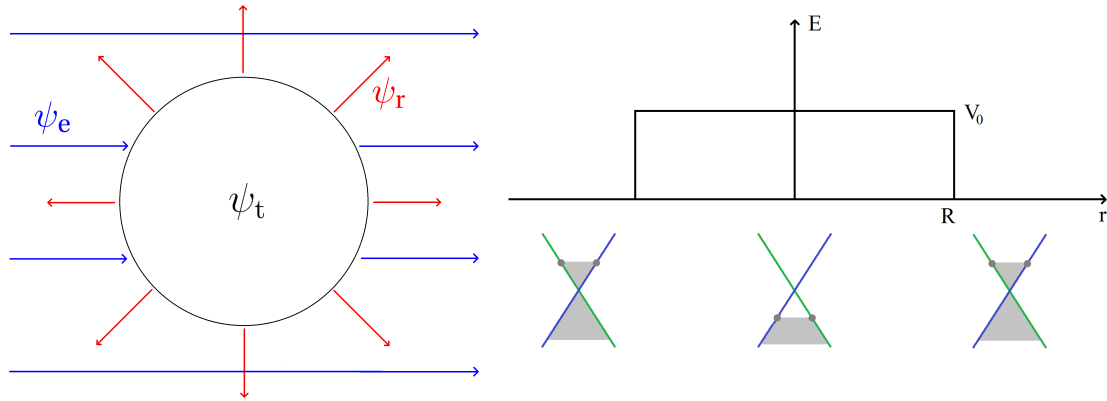


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung von einfallender, gestreuter und transmittierter Welle am radialsymmetrischen Potential (links) und Querschnitt des Kreis-Potentials mit zugehörigem Dirac-Kegel, wobei $\alpha = -1$ (rechts).

Aus Symmetriegründen kann angenommen werden, dass der Wellenzahlvektor des einfallenden Elektrons nur eine x -Komponente besitzt: $\mathbf{k} = k\mathbf{e}_x$. Die entsprechende Wellenfunktion kann als Entwicklung nach Bessel-Funktionen erster Art $J_n(kr)$ geschrieben werden [16]:

$$\psi_e = e^{ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = e^{ikr\cos\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(kr) e^{in\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

bzw.

$$\psi_e = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sqrt{2\pi} i^{n+1} \left[-i J_n(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + J_{n+1}(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(n+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]. \quad (5.22)$$

Der Vergleich mit Gleichung (5.20) zeigt, dass ψ_e als Überlagerung aller möglichen Eigenfunktionen, d.h. Partialwellen mit unterschiedlichem Gesamtdrehimpuls J , zu einer gegebenen Energie verstanden werden kann. Die Konstruktion der reflektierten und transmittierten Wellenfunktion geschieht analog durch eine Linearkombination aller möglichen Eigenfunktionen zu einer gegebenen Energie mit komplexen Koeffizienten, die durch die Stetigkeit der Wellenfunktionen bestimmt werden. Die Forderung der Regularität der Wellenfunktionen entscheidet, welche Art der Bessel-Funktionen für die jeweilige Wellenlösung verwendet wird.

Die gestreute Wellenfunktion wird sich für große Abstände vom Streuzentrum wie $\psi_r \sim e^{ikr}$ verhalten. Dementsprechend sollte die asymptotische Lösung der zu verwendenden Bessel-Funktion dieses Verhalten aufweisen. Hierfür kommt nur die Hankel-Funktion $H_n^{(1)}(kr)$ in Frage, denn für sie gilt [16]

$$H_n^{(1)}(kr) \underset{kr \gg 1}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} e^{i(kr - n\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4})}. \quad (5.23)$$

Die gestreute Welle lässt sich jetzt mit den komplexen Koeffizienten a_n schreiben als

$$\psi_r = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sqrt{2\pi} i^{n+1} a_n \left[-i H_n^{(1)}(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + H_{n+1}^{(1)}(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(n+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]. \quad (5.24)$$

Da die Neumann-Funktion für $kr \rightarrow 0$ divergiert [16], stellt $J_n(qr)$ die einzige reguläre Bessel-Funktion für die transmittierte Welle ψ_t dar. Sie lässt sich nun mit den komplexen Koeffizienten b_n schreiben als

$$\psi_t = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sqrt{2\pi} i^{n+1} b_n \left[-i J_n(qr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha J_{n+1}(qr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(n+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \quad (5.25)$$

mit $\alpha = \text{sgn}(E - V_0)$ und $q = \alpha(E - V_0)$. Der Vorfaktor α ergibt sich nach Substitution von $E \rightarrow -E$ in den Rekursionsbeziehungen der Bessel-Funktionen (5.18) und (5.19).

Die Stetigkeitsbedingung der Wellenfunktionen lautet

$$\psi_e(r = R) + \psi_r(r = R) = \psi_t(r = R). \quad (5.26)$$

Unter Ausnutzung der Orthogonalität des Winkelanteils der Wellenfunktionen resultieren zwei Bestimmungsgleichungen für a_n und b_n ,

$$J_n(kR) + a_n H_n^{(1)}(kR) = b_n J_n(qR), \quad (5.27)$$

$$J_{n+1}(kR) + a_n H_{n+1}^{(1)}(kR) = \alpha b_n J_{n+1}(qR). \quad (5.28)$$

Nach Lösen dieses Gleichungssystems ergeben sich die Streukoeffizienten zu

$$a_n = \frac{-J_n(N\rho) J_{n+1}(\rho) + \alpha J_n(\rho) J_{n+1}(N\rho)}{J_n(N\rho) H_{n+1}^{(1)}(\rho) - \alpha H_n^{(1)}(\rho) J_{n+1}(N\rho)}, \quad (5.29)$$

$$b_n = \frac{J_n(\rho) H_{n+1}^{(1)}(\rho) - J_{n+1}(\rho) H_n^{(1)}(\rho)}{J_n(N\rho) H_{n+1}^{(1)}(\rho) - \alpha J_{n+1}(N\rho) H_n^{(1)}(\rho)}, \quad (5.30)$$

wobei die Abkürzungen $\rho = kR$ und $N = \alpha \frac{(E-V_0)}{E}$ verwendet wurden. Es sei angemerkt, dass unter Ausnutzung der Relationen [16, 17]

$$J_{-n} = (-1)^n J_n, \quad H_{-n}^{(1)} = (-1)^n H_n^{(1)} \quad (5.31)$$

die Beziehungen

$$a_{-n} = a_{n-1}, \quad b_{-n} = \alpha b_{n-1} \quad (5.32)$$

folgen.

Für die weitere Rechnung bietet es sich an, mit Hilfe der Gleichungen (5.31) und (5.32) die gestreute und transmittierte Wellenfunktion in eine andere Form zu bringen. Dazu denke man sich die Summe in Gleichung (5.24) in zwei Teilsummen zerlegt, bei denen die erste von $-\infty$ nach -1 und die zweite von 0 nach ∞ läuft. Die erste Teilsumme lässt sich schreiben als

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{2\pi} i^{-n+1} a_{-n} \left[-i H_{-n}^{(1)}(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-in\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + H_{-n+1}^{(1)}(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(-n+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right], \quad (5.33)$$

und mit (5.31) und (5.32) folgt

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{2\pi} i^{n+1} a_{n-1} \left[-i H_n^{(1)}(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-in\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - H_{n-1}^{(1)}(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(-n+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]. \quad (5.34)$$

Nach Erniedrigung des Summationsindex um 1 ergibt sich schließlich

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{2\pi} i^{n+1} a_n \left[-i H_n^{(1)}(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-in\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + H_{n+1}^{(1)}(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i(n+1)\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right]. \quad (5.35)$$

Die beiden Teilsummen lassen sich jetzt wieder zusammenfassen und es folgt für die gestreute Wellenfunktion der Ausdruck

$$\psi_r = \sum_{n=0}^{\infty} i^{n+1} a_n \left[-i H_n^{(1)}(kr) \begin{pmatrix} e^{in\varphi} \\ e^{-in\varphi} \end{pmatrix} + H_{n+1}^{(1)}(kr) \begin{pmatrix} e^{-i(n+1)\varphi} \\ e^{i(n+1)\varphi} \end{pmatrix} \right]. \quad (5.36)$$

Nach einer analogen Vorgehensweise folgt für die transmittierte Wellenfunktion der Ausdruck

$$\psi_t = \sum_{n=0}^{\infty} i^{n+1} b_n \left[-i J_n(qr) \begin{pmatrix} e^{in\varphi} \\ e^{-in\varphi} \end{pmatrix} + \alpha J_{n+1}(qr) \begin{pmatrix} e^{-i(n+1)\varphi} \\ e^{i(n+1)\varphi} \end{pmatrix} \right]. \quad (5.37)$$

5.2.2 Radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte j_r^f der gestreuten Welle

Das Streuverhalten des Elektrons wird im Folgenden durch die Streueffizienz Q bzw. der radialen Wahrscheinlichkeitsstromdichte der gestreuten Welle j_r^f charakterisiert, da Transmissions- und Reflexionskoeffizienten nicht wie in der üblichen Weise existieren (siehe *Abbildung 5.1*). Im Folgenden werden wir zunächst die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte bestimmen, da mit dieser später eine geeignete Definition der Streueffizienz vorgenommen werden kann.

Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte der einfallenden Wellenfunktion \mathbf{j}^e berechnet sich gemäß Gleichung (2.15) zu

$$\mathbf{j}^e = \psi_e^\dagger \hat{\mathbf{j}} \psi_e = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.38)$$

wobei $\hat{\mathbf{j}} = \sigma_x \mathbf{e}_x + \sigma_y \mathbf{e}_y$ genutzt wurde. Um die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte j_r^r zu erhalten, muss zunächst der Operator der radialen Wahrscheinlichkeitsstromdichte in Polarkoordinaten berechnet werden. Für diesen ergibt sich

$$\hat{j}_r = \hat{\mathbf{j}} \mathbf{e}_r = \sigma_x \cos \varphi + \sigma_y \sin \varphi = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cos \varphi + i \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sin \varphi. \quad (5.39)$$

Damit folgt für die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte der gestreuten Welle mit Gleichung (5.36)

$$\begin{aligned} j_r^r(\varphi) &= \psi_r^\dagger \hat{j}_r \psi_r \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} (-i)^{m+1} a_m^* \left[i H_m^{(1)*}(kr) \begin{pmatrix} e^{-im\varphi} \\ e^{im\varphi} \end{pmatrix} + H_{m+1}^{(1)*}(kr) \begin{pmatrix} e^{i(m+1)\varphi} \\ e^{-i(m+1)\varphi} \end{pmatrix} \right] \\ &\quad \times \sum_{n=0}^{\infty} i^{n+1} a_n \left[-i H_n^{(1)}(kr) \begin{pmatrix} e^{-i(n+1)\varphi} \\ e^{i(n+1)\varphi} \end{pmatrix} + H_{n+1}^{(1)}(kr) \begin{pmatrix} e^{in\varphi} \\ e^{-in\varphi} \end{pmatrix} \right]. \end{aligned} \quad (5.40)$$

Nach Zusammenfassen ergibt sich

$$\begin{aligned} j_r^r &= \sum_{m,n=0}^{\infty} a_m^* a_n i^{n-m} \frac{1}{\pi} \left[\left(H_m^{(1)*}(kr) H_n^{(1)}(kr) + H_{m+1}^{(1)*}(kr) H_{n+1}^{(1)}(kr) \right) \cos((m+n+1)\varphi) \right. \\ &\quad \left. + i \left(H_m^{(1)*}(kr) H_{n+1}^{(1)}(kr) - H_{m+1}^{(1)*}(kr) H_n^{(1)}(kr) \right) \cos((m-n)\varphi) \right]. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Es bietet es sich an, Gleichung (5.41) für $kr \rightarrow \infty$ auszuwerten. In dieser Fernfeld-Näherung erhält man unter Verwendung des asymptotischen Ausdrucks der Hankel-Funktionen aus Gleichung (5.23) den Ausdruck

$$\begin{aligned} j_r^r(\varphi) &= \frac{8}{\pi k r} \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 [\cos((2n+1)\varphi) + 1] \\ &\quad + \frac{16}{\pi k r} \sum_{m < n} \operatorname{Re}(a_n a_m^*) [\cos((m+n+1)\varphi) + \cos((m-n)\varphi)]. \end{aligned} \quad (5.42)$$

5.2.3 Streueffizienz Q

Die charakterisierende Größe für das Streuverhalten des Elektrons ist der Streuquerschnitt σ_Q , der sich berechnet als $\sigma_Q = \frac{I_r^r}{I^e/A}$, wobei I_r^r den Wahrscheinlichkeitsstrom der gestreuten Welle und I^e/A den Wahrscheinlichkeitsstrom der einfallenden Welle pro Einheitsfläche darstellt. Für den Ausdruck I^e/A ergibt sich gemäß Gleichung (5.38) der konstante Wert 2. Der Wahrscheinlichkeitsstrom der gestreuten Welle berechnet sich zu

$$I_r^r = \oint \mathbf{j}^r \cdot d\mathbf{s} = \int_0^{2\pi} j_r^r r d\varphi. \quad (5.43)$$

Wegen der Gültigkeit der Kontinuitätsgleichung wird I_r^r für alle r denselben Wert besitzen. Es bietet sich daher an, für j_r^r in Gleichung (5.43) den Ausdruck aus Gleichung (5.42) zu benutzen. Da bei der Integration die Kosinus-Terme keinen Beitrag liefern, folgt schließlich

$$I_r^r = \frac{16}{k} \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2. \quad (5.44)$$

Jetzt kann die Definition der Streueffizienz Q genutzt werden, die den Streuquerschnitt σ zum Durchmesser des Kreispotentials ins Verhältnis setzt. Man erhält

$$Q = \frac{\sigma}{2R} = \frac{4}{\rho} \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2. \quad (5.45)$$

Die Einführung der Streueffizienz ist vorteilhaft, um die Streuung des Elektrons an Potentialen mit unterschiedlichem Radius vergleichen zu können.

5.3 Ergebnisse

Anhand der Gleichungen (5.42) und (5.45) können wir nun das Streuverhalten des masselosen Dirac-Elektrons an einer kreisförmigen Potentialstufe untersuchen. Im Folgenden wird die Höhe der Stufe auf $V_0 = 10$ gesetzt und der Radius R und die Energie E sind variabel. Um die Eigenheiten des Klein-Tunnelns in Graphen besser hervorheben zu können, werden wir dabei ein Vergleich mit einem Schrödinger-Elektron anstellen. Die entsprechenden Gleichungen sind dem Anhang zu entnehmen². Die für die numerische Auswertung benötigten Besselfunktionen wurden wie in Ref. [18] beschrieben berechnet.

5.3.1 Streueffizienz Q

Um einen Überblick über die bei der Streuung an einem kreisförmigen Potential auftretenden Effekte zu gewinnen, betrachten wir zunächst die Streueffizienz Q in Abhängigkeit vom Radius R für verschiedene Werte der Energie E .

Zunächst soll das Streuverhalten des Dirac- sowie des Schrödinger-Elektrons für den Fall $\alpha = 1$, also für eine Energie größer als die Höhe der Potentialstufe, diskutiert werden. In *Abbildung 5.2* ist die Streueffizienz $Q(R)$ für das Dirac-Elektron nach Gleichung (5.45) und zum Vergleich für das Schrödinger-Elektron nach Gleichung (A.26) mit $E > V_0$ für verschiedene Werte der Energie E dargestellt. Formal besteht zwischen den Gleichungen (5.45) und (A.26) eine große Ähnlichkeit. Entscheidend für das Verhalten der Streueffizienz Q sind jedoch die Koeffizienten a_n , die durch die Wellenfunktionen inner- und außerhalb des Kreis-Potentials bestimmt sind. Im Fall $E > V_0$ existieren für das Dirac- und das Schrödinger-Elektron oszillatorische Zustände im Bereich des Kreis-Potentials. Dies führt dazu, dass für beide Fälle die oszillatorischen Wellenfunktionen mit $J(qR)$ bzw. $J'(qR)$ in die Koeffizienten a_n eingehen (siehe Gleichung (5.29) bzw. (A.15)). Die Streueffizienzen des Dirac- und des Schrödinger-Elektrons zeigen daher qualitativ das gleiche oszillatorische Verhalten.

Jetzt wird das Streuverhalten für $E < V_0$, d.h. $\alpha = -1$, untersucht. Für diesen Fall war bereits bei der Diskussion der Streuung eines Dirac-Elektrons an ebenen Stufen ein wesentlicher Unterschied zum Schrödinger-Elektron festzustellen (siehe perfekte Transmission, Abschnitt 4.3). Unterhalb des Kreis-Potentials existieren für das Schrödinger-Elektron nur evaneszente Wellen, weshalb in den Koeffizienten a_n nach Gleichung (A.14) die modifizierten Besselfunktionen $I_n(qR)$ eingehen. Für das Dirac-Elektron existieren hingegen oszillatorische Zustände mit negativer Energie. In *Abbildung 5.3* ist die Streueffizienz $Q(R)$ für das Dirac-Elektron und für das Schrödinger-Elektron mit $E < V_0$ für verschiedene Werte der Energie E dargestellt. Die Abbildung zeigt, dass sich die Streueffizienz des Schrödinger-Elektrons mit steigendem Radius R einem konstantem Wert annähert. Wesentlich für die Streuung der Schrödinger-Elektronen ist, dass die Kurven, bis auf die Kurve mit $E = 9$, kein oszillatorisches Verhalten aufweisen. Dies ist auf die schnell abklingenden Lösungen

²Die Streueffizienz und die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte wurden für eine dimensionslose Dirac- bzw. Schrödinger-Gleichung berechnet. Dies erlaubt einen qualitativen Vergleich des Streuverhaltens zwischen Dirac- und Schrödinger-Elektron. Gleiche Werte der dimensionslosen Größen R und E entsprechen nicht gleichen Radien und Energien in physikalischen Einheiten.

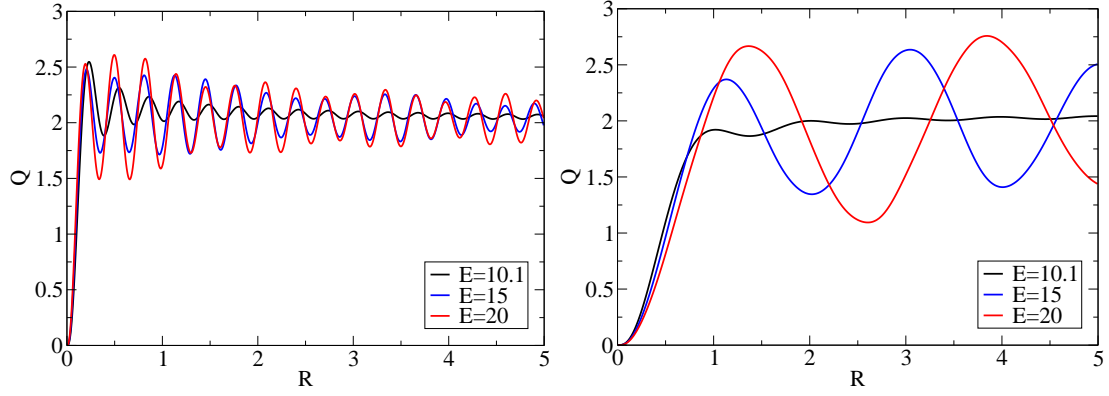


Abbildung 5.2: Streueffizienz Q für das Dirac-Elektron (links) und das Schrödinger-Elektron (rechts) in Abhängigkeit von R für verschiedene Werte von E mit $V_0 = 10$ und $\alpha = 1$.

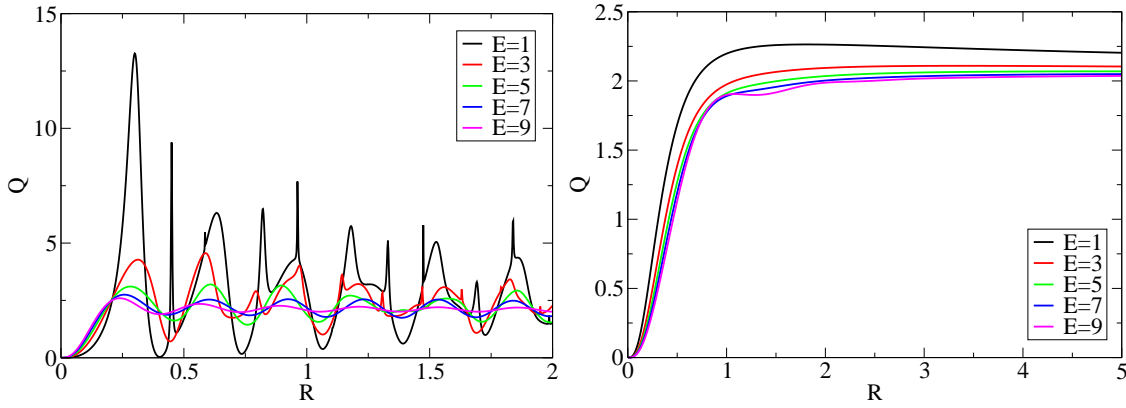


Abbildung 5.3: Streueffizienz Q für das Dirac-Elektron (links) und das Schrödinger-Elektron (rechts) in Abhängigkeit von R für verschiedene Werte von E mit $V_0 = 10$ und $\alpha = -1$.

im Bereich des Kreispotentials zurückzuführen. Lediglich für die Kurve mit $E = 9$ kann ein leichtes oszillatorisches Verhalten der Streueffizienz auftreten, da für kleine Radien und große Energien die Wellenfunktion langsam genug abklingt. Die Streueffizienzen des Dirac-Elektrons weisen Oszillationen um einen gemeinsamen Mittelwert auf. Besonders ausgeprägt sind diese Oszillationen für kleine Energien, während sie für $E \rightarrow V_0$ kaum noch zu erkennen sind. Der Grund für das Auftreten der Oszillationen in Q liegt in der Existenz oszillatorischer Wellenfunktionen im Bereich des Kreis-Potentials, die sich in den Koeffizienten a_n für $\alpha = 1$, sowie auch für $\alpha = -1$ durch die Bessel-Funktionen $J(qR)$ bemerkbar machen. Man sieht, dass für kleiner werdende Energien zusätzlich schmale, teilweise sehr stark ausgeprägte Peaks auftreten, die wir später im Detail untersuchen werden.

5.3.2 Winkelverteilung

Mit Hilfe der Streueffizienz konnte bisher untersucht werden, welcher Anteil der einfallenden Welle gestreut wird. Neben dieser totalen Streugröße ist die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte der gestreuten Welle $j_r^r(\varphi)$ ein weiteres Charakteristikum des Streuverhaltens, da mit ihr die Winkelverteilung der Streueffizienz untersucht werden kann. In *Abbildung 5.4* ist $j_r^r(\varphi)$ in Fernfeldnäherung für das Dirac-Elektron nach Gleichung (5.42) und zum Vergleich für das Schrödinger-Elektron nach Gleichung (A.22) für verschiedene Werte von E

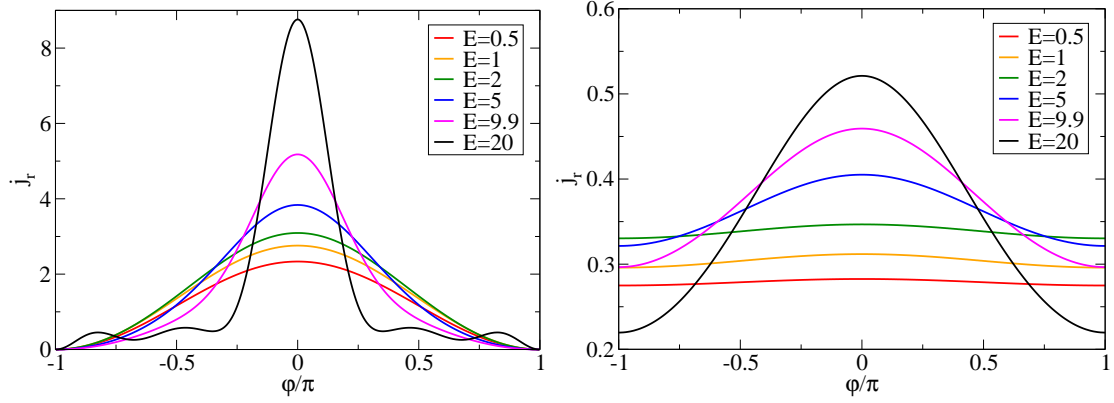


Abbildung 5.4: Radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte der gestreuten Welle j_r^r des Dirac-Elektrons in Abhängigkeit von φ für verschiedene Werte von E mit $R = 0.2$ und $V_0 = 10$.

mit $R = 0.2$ dargestellt. Da die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte eine von r abhängige Größe ist und im Grenzfall $r \rightarrow \infty$ den Wert 0 annimmt, wurde in der Fernfeldnäherung (5.42) $r = R$ gesetzt, ohne dabei die Ergebnisse in qualitativer Hinsicht zu verändern. Für die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte des Dirac-Elektrons ist zu erkennen, dass diese für den Winkel $\varphi = \pi$ den Wert 0 annimmt. Die für das Klein-Tunneln in Graphen charakteristische Abwesenheit von Rückstreuung, die bereits in Abschnitt 4.3 mit Hilfe der Erhaltung des Pseudospins erklärt werden konnte, macht sich also auch hier bemerkbar³. Desweiteren ist der Abbildung zu entnehmen, dass bei $\varphi = 0$ die Wahrscheinlichkeitsstromdichte ihren größten Wert annimmt. Offensichtlich erfährt das Dirac-Elektron seine maximale Streuung in Vorwärtsrichtung. Mit steigender Energie nimmt die Vorwärtsstreuung im Vergleich zur Streuung in andere Raumbereiche erheblich zu. Die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte des Schrödinger-Elektrons nimmt für $\varphi = \pi$ einen Wert ungleich von Null an. Dies war zu erwarten, denn der Effekt der Abwesenheit von Rückstreuung tritt nicht für Schrödinger-Elektronen auf. Trotzdem erfährt auch das Schrödinger-Elektron die größte Streuung in Vorwärtsrichtung, die jedoch nicht so stark ausgeprägt ist wie die des Dirac-Elektrons.

5.3.3 Detailstruktur der Streuung

Wie man sehen kann, weisen die Streueffizienzen $Q(R)$ des Dirac-Elektrons aus *Abbildung 5.3* für größere Energien ein sanftes oszillatorisches Verhalten auf, während für kleinere Energien eine ausgeprägte Detailstruktur zu erkennen ist. Im Folgenden wollen wir diese genauer analysieren, wobei das Auftreten der schmalen Peaks von besonderem Interesse sein wird. Dazu ist in *Abbildung 5.5* die Streueffizienz Q des Dirac-Elektrons in Abhängigkeit von E für verschiedene Werte von R mit $E < V_0$ dargestellt (siehe obere Diagramme). Zudem sind in den unteren sechs Diagrammen für einige ausgewählte Radien R die ersten vier Beiträge $|a_i|^2$ zu sehen, aus denen sich Q gemäß Gleichung (5.45) zusammensetzt. Die Zugehörigkeit dieser Diagramme zur jeweiligen Streueffizienz ist durch die Farbe gekennzeichnet.

Bis auf einige Ausnahmen ist in den unteren Diagrammen zu sehen, dass für $E \rightarrow 0$ lediglich $|a_0|^2$ einen Beitrag an der Streueffizienz Q leistet. Dies liegt daran, dass für kleine Energien nur die niedrigste Partialwelle, d.h die niedrigste Mode des Kreis-Potentials angeregt werden kann, da die Wellenlänge des Elektrons im Vergleich zur Abmessung des Kreis-

³Es lässt sich allgemein zeigen, dass für Potentiale der Form $V = V(x, y)$ Rückstreuung für $\varphi = \pi$ ausbleibt [12].

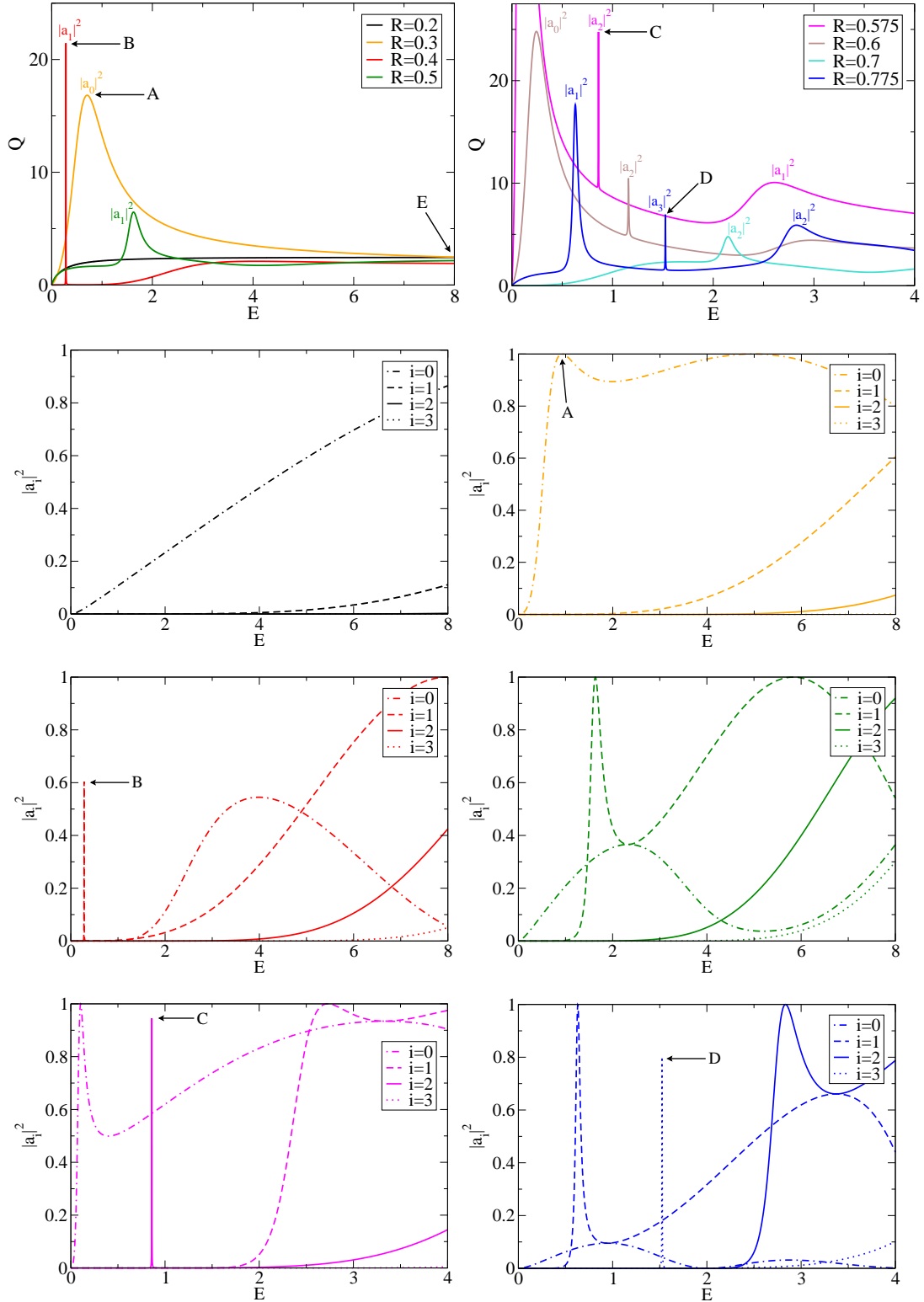


Abbildung 5.5: Streueffizienz Q des Dirac-Elektrons in Abhängigkeit von E für verschiedene Werte von R mit $E < V$ und $V_0 = 10$ (obere Diagramme); im Diagramm eingezeichnet sind die Summanden $|a_i|^2$ aus Q , die den größten Beitrag zum zugehörigen Peak leisten. Zum Vergleich: Die ersten vier Summanden $|a_i|^2$ in Abhängigkeit von E (untere Diagramme); jede Farbe ist einem Wert von R zugeordnet. Mit einem Pfeil gekennzeichnet sind besondere Stellen A, B, C, D und E, auf die im Weiteren Bezug genommen wird.

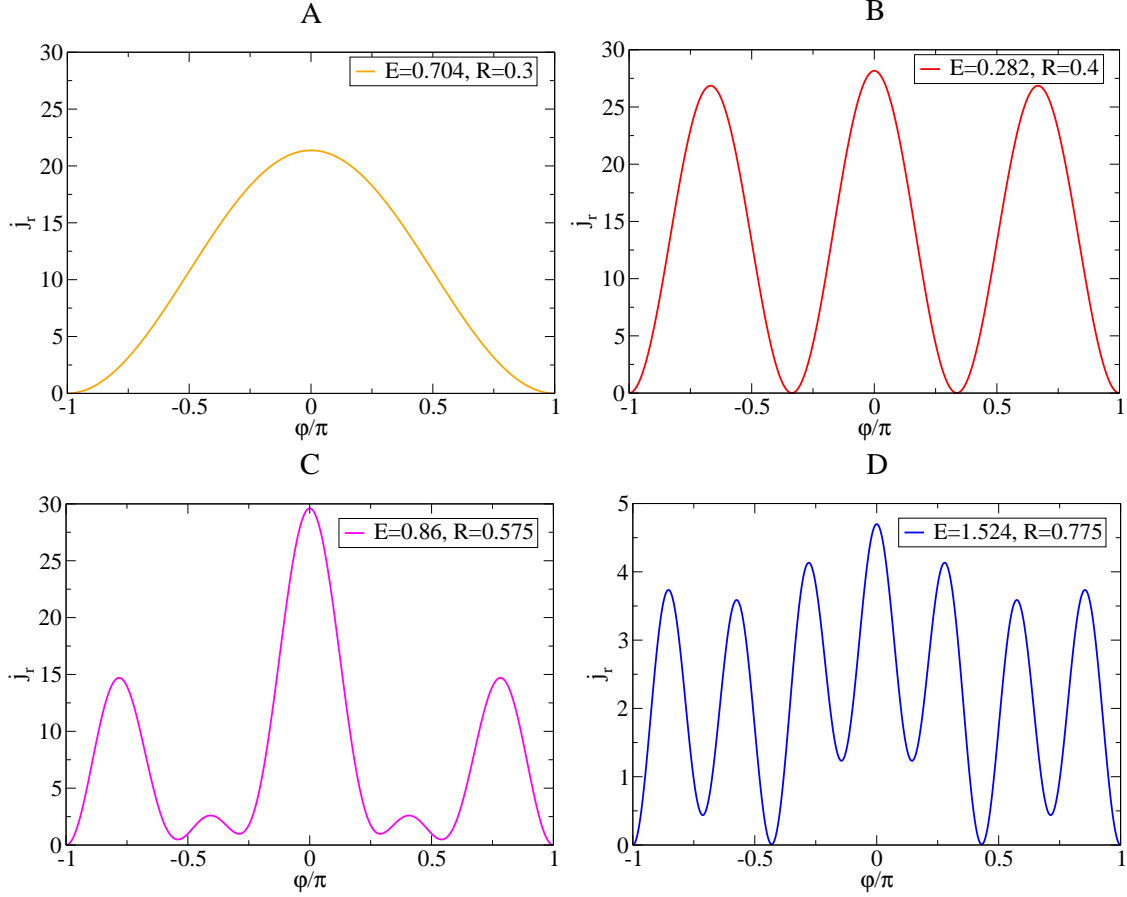


Abbildung 5.6: Radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte der gestreuten Welle j_r^r des Dirac-Elektrons in Abhängigkeit von φ für die Fälle A, B, C und D mit $V_0 = 10$.

Potentials groß ist. Mit zunehmender Energie, und damit kleiner werdender Wellenlänge, können nach und nach mehr Moden angeregt werden, was sich in dem Verlauf der Kurven widerspiegelt. Wie schnell zusätzliche Moden hinzukommen, hängt dabei vom Radius des Kreispotentials ab: Für kleine Radien sind erst bei größeren Energien weitere Moden angeregt (siehe Diagramm mit $R = 0.2$), wobei für größere Radien schon bei geringerer Energie zusätzliche Moden einen Beitrag zur Streueffizienz leisten (siehe Diagramm mit $R = 0.5$). Für große Werte von E gehen die Beiträge $|a_i|^2$ in ein oszillatorischen Verlauf über (siehe Diagramm mit $R = 0.5$), der zusammen mit dem Vorfaktor $8/\rho$ in Gleichung (5.45) für den flachen Verlauf der Streueffizienz für große Energien sorgt. Wie bereits erwähnt, sind die Beiträge $|a_{i>0}|^2$ für geringe Energien meist klein. Für bestimmte Parameter können diese jedoch schmale Peaks aufweisen, die sich in Form von lokalen Maxima in der Streueffizienz bemerkbar machen. Beispiele für diese Resonanzen sind mit den Buchstaben B, C und D gekennzeichnet. Zur Veranschaulichung sind an den lokalen Maxima der Streueffizienz die Beiträge $|a_i|^2$ eingezeichnet, die dort den größten Anteil zur Streueffizienz leisten.

Die weitere Untersuchung der in den Streueffizienzen auftretenden Resonanzen wird mit Hilfe der radialen Wahrscheinlichkeitsstromdichte $j_r^r(\varphi)$ geschehen. Unter der Annahme, dass nur ein Summand $|a_i|^2$ einen Beitrag zur Wahrscheinlichkeitsstromdichte leistet, kann ein einfacher Ausdruck für $j_r^r(\varphi)$ gefunden werden. Dieser ergibt sich zu

$$j_r^r(\varphi) = |a_i|^2 [\cos((2i + 1)\varphi) + 1]. \quad (5.46)$$

Dementsprechend erwarten wir für die Resonanzen einen kosinusförmigen Verlauf der Wahrscheinlichkeitsstromdichte, wobei die Anzahl der auftretenden Maxima durch $2i + 1$

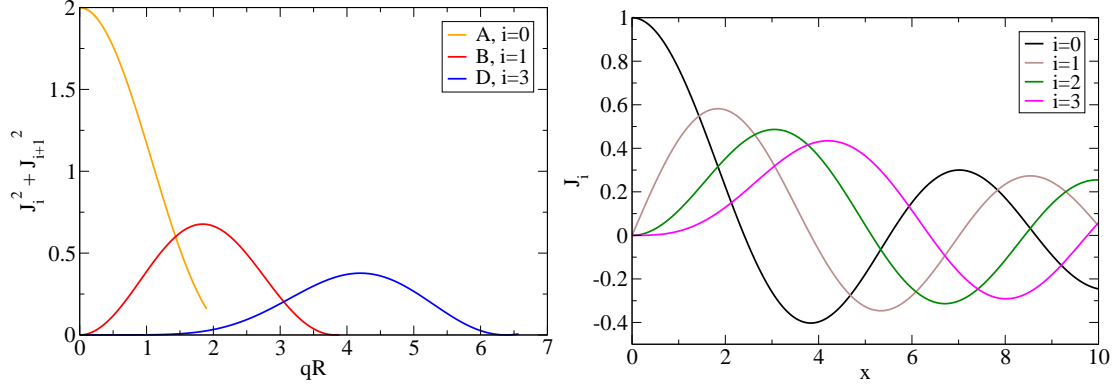


Abbildung 5.7: Veranschaulichung der Verteilung der Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi_t^\dagger \psi_t \sim J_i(qr)^2 + J_{i+1}(qr)^2$ des Dirac-Elektrons innerhalb des Kreis-Potentials für die Fälle A ($E = 0.704$, $R = 0.3$), B ($E = 0.282$, $R = 0.4$) und D ($E = 1.524$, $R = 0.775$) (links). Zum Vergleich: Die ersten vier Besselfunktionen erster Art (rechts).

gegeben ist. Wir können aber auch jetzt schon festhalten, dass der Verlauf von $j_r^r(\varphi)$ für einige der Resonanzen Abweichungen vom Ausdruck (5.46) zeigen wird, da für diese die zur Herleitung von Gleichung (5.46) benutzte Annahme einer isolierten Mode nicht mehr gerechtfertigt ist. In *Abbildung 5.6* ist die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte $j_r^r(\varphi)$ des Dirac-Elektrons in Abhängigkeit vom Streuwinkel φ für die in *Abbildung 5.5* mit den Buchstaben B, C und D gekennzeichneten Resonanzen dargestellt. Zum Vergleich ist noch die Wahrscheinlichkeitsdichte für den mit A bezeichneten Fall gezeigt, für den nur die unterste Mode angeregt ist. Alle Fälle zeigen das erwartete Verhalten auf. Die Abweichung der Kurven von Gleichung (5.46) ist dabei umso stärker, je weniger die Annahme einer isolierten Mode Gültigkeit besitzt.

Die Besonderheiten der Resonanzen zeigen sich auch in der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho = \psi^\dagger \psi$ des Dirac-Elektrons. Die Wahrscheinlichkeitsdichte außerhalb des Kreis-Potentials ist gegeben durch $\rho = \psi_1^\dagger \psi_1$, wobei $\psi_1 = \psi_e + \psi_r$. Mit den Gleichungen (5.21) und (5.36) ist es möglich, diesen Ausdruck numerisch zu berechnen. Für die Darstellung der Wahrscheinlichkeitsdichte innerhalb des Kreispotentials muss der Ausdruck $\psi_t^\dagger \psi_t$ mit Gleichung (5.37) numerisch ausgewertet werden. Für die Resonanzfälle wurde bei der Herleitung von Gleichung (5.46) die Annahme getroffen, dass nur ein Summand $|a_i|^2$ einen Beitrag zur Wahrscheinlichkeitsstromdichte leistet, da nur eine Mode des Kreis-Potentials angeregt ist. Diese Tatsache sollte sich aber auch in der transmittierten Wellenfunktion niederschlagen. Deshalb kann im Folgenden angenommen werden, dass für einen Resonanzfall nur der Summand $|b_i|^2$ einen Beitrag zur Wahrscheinlichkeitsdichte des Dirac-Elektrons leistet. Für diesen Fall ergibt sich der Ausdruck

$$\psi_t^\dagger \psi_t = 2 |b_i|^2 \left[|J_i(qr)|^2 + |J_{i+1}(qr)|^2 - 2\alpha \text{Im} [J_{i+1}(qr) J_i^*(qr)] \cos((2i+1)\varphi) \right]. \quad (5.47)$$

Da die $J_n(qr)$ rein reell sind [16], vereinfacht sich Gleichung (5.47) zu

$$\psi_t^\dagger \psi_t = 2 |b_i|^2 \left[J_i(qr)^2 + J_{i+1}(qr)^2 \right]. \quad (5.48)$$

Gemäß Gleichung (5.48) sollte demnach für die Resonanzfälle eine Radialsymmetrie der Wahrscheinlichkeitsdichte erkennbar sein. Um einen ersten Eindruck von der Verteilung der Wahrscheinlichkeitsdichte innerhalb des Kreis-Potentials zu bekommen, ist in *Abbildung 5.7* der zu $\psi_t^\dagger \psi_t$ proportionale Ausdruck $|J_i(qr)|^2 + |J_{i+1}(qr)|^2$ für die Fälle A, B und D dargestellt. Zum Vergleich sind im rechten Diagramm die ersten vier Besselfunktionen gezeigt. Es ist zu sehen, dass nur für $i = 0$ das Dirac-Elektron eine Lokalisierung

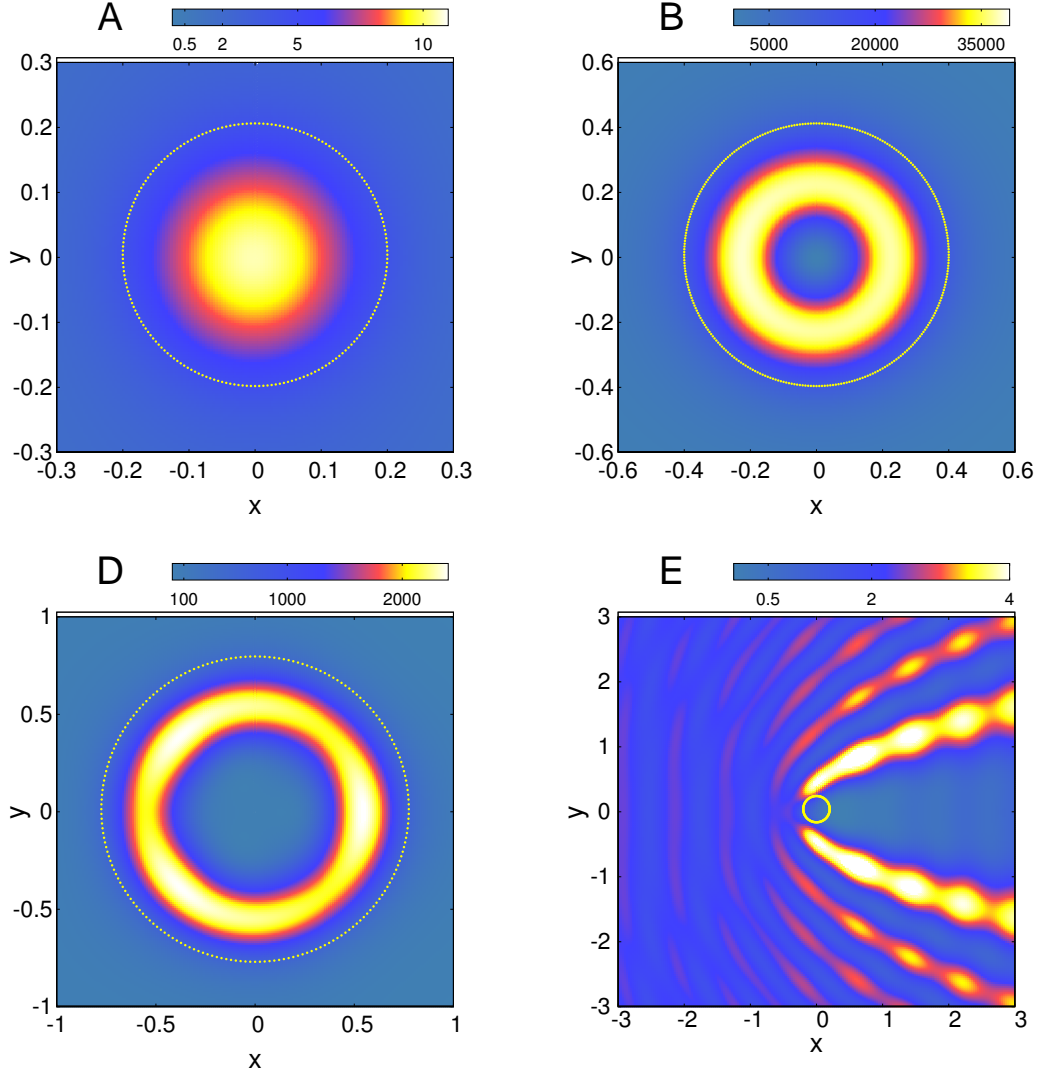


Abbildung 5.8: Verteilung der Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi^\dagger\psi$ des Dirac-Elektrons inner- und außerhalb des Kreispotentials für die Fälle A ($E = 0.704$, $R = 0.3$), B ($E = 0.282$, $R = 0.4$), D ($E = 1.524$, $R = 0.775$) und E ($E = 8$, $R = 0.2$) mit $V_0 = 10$. Der gelbe Kreis kennzeichnet das Potential.

um $r = 0$ erfährt. Dies liegt daran, dass $J_0(qr)$ bei $qr = 0$ ein Maximum besitzt, während die $J_{i>0}(qr)$ dort verschwinden. Für die anderen Kurven liegt das Maximum der Wahrscheinlichkeitsverteilung nicht im Zentrum des Kreispotentials, da $J_0(qr)$ nur in der Mode $i = 0$ eingeht. Es sollte sich demnach für diese Fälle eine Ringstruktur ausbilden. In *Abbildung 5.8* ist die tatsächliche Wahrscheinlichkeitsdichte des Dirac-Elektrons für die Fälle A, B und D, sowie für die Parameter $E = 9.9$ und $R = 0.2$ (Bild E) dargestellt. Bild A zeigt eine radialsymmetrische Verteilung der Wahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons um $r = 0$, genau wie wir es erwartet haben. Die Bilder B und D zeigen die ebenfalls vorausgesagte Ringstruktur auf. Allerdings ist in Bild D die Wahrscheinlichkeitsdichte nicht mehr ganz radialsymmetrisch. Der Grund hierfür liegt darin, dass die Summanden $|b_{i\neq 3}|^2$ nun neben $|b_3|^2$ einen entscheidenden Beitrag an der Wahrscheinlichkeitsdichte leisten und daher Gleichung (5.48) nur noch als Näherungsformel anzusehen ist. Allen Resonanzfällen ist gemeinsam, dass sie im Vergleich zum Außenbereich eine starke Erhöhung der Wahrscheinlichkeitsdichte im Kreis-Potential ermöglichen. Im Gegensatz dazu steht die Verteilung der Wahrscheinlichkeitsdichte für das Parameterpaar $E = 8$ und $R = 0.2$, die keiner Resonanz-

situation entspricht (Bild E). Es ist zu sehen, dass für diesen Fall das Elektron nicht im Inneren des Kreis-Potentials lokalisiert ist. Weiter kann man erkennen, wie die einfallende Welle um das kreisförmige Hindernis gebeugt wird und damit zur Vorwärtsstreuung des Elektrons beiträgt.

6 Zusammenfassung

Gegenstand dieser Arbeit ist der Klein-Tunneleffekt in Graphen und der Vergleich mit dem gewöhnlichen Tunneleffekt.

Der gewöhnliche Tunneleffekt ist der Übergang eines Schrödinger-Elektrons zwischen zwei klassisch erlaubten Zonen mit oszillierenden Wellen durch eine klassisch verbotene Zone. Der Übergang durch die Barriere wird dabei durch die evaneszenten Wellen in dieser Barriere vermittelt. Die Tunnelwahrscheinlichkeit ist kleiner 1 und nimmt exponentiell mit der Höhe und der Breite der Barriere ab.

In Graphen haben niederenergetische Elektronen eine lineare Dispersion um den K-Punkt, der am Übergang von Valenzband $E < 0$ und Leitungsband $E > 0$ liegt. Dieses pseudo-relativistische Verhalten erlaubt eine Beschreibung der Elektronen durch eine masselose Dirac-Gleichung (Weyl-Gleichung). In dieser effektiven Beschreibung geht der Pseudospin ein, der die Zugehörigkeit zu einem der beiden Untergitter des hexagonalen Bienenwabengitters angibt. Das Vorhandensein oszillatorischer Zustände mit $E < 0$ und die Erhaltung des Pseudospins ermöglichen das Klein-Tunneln in Graphen, das sich in Abhängigkeit der Stufen- und Streugeometrie in verschiedenen Effekten zeigt.

Für eine ebene Stufe oder Barriere kommt es bei senkrechtem Einfall zu perfekter Transmission. Dies folgt aus der Abwesenheit von Rückstreuung durch die Erhaltung des Pseudospins. Bei schrägem Einfall auf eine Stufe ist die Transmissionswahrscheinlichkeit $T < 1$ ohne evaneszente Wellen in der Stufe. Der Transmissionskoeffizient ergibt sich aus der Stetigkeit der Wellenfunktionen und der Impulserhaltung parallel zur Stufe. Dies führt auf ein Brechungsgesetz in Analogie zum Brechungsgesetz der Optik. Bei schrägem Einfall auf eine Barriere können Fabry-Pérot-Resonanzen mit $T = 1$ auftreten, wenn das Produkt aus Normalkomponente des Wellenzahlvektors in der Stufe und Stufenbreite ein ganzzahliges Vielfaches von π ist.

Um die Streuung einer einfallenden ebenen Welle an einer kreisförmigen Stufe zu untersuchen, lösen wir die Weyl-Gleichung in Polarkoordinaten und entwickeln einfallende, transmittierte und gestreute Welle in Partialwellen. Das Streuverhalten des Elektrons charakterisieren wir mittels der Streueffizienz Q und der Winkelverteilung der gestreuten radialen Wahrscheinlichkeitsstromdichte $j_r^{\pm}(\varphi)$. Die Ergebnisse werden mit dem Streuverhalten eines Schrödinger-Elektrons verglichen. Im Gegensatz zu einem Schrödinger-Elektron erfährt ein Dirac-Elektron keine Rückstreuung, wie $j_r^{\pm}(\varphi)$ zeigt. Im Gegensatz zur strukturlosen Form von Q für ein Schrödinger-Elektron, für das es unter der Stufe nur evaneszente Wellen gibt, zeigt die Streueffizienz des Dirac-Elektrons wegen der Existenz oszillatorischer Zustände für $E < 0$ ein oszillatorisches Verhalten. Für kleine Energien kann es zur resonanten Anregung von Moden des Kreispotentials kommen, die zu einer starken Erhöhung der Streueffizienz führt. Dominiert nur eine Mode, ergibt sich eine Abstrahlcharakteristik mit n Kosinus-Peaks, wobei n die Ordnung der Mode ist. In diesem Fall kommt es zu einer langen Lokalisierung des Elektrons auf einem ringförmigen Orbit im Kreispotential.

Das reiche Streuverhalten am Kreispotential weist eine starke Ähnlichkeit mit der Streuung elektromagnetischer Wellen an einer Kugel (Mie-Streuung) auf [16]. Die Untersuchung dieser Analogie zur Optik, insbesondere mit Blick auf die Resonanzen und die Lokalisierung von Elektronen im Kreispotential, ist eine lohnenswerte Fortführung dieser Arbeit.

A Streuung eines Schrödinger-Elektrons am kreisförmigen Stufenpotential

Damit ein Vergleich zwischen der Streuung eines masselosen Dirac-Elektrons und einem Schrödinger-Elektron angestellt werden kann, wollen wir im Folgenden die Größen Q und j_r^r für die Streuung an einem Potential gemäß Gleichung (5.1) im Rahmen der Schrödinger-Theorie finden.

A.1 Lösungen der Schrödinger-Gleichung

Mit $2m \equiv 1$ ist der freie Hamiltonoperator eines Schrödinger-Elektrons in Polarkoordinaten gegeben als [3]

$$H_{\text{Sch.}} = p^2 = - \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L_z^2}{r^2} \right). \quad (\text{A.1})$$

Der vollständige Satz kommutierender Observablen ist gegeben durch $H_{\text{Sch.}}$ und L_z . Die Eigenfunktionen $\psi(r, \varphi)$ der Eigenwertgleichung

$$H_{\text{Sch.}} \psi(r, \varphi) = E \psi(r, \varphi) \quad (\text{A.2})$$

lassen sich somit in einen Radial- und Winkelanteil separieren, $\psi_m(r, \varphi) = \phi_m(r) \chi_m(\varphi)$, wobei $\chi_m(\varphi)$ die Lösung der Drehimpuls-Eigenwertgleichung aus Gleichung (5.7) darstellt. Der Radialanteil von $\psi_m(r, \varphi)$ ist jetzt durch die Differentialgleichung

$$- \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} \right) \phi_m(r) = E \phi_m(r) \quad (\text{A.3})$$

bestimmt. Substituiert man $z = \sqrt{E}r$ und $\phi_m(r) = Z_m(z)$, dann ergibt sich aus Gleichung (A.3) die Bessel'sche Differentialgleichung [16, 17]

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial z} + \left(1 - \frac{m^2}{z^2} \right) \right] Z_m(z) = 0, \quad (\text{A.4})$$

in der $Z_m(z)$ die Besselfunktionen sind. Die Eigenfunktionen der Eigenwertgleichung (A.2) lassen sich jetzt angeben als

$$\psi_m(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} Z_m(\sqrt{E}r) e^{im\varphi}. \quad (\text{A.5})$$

Die Wellenfunktion des einfallenden Elektrons lässt sich als Entwicklung nach Bessel-Funktionen erster Art schreiben [16],

$$\psi_e = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(kr) e^{in\varphi}, \quad (\text{A.6})$$

wobei $k = \sqrt{E}$. Analog lässt sich die gestreute Wellenfunktion

$$\psi_r = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n a_n H_n^{(1)}(kr) e^{in\varphi} \quad (\text{A.7})$$

mit komplexen Koeffizienten a_n aufstellen, wobei die Wahl der Hankel-Funktion durch die Randbedingungen festgelegt ist. Zum Auffinden der transmittierten Wellenfunktion muss in zwei Fälle bezüglich des Brechungsindex $\alpha = \text{sgn}(E - V_0)$ unterschieden werden. Für

$\alpha = -1$ lässt sich in Gleichung (A.4) die Substitution $z = \sqrt{E - V_0}r = i\sqrt{V_0 - E}r = iqr = ix$ durchführen, die auf die Differentialgleichung

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} - \left(1 + \frac{m^2}{x^2} \right) \right) \phi_m(x) = 0 \quad (\text{A.8})$$

führt. Lösungen dieser Differentialgleichung sind die modifizierten Bessel-Funktionen [16, 17]

$$I_m(x) = i^{-m} J_m(ix), \quad (\text{A.9})$$

die nun zum Aufstellen der transmittierten Wellenfunktion mit den komplexen Koeffizienten b_n verwendet werden können:

$$\psi_t(\alpha = -1) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n b_n I_n(qr) e^{in\varphi}. \quad (\text{A.10})$$

Für $\alpha = 1$ gilt wieder die Differentialgleichung (A.4) mit $z = qr = \sqrt{E - V_0}r$ und die transmittierte Wellenfunktion schreibt sich als

$$\psi_t(\alpha = 1) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n b_n J_n(qr) e^{in\varphi}. \quad (\text{A.11})$$

A.2 Berechnung der Streukoeffizienten

Die Stetigkeit der Wellenfunktionen und ihrer Ableitungen

$$\psi_e(r = R) + \psi_r(r = R) = \psi_t(r = R), \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{\partial \psi_e}{\partial r}(r = R) + \frac{\partial \psi_r}{\partial r}(r = R) = \frac{\partial \psi_t}{\partial r}(r = R) \quad (\text{A.13})$$

führt auf ein Gleichungssystem zur Bestimmung der Streukoeffizienten a_n und b_n . Nach Lösen dieses Gleichungssystem ergeben sich die Streukoeffizienten zu

$$a_n(\alpha = -1) = \frac{k J'_n(kR) I_n(qR) - q J_n(kR) I'_n(qR)}{q H_n^{(1)}(kR) I'_n(qR) - k H_n^{(1)}(kR) I_n(qR)}, \quad (\text{A.14})$$

$$a_n(\alpha = 1) = \frac{k J'_n(kR) J_n(qR) - q J_n(kR) J'_n(qR)}{q H_n^{(1)}(kR) J'_n(qR) - k H_n^{(1)}(kR) J_n(qR)}. \quad (\text{A.15})$$

Für den Fall $\alpha = 1$ lässt sich mit Hilfe der Rekursionsbeziehungen (5.18) und (5.19), sowie der Beziehung (5.31) die Relation $J'_{-n}(kR) = (-1)^n J'_n(kR)$ ableiten, die gleichermaßen auch für die Hankel-Funktionen gilt. Es ergibt sich damit $a_{-n}(\alpha = 1) = a_n(\alpha = 1)$. Für den Fall $\alpha = -1$ ergibt sich mit Hilfe der Rekursionsbeziehungen für modifizierte Bessel-Funktionen [17]

$$I'_n(qR) = \frac{n}{qR} I_n(qR) + I_{n+1}(qR), \quad (\text{A.16})$$

$$I'_n(qR) = -\frac{n}{qR} I_n(qR) - I_{n-1}(qR) \quad (\text{A.17})$$

und der Beziehung $I_{-n}(qR) = I_n(qR)$ die Relation $I'_{-n}(qR) = I'_n(qR)$. Daraus folgt $a_{-n}(\alpha = -1) = a_n(\alpha = -1)$, sodass letztendlich allgemein die Beziehung

$$a_{-n} = a_n \quad (\text{A.18})$$

angegeben werden kann.

A.3 Radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte j_r^r der gestreuten Welle

Die Berechnung der Wahrscheinlichkeitsstromdichte erfolgt durch ($2m \equiv 1$) [3]

$$\mathbf{j} = i(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi), \quad (\text{A.19})$$

wobei der Nabla-Operator in Polarkoordinaten definiert ist durch

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial r} \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{e}_\varphi. \quad (\text{A.20})$$

Der radiale Anteil der Wahrscheinlichkeitsstromdichte j_r^r berechnet sich nach den Gleichungen (A.7), (A.19) und (A.20) zu

$$j_r^r = i \sum_{m,n} \left(i^{m-n} a_m a_n^* H_m^{(1)}(kr) \frac{\partial H_n^{(1)*}(kr)}{\partial r} e^{i(m-n)\varphi} - \text{c.c.} \right) \quad (\text{A.21})$$

Unter Ausnutzung der Asymptotik der Hankel-Funktionen (5.23) folgt daraus

$$\begin{aligned} j_r^r &= \frac{2}{\pi r} \sum_{m,n=0}^{\infty} \left(a_m a_n^* e^{i(m-n)\varphi} + a_m^* a_n e^{-i(m-n)\varphi} \right) \\ &= \frac{4}{\pi r} \sum_{m,n=0}^{\infty} a_m a_n^* e^{i(m-n)\varphi} = \frac{2}{\pi r} \left| \sum_{m,n} a_m e^{im\varphi} \right|^2 \\ &= \frac{4}{\pi r} \left(2 \sum_{m=1}^{\infty} a_m \cos(m\varphi) + a_0 \right) \left(2 \sum_{n=1}^{\infty} a_n^* \cos(n\varphi) + a_0 \right) \\ &= \frac{4}{\pi r} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n^2 |a_n|^2 \cos^2(n\varphi) + 2 \sum_{m < n} \varepsilon_n \varepsilon_m \text{Re}(a_n^* a_m) \cos(n\varphi) \cos(m\varphi) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

$$\text{mit } \varepsilon_n = \begin{cases} 1 & \text{für } n = 1 \\ 2 & \text{für } n \geq 1 \end{cases}.$$

A.4 Streueffizienz Q

Unter Verwendung der Rekursionsbeziehung (5.16) und Gleichung (A.7) erhält man

$$\psi_r \frac{\partial}{\partial r} \psi_r^* = \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} i^{n-m} a_n a_m^* \left[\frac{m}{r} H_m^{(1)*}(kr) - k H_{m+1}^{(1)*}(kr) \right] H_n^{(1)*}(kr) e^{i(n-m)\varphi}. \quad (\text{A.23})$$

Mit diesem Ausdruck lässt sich die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte bestimmen und es folgt für den radialen Wahrscheinlichkeitsstrom der Ausdruck

$$I_r^r = \int_0^{2\pi} j_r^r r d\varphi = 2i\pi k r \sum_{m=-\infty}^{\infty} |a_m|^2 \left(H_{m+1}^{(1)}(kr) H_m^{(1)*}(kr) - H_{m+1}^{(1)*}(kr) H_m^{(1)}(kr) \right). \quad (\text{A.24})$$

Unter Benutzung der Asymptotik der Hankel-Funktionen (5.23) folgt daraus

$$I_r^r = 8 \sum_{m=-\infty}^{\infty} |a_m|^2 \quad (\text{A.25})$$

Der Wahrscheinlichkeitsstrom der einfallenden Welle ergibt sich nach Gleichung (A.19) zu $j^e = 2k = 2\sqrt{E}$. Damit folgt für die Streueffizienz der Ausdruck

$$Q = \frac{2}{kR} \sum_{m=-\infty}^{\infty} |a_m|^2. \quad (\text{A.26})$$

Literatur

- [1] G. GAMOW, *Z. Phys.* **51**, 204 (1928).
- [2] R. FOWLER and L. NORDHEIM, *Proceedings of the Royal Society of London* **119** (781), 173–181 (1928).
- [3] F. SCHWABL, *Quantenmechanik*, Springer, 1993.
- [4] S. GASIOROWICZ, *Quantenphysik*, Oldenburg, 2005.
- [5] O. KLEIN, *Z. Phys.* **53**, 157 (1929).
- [6] M. I. KATSNELSON, K. S. NOVOSELOV, and A. K. GEIM, *Nat. Phys.* **2**, 620 (2006).
- [7] P. E. ALLAIN and J. FUCHS, *Eur. Phys. J. B* **83**, 301 (2011).
- [8] B. H. ET AL., *Phys. Rev. Lett.* **98**, 236803 (2007).
- [9] R. V. GORBACHEV, A. S. MAYOROV, A. K. SAVCHENKO, D. W. HORSELL, and F. GUINEA, *Nano Lett.* **8**, 1995 (2008).
- [10] N. S. ET AL., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 026807 (2009).
- [11] A. F. YOUNG and P. KIM, *Nat. Phys.* **5**, 222 (2009).
- [12] T. TUDOROVSKIY, K. J. A. REIJNDERS, and M. I. KATSNELSON, *Phys. Scr.* **T146**, 014010 (2012).
- [13] F. SCHWABL, *Quantenmechanik für Fortgeschrittene*, Springer, 1997.
- [14] A. H. C. NETO, F. GUINEA, N. M. R. PERES, K. S. NOVOSELOV, and A. K. GEIM, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [15] P. R. WALLACE, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
- [16] J. A. STRATTON, *Electromagnetic Theory*, IEEE Press, 2007.
- [17] W. MAGNUS and F. OBERHETTINGER, *Formeln und Sätze für die speziellen Funktionen der mathematischen Physik*, Springer, 1948.
- [18] W. H. PRESS, S. A. TEUKOLSKY, W. T. VETTERLING, and B. P. FLANNERY, *Numerical Recipes in Fortran 77*, Cambridge University Press, 1996.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich abschließend bei allen Personen bedanken, die mich bei der Erstellung dieser Arbeit unterstützt haben. Dafür möchte ich mich zunächst bei Herrn Prof. Fehske bedanken, der mit seinen Ratschlägen und Hinweisen einen großen Anteil an dem Entstehen dieser Arbeit hatte. Ganz besonderer Dank gilt Rafael Heinisch, der durch seine engagierte Betreuung und Antizipation eine große Hilfe war. Nicht zuletzt möchte ich meinen Freunden und Bekannten danken, die mir oft bei kleineren Problemen zu Seite standen und für einen angenehmen Ausgleich neben der Arbeit sorgten.

Den größten Dank schulde ich jedoch meinen Eltern, ohne die diese Arbeit niemals entstanden wäre.

Erklärung

Ich, Christian Schulz, versichere, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit selbständig verfasst und keine anderen Hilfsmittel als die angegebenen verwendet habe. Die Stellen, die anderen Werken dem Wortlaut oder dem Sinne nach entnommen sind, habe ich in jedem Falle durch Angaben der Quelle, auch der Sekundärliteratur, als Entlehnung kenntlich gemacht.

Greifswald, _____

Name, Vorname