Моделирование взаимодействия между электронами и фотонами в графене в приближении сильной связи

С.М.Р. Хуссейн[1,2], С.И. Харитонов[1,3], Н.Л. Казанский[1,3], В.С. Павельев[1]

[1]Институт систем обработки изображений РАН - филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Молодогвардейская 151, Самара, Россия, 443001
[2]University of Karbala, Karbala, 56001, Iraq
[3]Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

Аннотация. В работе проведена аналогия между описанием взаимодействия спина в переменном магнитном поле и электрона в дираковском метаматериале. Получено, что эти явления описываются одними и теме же уравнениями. Наличие сильного электромагнитного поля приводит к изменению спектра носителей заряда в дираковском материале. Взаимодействие линейно-поляризованного поля с электронами в дираковском материале приводит к анизотропии. Ось анизотропии совпадает с направлением электрического поля в линейно- поляризованной волне.

1. Введение

Поведение квантовой системы может существенно меняться под действием периодического возмущения. Ключевым параметром, определяющим характер взаимодействия системы с внешним полем, является отношение частоты возмущения к характерным энергетическим масштабам системы. В случае, если модуляция медленная, то есть частота возмущающего поля значительно меньше характерных энергий в системе, можно воспользоваться адиабатической теоремой, сформулированной Фоком. Эта теорема гласит, что в случае достаточно медленного возмущения, зависящего от времени, система в каждый момент времени будет оставаться в собственном состоянии. Тогда время можно рассматривать в качестве параметра, от которого зависят параметры Гамильтониана. То есть в случае, если у нас есть стационарный Гамильтониан $H_0(\lambda)$, где λ – набор параметров и для него известны собственные энергии и собственные состояния:

$$H_0(\lambda)\psi_n(\lambda)=\varepsilon(\lambda)\psi_n(\lambda),$$

то нестационарное уравнение для гамильтониана:

$$H(t)=H_0(\lambda)+V(t)$$

можно представить в виде стационарного $\tilde{H}\left(\tilde{\lambda}(t)\right)$, а собственные функции и энергии находятся из решения стационарного уравнения:

$$\tilde{H}\left(\tilde{\lambda}(t)\right)\psi_n\left(\tilde{\lambda}(t)\right)=\varepsilon_n\left(\tilde{\lambda}(t)\right)\psi_n\left(\tilde{\lambda}(t)\right)$$

случае, если частота поля близка к энергии перехода между какими, то двумя уровнями в системе, картина кардинально меняется, частности, в случае взаимодействия двухуровневой системы с электромагнитным полем, чья частота близка к энергии перехода наблюдаются осцилляции Раби между уровнями частота которых зависит от дипольного момента двухуровневой системы. Наконец, в случае высокочастотного поля, мы можем усреднить динамику системы по периоду, поля и также решать квазистационарную задачу.

$$i\partial\tau\psi(t) = H(t)\psi(t) \to i\,\bar{\varepsilon}\,\bar{\psi} = \tilde{H}\,\tilde{\psi}.$$

Свойства эффективного стационарного гамильтониана могут существенно отличаться от свойств гамильтониана свободной системы, Таким образом, возможно конструировать новые гамильтонианы и как следствие новые состояния вещества посредством периодического возбуждения. Внешнее высокочастотное поле создает искусственные калибровочные поля, которые изменяют основные характеристики эффективных статических гамильтонианов системы. Этот подход известный как Флоке инженерия или электромагнитное одевание, в случае одевающего электромагнитного поля, активно используется как в атомной так и в физике конденсированных сред было доказано, что это инструмент гибкого управления не только локальными спектральными свойствами системы, такими как эффективная масса квазичастиц групповая скорость и проводимость, но и глобальными топологическими свойствами системы.

2. Аналогия с поведением спиновой частицы в магнитном поле

2.1. Уравнение Шредингера электромагнитном поле для частицы со спином

Переход от частицы без спина к частице со спином происходит путем добавления к гамильтониану энергии взаимодействия собственного магнитного момента частицы с магнитным полем:

$$H = \frac{\left(P_x - (e/c)A_x\right)^2 + \left(P_y - (e/c)A_y\right)^2 + \left(P_z - (e/c)A_z\right)^2}{2m} + e\varphi - \frac{eh}{2mc}\left(\vec{\sigma}\vec{B}\right), \qquad (1)$$

где

$$\vec{\sigma}\vec{B} = \sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z\,, \qquad (2)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \psi = \begin{pmatrix} \varphi_1(x,y,z,t) \\ \varphi_2(x,y,z,t) \end{pmatrix}. \qquad (3)$$

Представим волновую функцию спиновой частицы в виде:

$$\psi = \begin{pmatrix} S_+(t) \\ S_-(t) \end{pmatrix} \varphi(x,y,z,t).$$

Гамильтониан взаимодействия представим в виде:

$$H = H_0 - \frac{eh}{2mc(\vec{\sigma}\vec{B})} \qquad (4)$$

$$H_0 = \frac{\left(P_x - (e/c)A_x\right)^2 + \left(P_y - (e/c)A_y\right)^2 + \left(P_z - (e/c)A_z\right)^2}{2m} + e\varphi, \qquad (5)$$

$$H = H_0 - \frac{eh}{2mc(\vec{\sigma}\vec{B})}\,, \qquad (6)$$

$$ih\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} S_+(t) \\ S_-(t) \end{pmatrix}\varphi(x,y,z,t) = H_0\begin{pmatrix} S_+(t) \\ S_-(t) \end{pmatrix}\varphi(x,y,z,t) - \frac{eh}{2mc(\vec{\sigma}\vec{B})\begin{pmatrix} S_+(t) \\ S_-(t) \end{pmatrix}\varphi(x,y,z,t)}, \qquad (7)$$

$$ih\left[\varphi(x,y,z,t)\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} S_+(t) \\ S_-(t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} S_+(t) \\ S_-(t) \end{pmatrix}\varphi(x,y,z,t)\right] =$$

$$= \begin{pmatrix} S_+(t) \\ S_-(t) \end{pmatrix} H_0\,\varphi(x,y,z,t) - \frac{eh}{2mc(\vec{\sigma}\vec{B})\begin{pmatrix} S_+(t) \\ S_-(t) \end{pmatrix}\varphi(x,y,z,t)}. \qquad (8)$$

Пусть теперь координатная часть волновой функции удовлетворяет уравнению:

$$ih\frac{\partial}{\partial t}\varphi(x,y,z,t)=H_0\,\varphi(x,y,z,t), \tag{9}$$

тогда спиновая часть волновой функции удовлетворяет:

$$ih\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}S_+(t)\\S_-(t)\end{pmatrix}=-\frac{eh}{2mc(\vec{\sigma}\vec{B})\begin{pmatrix}S_+(t)\\S_-(t)\end{pmatrix}}. \tag{10}$$

Пусть магнитное поле имеет вид:

$$B=B_0K+B_1(t)=B_0e_z+B_1(e_x\cos\omega t+e_y\sin\omega t). \tag{11}$$

В результате получается система двух дифференциальных уравнений относительно двух неизвестных функций:

$$\begin{gathered}ih\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}S_+(t)\\S_-(t)\end{pmatrix}=\frac{h\omega_0}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}S_+(t)\\S_-(t)\end{pmatrix}+\\+\frac{h\omega_1}{2}\left(\cos(\omega t)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}S_+(t)\\S_-(t)\end{pmatrix}+\sin(\omega t)\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}S_+(t)\\S_-(t)\end{pmatrix}\right),\end{gathered} \tag{12}$$

где

$$\mu_B B_0=\frac{h\omega_0}{2};\ \mu_B B_1=\frac{h\omega_1}{2}.$$

Для решения уравнения в случае гармонической зависимости поля сделаем подстановку:

$$\begin{pmatrix}S_+(t)\\S_-(t)\end{pmatrix}=\exp\left(-\frac{i\omega_1 t}{2}\sigma_z\right)\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\\psi_-(t)\end{pmatrix}\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\\psi_-(t)\end{pmatrix}\right); \tag{13}$$

теперь уравнение относительно функции $\psi(t)$ имеет вид:

$$\begin{gathered}ih\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\\psi_-(t)\end{pmatrix}=\frac{h(\omega_0-\omega)}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\\psi_-(t)\end{pmatrix}+\\+\left(\exp\left(\frac{i\omega t}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right)V(t)\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right)\right)\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\\psi_-(t)\end{pmatrix},\end{gathered} \tag{14}$$

$$V(t)=\frac{h\omega_1}{2(\sigma_x\cos\omega t+\sigma_y\sin\omega t)}. \tag{15}$$

После выполнения всех преобразований:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\\psi_-(t)\end{pmatrix}=-i\frac{(\omega_0-\omega)}{2}\sigma_z\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\\psi_-(t)\end{pmatrix}-\frac{i\omega_1}{2}\sigma_x\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\\psi_-(t)\end{pmatrix} \tag{16}$$

В развернутом виде:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\\psi_-(t)\end{pmatrix}=\left(-i\frac{(\omega_0-\omega)}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}-\frac{i\omega_1}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\right)\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\\psi_-(t)\end{pmatrix}. \tag{17}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\\psi_-(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-i\frac{(\omega_0-\omega)}{2}&\frac{i\omega_1}{2}\\\frac{i\omega_1}{2}&i\frac{(\omega_0-\omega)}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\\psi_-(t)\end{pmatrix}. \tag{18}$$

Аналитическое решение имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\\psi_-(t)\end{pmatrix}=\exp\left[\begin{pmatrix}-i\frac{(\omega_0-\omega)}{2}&\frac{i\omega_1}{2}\\\frac{i\omega_1}{2}&i\frac{(\omega_0-\omega)}{2}\end{pmatrix}t\right]\begin{pmatrix}\psi_+(0)\\\psi_-(0)\end{pmatrix}. \tag{19}$$

В обычном виде система дифференциальных уравнений имеет вид:

$$\frac{\mathrm{d}\psi_+(t)}{\mathrm{d}t} = -i\frac{(\omega_0-\omega)}{2}\psi_+(t) + \frac{i\,\omega_1}{2}\psi_-(t), \tag{20}$$

$$\frac{\mathrm{d}\psi_-(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{i\,\omega_1}{2}\psi_+(t) + i\frac{(\omega_0-\omega)}{2}\psi_-(t). \tag{21}$$

Решение уравнения относительно спиновой функции имеет вид:

$$\begin{pmatrix} S_+(t) \\ S_-(t) \end{pmatrix} = \exp\left(-\frac{i\,\omega t}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right)\exp\left[\begin{pmatrix} -i\frac{(\omega_0-\omega)}{2} & \frac{i\,\omega_1}{2} \\ \frac{i\,\omega_1}{2} & i\frac{(\omega_0-\omega)}{2} \end{pmatrix} t\right]\begin{pmatrix} S_+(0) \\ S_-(0) \end{pmatrix}. \tag{22}$$

2.2. Резонансный случай

Рассмотрим случай резонанса: $\omega=\omega_0$

$$\begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ \psi_-(t) \end{pmatrix} = \exp\left[-i\frac{\omega_1 t}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} \psi_+(0) \\ \psi_-(0) \end{pmatrix} \tag{23}$$

Решение исходного уравнения относительно спиновой функции имеет вид:

$$\begin{pmatrix} S_+(t) \\ S_-(t) \end{pmatrix} = \exp\left[-i\frac{\omega_0 t}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right]\exp\left[-i\frac{\omega_1 t}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} S_+ \\ S_- \end{pmatrix}. \tag{24}$$

3. Взаимодействие электромагнитного поля с электронами в дираковском материале

Невозмущенный Гамильтониан, соответствующий такому материалу, можно записать в следующем виде:

$$H_0 = \begin{pmatrix} \frac{\Delta_g}{2} + \frac{\tau s \Delta_{so}^c}{2} & \gamma\left(\tau k_x - ik_y\right) \\ \gamma\left(\tau k_x + ik_y\right) & -\frac{\Delta_g}{2} + \frac{\Delta_{so}^v \tau s}{2} \end{pmatrix}, \tag{25}$$

где $k=(k_x, ik_y)$ × электронный волновой вектор в плоскости слоя, Δ_g ширина запрещенной зоны, γ пропорциональна скорости Ферми квазичастиц Δ_{so}^v и Δ_{so}^c спин-орбитальное расщепление валентной зоны и зоны проводимости, соответственно, $s=\pm 1$ × индекс спина, $\tau=\pm 1$ × долинный индекс, соответствующий K и K' соответственно. В дальнейшем мы рассматриваем монослой, лежащий в плоскости (x, y) на $z=0$. Взаимодействие с электромагнитным полем записывается в виде:

$$p \to p - eA(t), \tag{26}$$

Гамильтониан, который включает электромагнитное взаимодействие имеет вид:

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{|e|\gamma\left(\tau A_x - iA_y\right)}{\hbar} \\ \frac{|e|\gamma\left(\tau A_x + iA_y\right)}{\hbar} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_{\tau s}^c & \gamma\left(\tau k_x - ik_y\right) \\ \gamma\left(\tau k_x - ik_y\right) & \varepsilon_{\tau s}^c \end{pmatrix}. \tag{27}$$

Рассмотрим случай линейной поляризации. В случае, если электромагнитное поле поляризовано вдоль оси x, то вектор потенциал имеет вид:

$$A = \left(\frac{E_0}{\omega}\cos\omega t, 0\right). \tag{28}$$

Гамильтониан записывается:

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\mathbf{k}}, \tag{29}$$

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\Omega\tau\hbar\omega}{2} \\ \frac{\Omega\tau\hbar\omega}{2} & 0 \end{pmatrix}\cos\omega t \tag{30}$$

описывает взаимодействие электромагнитного поля с электронами:

$$\mathcal{H}k = \begin{pmatrix} \frac{\Delta_g}{2} + \frac{\tau s \Delta_{so}^c}{2} & \gamma\left(\tau k_x - i k_y\right) \\ \gamma\left(\tau k_x + i k_y\right) & -\frac{\Delta_g}{2} - \frac{\tau s \Delta_{so}^c}{2} \end{pmatrix}. \tag{31}$$

Гамильтониан свободного электрона в дираковском материале. Параметр, характеризующий интенсивность взаимодействия электрона с электромагнитном полем:

$$\Omega = \frac{2\gamma |e| E_0}{\left(\mathrm{h}\,\omega\right)^2}. \tag{32}$$

Для решения уравнения, запишем решение нестационарного уравнения Шредингера для гамильтониана:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_0}{\partial t} = \mathcal{H}_0 \psi_0, \tag{33}$$

Для этого гамильтониана имеется решение:

$$\psi_0^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \exp\left[\mathrm{m} \frac{i\Omega\tau \sin \omega t}{2} \right]. \tag{34}$$

Эти два решения образуют базис, поэтому решение общей задачи представим в виде линейной комбинации базисных решений:

$$\psi_{\mathbf{k}} = a_1(t)\psi_0^{+} + a_2(t)\psi_0^{-}. \tag{35}$$

Далее подставляя, это решение в нестационарное уравнение Шредингера получаем уравнение относительно функций $a_1(t)$, $a_2(t)$:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{a}_1(t) &= \left[\frac{\varepsilon_{\tau s}^c + \varepsilon_{\tau s}^v}{2} + \gamma \tau k_x \right] a_1(t) + \left[\frac{\varepsilon_{\tau s}^c - \varepsilon_{\tau s}^v}{2} + i\gamma k_y \right] e^{i\Omega t \sin \omega t} a_2(t), \\ i\hbar \dot{a}_2(t) &= \left[\frac{\varepsilon_{\tau s}^c + \varepsilon_{\tau s}^v}{2} - \gamma \tau k_x \right] a_2(t) + \left[\frac{\varepsilon_{\tau s}^c - \varepsilon_{\tau s}^v}{2} - i\gamma k_y \right] e^{-i\Omega t \sin \omega t} a_1(t). \end{aligned} \tag{36}$$

Из теоремы Флоке следует, что волновая функция имеет вид:

$$\Psi\left(\mathbf{r}, t\right) = e^{-(i\varepsilon(\mathbf{k})t)/\mathrm{h}} \phi\left(\mathbf{r}, t\right). \tag{37}$$

Отметим, что для квазиэнергия для систем, находящихся под действием периодического возмущения имеет тот же смысл, как обычная энергия для систем в стационарном состоянии. Эти значения задают энергетический спектр электронов, “одетых” электромагнитным полем.

4. Обсуждение результатов

В результате проведенного исследования получено, что поведение электрона в дираковском материале описывается теми же уравнениями, что и поведение спина в переменном магнитном поле. Взаимодействие линейно-поляризованного поля с электронами в дираковском материале приводит к анизотропии. Ось анизотропии совпадает с направлением электрического поля в линейно-поляризованной волне.

5. Литература

1. Kibis, O. All-optical band engineering of gapped Dirac materials / O. Kibis, K. Dini, I. Iorsh, I. Shelykh // Physical Review B. – 2017. – Vol. 95(12). – P. 125401. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.125401.
2. Dini, K. Optical valleytronics in gapped graphene / K. Dini, I.V. Iorsh, A. Bogdanov, I.A. Shelykh // arXiv preprint arXiv:1807.01228. – 2018.

Simulation of the interaction of electrons and photons in grapheme in the strong coupling approaimation

S.M.R. Hussien[1,2], S.I. Kharitonov[1,3], N.L. Kazanskiy[1,3], V.S. Pavelyev

[1]Image Processing Systems Institute of RAS - Branch of the FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Molodogvardejskaya street 151, Samara, Russia, 443001
[2]University of Karbala, Karbala, 56001, Iraq
[3]Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

Abstract. An analogy between the description of the interaction of a spin in an alternating magnetic field and an electron in a Dirac metamaterial has been drawn. It is obtained that these phenomena are described by the same equations. The presence of a strong electromagnetic field leads to a change in the spectrum of charge carriers in the Dirac material. The interaction of a linearly polarized field with electrons in a Dirac material leads to anisotropy. The anisotropy axis coincides with the direction of the electric field in a linearly polarized wave.