ใบรับรองวิทยานิพนธ์
บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (ฟิสิกส์)
ปริญญา

ฟิสิกส์ ฟิสิกส์
สาขา **ภาควิชา**

เรื่อง ผลของความเครียดที่มีต่อการเกิดสวิงเกอร์แพร์ในแกรฟีน

Effects of Strain on the Schwinger Pair Creation in Graphene

นามผู้วิจัย นางสาวพันธุ์ทิพย์ ฟั่นบ้านไร่

ได้พิจารณาเห็นชอบโดย

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก ....
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์สุธี บุญช่วย, Ph.D.)

หัวหน้าภาควิชา ....
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์สุรศักดิ์ เชียงกา, Dr.rer.nat.)

บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์รับรองแล้ว

....
(รองศาสตราจารย์กัญจนา ธีระกุล, D.Agr.)
คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

วันที่ .... **เดือน** .... **พ.ศ.** ....

วิทยานิพนธ์

เรื่อง

ผลของความเครียดที่มีต่อการเกิดสวิงเกอร์แพร์ในแกรฟีน

Effects of Strain on the Schwinger Pair Creation in Graphene

โดย

นางสาวพันธุ์ทิพย์ ฟั่นบ้านไร่

เสนอ

บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
เพื่อความสมบูรณ์แห่งปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (ฟิสิกส์)
พ.ศ. 2558

พันธุ์ทิพย์ ฟั่นบ้านไร่ 2558: ผลของความเครียดที่มีต่อการเกิดสวิงเกอร์แพร์ในแกรฟีน ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (ฟิสิกส์) สาขาฟิสิกส์ ภาควิชาฟิสิกส์ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: ผู้ช่วยศาสตราจารย์สุธี บุญช่วย, Ph.D. 54 หน้า

ในงานวิจัยนี้ เราศึกษาสมการทั่วไปของเวลย์ฮามิลโทเนียน (The general two-dimension Wely Hamiltonian) เพื่อใช้ในการอธิบายรูปแบบการบิดเบี้ยวของแลตทิซในแกรฟีนภายใต้ความเครียดในแบบต่างๆ คือ ความเครียดแบบเฉือน (shear strain) ความเครียดแบบเทนไซน์ไอโซ-โทรปิก (Tensile isotopic strain) ความเครียดแบบเก้าอี้พับแขน (Armchair uniaxial strain) และความเครียดแบบซิกแซก (Zigzag uniaxial strain) ซึ่งความเครียดในแต่ละแบบเป็นตัวกำหนดรูปแบบของการกระจายการแผ่รังสีของโฟตอนในแกรฟีน คือ ปริมาณของการกระจายการแผ่รังสีของโฟตอนเพิ่มขึ้นหรือลดลง และเส้นพลังงานเฟอร์มี (Fermi line) เปลี่ยนรูปแบบจากวงกลมไปเป็นวงรี เนื่องจากลักษณะเฉพาะของความเครียดในรูปแบบต่างๆ

_______________ _______________________________ _____ /_____ /_____

ลายมือชื่อนิสิต ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก

Pantip Fanbanrai 2015: Effects of Strain on the Schwinger Pair Creation in Graphene. Master of Science (Physics), Major Field: Physics, Department of Physics. Thesis Advisor: Assistant Professor Sooty Boonchui, Ph.D. 54 pages.

We investigate the generalized two-dimensional Weyl Hamiltonian, which describes mechanically deformed graphene under pressure. The strain can be suitable engineering of the amplitude associated with the Schwinger pair creation. The influences of the distorted lattices, such as tensile isotropic strain, shear strain, uniaxial armchair strain, and zigzag strain, on the regime of photon emission distribution have been analyzed. We obtain that magnitude of emission distribution decreases or increases, due to characteristic strains. They can be suitable engineering by using the mechanical strains.

_______________ __________________________________ _____ /_____ /_____

Student's signature Thesis Advisor's signature

กิตติกรรมประกาศ

ผู้วิจัยขอกราบขอบพระคุณ ผศ.ดร.สุธี บุญช่วย อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ที่ให้คำปรึกษาในการเรียน การค้นคว้าวิจัย ตลอดจนการตรวจแก้ไขวิทยานิพนธ์จนกระทั่งเสร็จสมบูรณ์

ขอกราบขอพระคุณอาจารย์ภาควิชาฟิสิกส์ทุกท่านที่ได้อบรมสั่งสอนและมอบความรู้อันเป็นประโยชน์อย่างยิ่งในการนำไปใช้ประโยชน์ต่อไป และเจ้าหน้าที่ภาควิชาฟิสิกส์ทุกท่าน ที่ได้ให้ความช่วยเหลือและให้คำแนะนำต่างๆ

ด้วยความดีหรือประโยชน์อันใดเนื่องจากวิทยานิพนธ์เล่มนี้ ขอมอบแด่คุณพ่อ คุณแม่ ที่ได้อบรมและให้กำลังใจผู้วิจัยมาตลอดในทุกเรื่อง

พันธุ์ทิพย์ ฟั่นบ้านไร่

พฤษภาคม 2558

สารบัญ

สารบัญภาพ

ผลของความเครียดที่มีต่อการเกิดสวิงเกอร์แพร์ในแกรฟีน

Effects of Strain on the Schwinger Pair Creation in Graphene

คำนำ

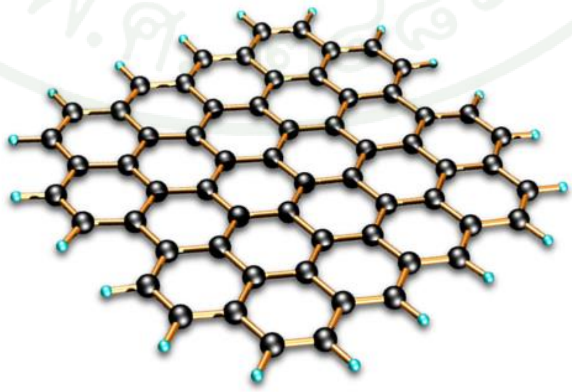
แกรฟีน (graphene) เป็นรูปแบบของผลึกคาร์บอนประกอบด้วยชั้นของคาร์บอนอะตอมที่หนาเพียง 1 ชั้น มีลักษณะเป็นแผ่นที่มีโครงสร้าง 2 มิติ เหมือนตาข่ายรูปหกเหลี่ยมคล้ายกับ รังผึ้ง โดยความหนาเท่ากับความหนาของคาร์บอนเพียงอะตอมเดียว หรือหนาประมาณ 0.34 นาโนเมตร แกรฟีนมีคุณสมบัติที่น่าทึ่งหลายอย่าง อาทิ เป็นวัสดุที่แข็งแรงกว่าเหล็กกล้าหลายร้อยเท่าและแม้แต่เพชร แกรฟีนสามารถยืดหยุ่นได้ถึง 20% สามารถนำไฟฟ้าได้ดีกว่าทองแดงหลายเท่า และยังใสโปร่งแสง นอกจากนี้อิเล็กตรอนที่อยู่บนโครงสร้างของแผ่นแกรฟีน สามารถเคลื่อนที่ด้วยความเร็วเกือบเท่ากับความเร็วแสง

ช่วงปี 2004 ในมหาวิทยาลัยแมนเชสเตอร์ (University of Manchester) อาจารย์และศิษย์ชาวรัสเซีย อังเดร ไกม์ (Andre Geim) และคอนสแตนติน โนโวเซลอฟ (Konstantin Novoselov) ผู้ศึกษาเกี่ยวกับแกรไฟต์ งานวิจัยของสองท่านนี้ มีแนวคิดที่แสนจะเรียบง่าย คือ พยายามทำให้แกรไฟต์บางลงมากที่สุดเท่าที่จะเป็นไปได้ ซึ่งโครงสร้างของแกรไฟต์มีลักษณะเป็นชั้นๆ ซ้อนกัน ดังนั้นเป้าหมายของไกม์ และโนโวเซลอฟจึงอยู่ที่การทำให้แกรไฟต์ "บางลงจนเหลือเพียงชั้นเดียว" หรืออีกความหมายหนึ่งก็ คือ "มีความหนาเท่ากับอะตอมเพียงอะตอมเดียว" นักวิทยาศาสตร์ส่วนใหญ่ในขณะนั้นเชื่อว่าการสร้างวัสดุทำให้มีความหนาเพียงอะตอมเดียวนั้นเป็นเรื่องที่เป็นไปไม่ได้ เพราะคาดการณ์กันว่าอะตอมจะสั่นในแนวขึ้น-ลง ทำให้โครงสร้างของวัสดุไม่เสถียร จนอาจทำให้อะตอมทั้งหมดระเหยเป็นไอ แต่ในปี ค.ศ. 2004 ไกม์และโนโวเซลอฟได้พิสูจน์ว่าความเชื่อนี้ผิด หลังจากสามารถสร้างแกรไฟต์ที่มีความหนาเพียงอะตอมเดียวได้สำเร็จ และวัสดุนี้มีความเสถียรเป็นอย่างมาก เรียกวัสดุนี้ว่า "แกรฟีน (graphene)" การค้นพบนี้ทำให้ไกม์และโนโวเซลอฟได้รางวัลโนเบลปี 2010

ก่อนหน้าที่ไกม์และโนโวเซลอฟจะสร้างแกรฟีนได้สำเร็จ ได้มีนักวิทยาศาสตร์ท่านอื่นๆ ที่พยายามใช้เทคโนโลยีขั้นสูงในการผ่าลอกชั้นแกรไฟต์ แต่ละชั้นออกจากกันเพื่อให้บางที่สุดเช่นกัน โดยนำแกรไฟต์ที่บดจนให้เป็นชิ้นเล็กๆ แล้วก็นำไปติดที่ปลายเข็มของกล้องจุลทรรศน์แบบใช้แรงของอะตอม (atomic force microscopy, AFM) แล้วใช้ปลายเข็มนี้ลากไปบนแผ่นซิลิกอนเทียบได้กับการขีดเขียนด้วยดินสอนาโน (nanopencil) เครื่อง AFM ช่วยควบคุมแรงขีดให้น้อยที่สุด เพื่อให้ชั้นคาร์บอนหลุดออกมาเพียงชั้นเดียวแต่น่าเสียดายสิ่งที่ได้ยังไม่ใช่แกรฟีน แต่เป็นเพียงแกรไฟต์ที่เป็นแผ่นบางๆ เท่านั้น ชั้นแกรไฟต์ที่ได้มีความหนามากกว่า 10 อะตอม เมื่อวิธีการที่ใช้เทคโนโลยีสูงขนาดนี้ยังทำไม่ได้ยิ่งทำให้เชื่อว่าวัสดุที่หนาเพียงอะตอมเดียวไม่มีจริง แต่ไกม์และโนโวเซลอฟได้เปลี่ยนความเชื่อนี้ด้วยวิธีการที่ง่ายอย่างเหลือเชื่อ

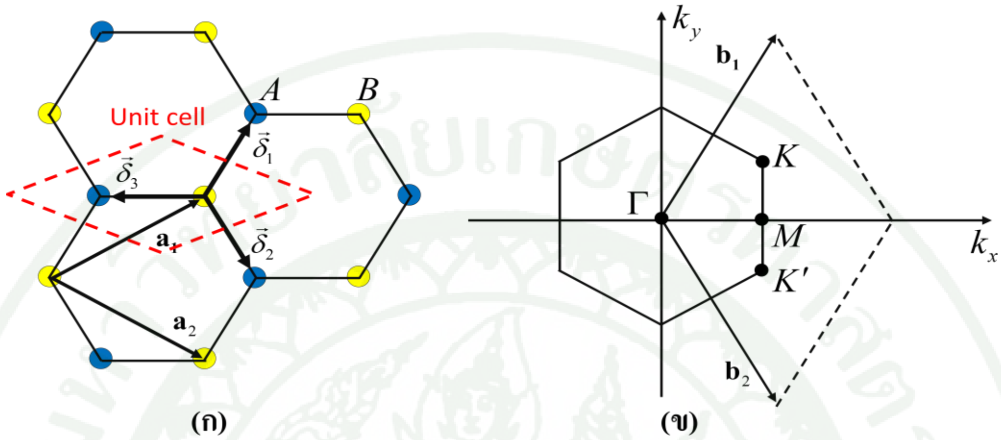
วิธีการที่ไกม์และโนโวเซลอฟใช้แยกแกรฟีนออกจากแกรไฟต์นั้น ใช้เพียงสก็อตเทปเท่านั้น วิธีการทำก็ง่ายจนใครๆ ก็สามารถทำเองที่บ้านได้ คือนำเศษแกรไฟต์วางไว้ที่ด้านเหนียวของเทปทบปลายอีกด้านของเทปให้แปะทับเศษแกรไฟต์ให้แน่น จากนั้นก็ดึงเทปให้แยกออกจากกันอย่างช้าๆ แล้วแกรไฟต์จะติดอยู่ที่ด้านเหนียวของเทปที่แยกจากกันทั้งสองด้านซึ่งเกิดจากเทปกาวดึงชั้นแกรไฟต์ให้แยกจากกัน เมื่อทำซ้ำไปเรื่อยๆ ด้วยเทปกาวใหม่ชั้นแกรไฟต์จะถูกดึงแยกให้บางลงเรื่อยๆ จนเหลือเพียงชั้นเดียวในที่สุด แกรฟีนจึงถูกแยกออกมาอย่างง่ายดายด้วยสก็อตเทป

แกรฟีนมีโครงสร้างแบบ 2 มิติ (Novoselv *et al.*, 2005) โดยที่อะตอมคาร์บอนมีการจัดวางตัวแบบรังผึ้งหกเหลี่ยม (hexagonal honeycomb lattice) หรือกล่าวได้อีกอย่างว่าโครงสร้างของแกรฟีนเหมือนกับโครงสร้างในชั้นหนึ่งชั้นบนแกรไฟต์ โดยที่ระยะห่างระหว่างอะตอมคาร์บอนเท่ากับ 0.142 นาโนเมตร



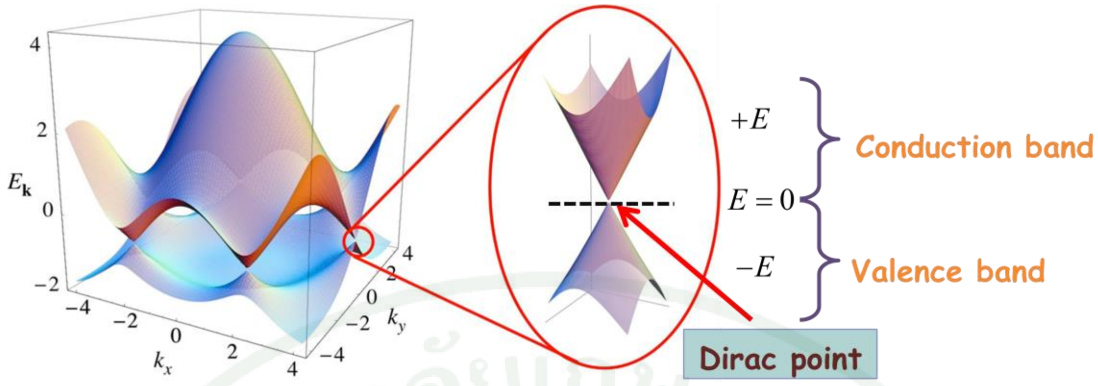
ภาพที่ 1 ลักษณะโครงสร้างของแกรฟีนในอุดมคติใน 2 มิติ

ในด้านคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของแกรฟีนซึ่งประกอบด้วยอะตอมคาร์บอนวางตัวในตำแหน่งแลตทิซรูปรังผึ้งในสองมิติ โดยที่ในหนึ่งหน่วยเซลล์ประกอบด้วยอะตอมคาร์บอนสองอะตอมตามที่แสดงไว้ในรูป



ภาพที่ 2 โครงสร้างแลตทิซและโซนบริลเลียน (Brillouin zone) ของแกรฟีน โดยที่รูป ก แสดงถึงโครงสร้างของแลตทิซของแกรฟีนที่ตำแหน่ง A และ B และรูป ข แสดงถึงโครงสร้างของโซนบริลเลียนในแกรฟีน

โดยที่อะตอมของคาร์บอนประกอบด้วยอิเล็กตรอนหกตัวในออร์บิทัล $1s^2\,2s^2\,2p^2$ ซึ่งอิเล็กตรอนวงนอก (valence electron) 4 ตัว สำหรับแกรฟีนนั้นออร์บิทัล $2s$ $2p_x$ และ $2p_y$ จึงเกิดการผสมกันระหว่างอิเล็กตรอนในออร์บิทัลที่ต่างกันแต่อยู่ในเชลล์เดียวกันหรือเรียกอีกอย่างว่าปรากฏการณ์ไฮบริไดเซชัน (hybridyzation) เป็นออร์บิทัลใหม่สามอันว่างอยู่ในระนาบเดียวกันและทำมุมซึ่งกันและกัน 120 องศา เรียกว่า $2sp^2$ ไฮบริไดเซชัน โดยที่จะมีอิเล็กตรอนวงนอกสุดสามตัวอยู่ในออร์บิทัลนี้ และเกิดพันธะโคเวเลนซ์กับอะตอมข้างเคียงทำให้เกิดคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของแกรฟีน (Mak *et al.*, 2008) ในขณะที่อิเล็กตรอนวงนอกที่เหลืออีกหนึ่งตัวที่อยู่ในออร์บิทัล $2p_z$ และจะเป็นจะเป็นตัวที่ทำให้เกิดคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของแกรฟีน (Neto *et al.*, 2009) โครงสร้างแถบพลังงาน (energy band) ของแกรฟีนประกอบด้วย แถบการนำ (conduction band) และแถบเวเลนซ์ (valence band) ซึ่งทั้งสองแถบตัดกันที่จุดที่เรียกว่า "จุดดิแรค (Dirac point)" ในโซนบริลเลียน (Brillouin zone) ทำให้ไม่มีช่องว่างระหว่างแถบทั้งสอง ดังภาพที่ 3



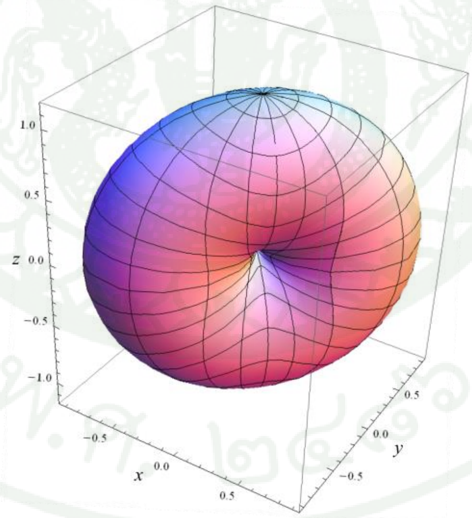
ภาพที่ 3 โครงสร้างแถบพลังงานของตัวนำประจุในแกรฟีน และภาพขยายที่จุดดิแรค ซึ่งพลังงาน E กับเลขคลื่น k จะสัมพันธ์กันแบบเชิงเส้น

สำหรับคุณสมบัติทางด้านอิเล็กทรอนิกส์ของแกรฟีน เราพิจารณาเฉพาะแถบพลังงานที่อยู่รอบๆ จุดดิแรค (Dirac point) หรือที่ระดับพลังงานต่ำๆ เท่านั้น เพราะแถบเวเลนซ์ในแกรฟีนจะถูกเติมเต็ม ทำให้ตำแหน่งของระดับพลังงานเฟอร์มี (Fermi level) อยู่ใกล้ๆ จุดเชื่อมต่อระหว่างแถบการนำ (conduction band) และแถบเวเลนซ์ (valence band) ที่พลังงานต่ำๆ ตัวนำประจุใน แกรฟีนมีพฤติกรรมที่สามารถอธิบายได้ด้วยดิแรคฮามิลโทเนียน (Dirac Hamiltronain) $\hat{H} = v_F \vec{p}\cdot\vec{\sigma}$ และพลังงานของแกรฟีนที่อยู่รอบๆ จุดดิแรค คือ $E^{\pm}(k) = \pm v_F p$ เมื่อ v_F คือความเร็วเฟอร์มี (Fermi velocity) และ $\vec{\sigma}$ คือเพาลีเมทริกซ์ (Pauli matrices) ซึ่งแสดงให้เห็นว่าอิเล็กตรอนประพฤติตัวเรียนแบบพฤติกรรมของอนุภาคสัมพันธภาพไร้มวล (massless relativistic particles) ซึ่งอธิบายได้ด้ายสมการดิแรค (Dirac equation) นอกจากนี้แกรฟีนยังมีคุณสมบัติที่แตกต่างจากโลหะและสารกึ่งตัวนำทั่วไปในแง่ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงาน E (energy) กับเลขคลื่น k (wave number) ของมันมีลักษณะเป็นเชิงเส้นตามสมการ $E^{\pm}(k) = \pm v_F \hbar k$ ในขณะที่โลหะและสารกึ่งตัวนำมีลักษณะความสัมพันธ์แบบพาราโบลา

ในที่งานวิจัยนี้ เราสนใจคุณสมบัติเชิงแสง (optical properties) ของแกรฟีนในขณะที่มีความเครียดแบบเฉือน (shear strain) ความเครียดแบบเทนไซน์ไอโซโทปิก (Tensile isotopic strain) ความเครียดแบบเก้าอี้พับแขน (Armchair uniaxial strain) และความเครียดแบบซิกแซก (Zigzag uniaxial strain) อยู่ในช่วง 20% (Bonaccorso *et al.*, 2010; Choi *et al.*, 2010) โดยในที่นี้ เราจะพิจารณาอิเล็กตรอนที่ระดับพลังต่ำๆ หรือที่อยู่รอบๆ จุดดิแ รค (Dirac point) ซึ่งสามารถอธิบายพฤติกรรมของอิเล็กตรอนได้ด้วยสมการทั่วไปของเวลย์ฮามิลโทเนียน (general Wely Hamiltonain) การที่แกรฟีนถูกบีบอัดหรือทำให้ยืดออกในสภาวะที่สมดุล พบว่าเส้นพลังงานเฟอร์มี (Fermi line)

เปลี่ยนรูปแบบจากวงกลมไปเป็นวงรี และผลกระทบอื่นๆ ที่มีต่อแกรฟีนเนื่องจากความเครียด (strain) คือจุดดิแรคเปลี่ยนตำแหน่งจากมุมของโซนบรินเลียนขณะที่ไม่มีความเครียด และไม่มีช่องระหว่างแถบ (band gap) ของแถบการนำ (conduction band) กับแถบแวเลนซ์ (valence band) ในกรณีที่ความเครียดไม่เกิน 20%

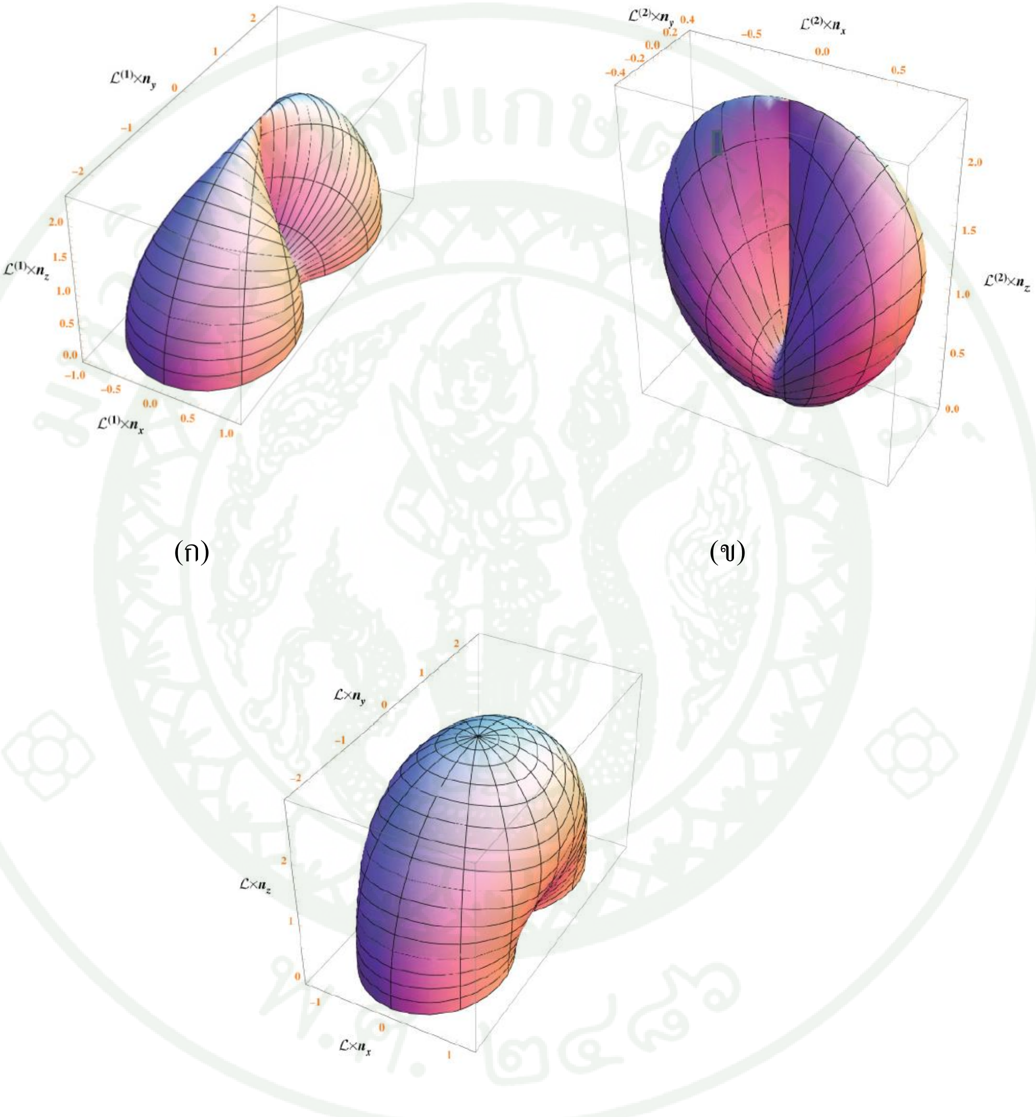
เมื่อเร็วๆ มานี้ ในปี ค.ศ. 2010 ได้มีการศึกษาเกี่ยวกับกับคุณสมบัติทางแสง (optical properties) ของแกรฟีน (Mecklenburg *et al.*, 2010) โดย M. Mecklenburg และคณะ ซึ่งพวกเขาได้ศึกษารูปแบบของการแผ่รังสีแบบเกิดเอง (spontaneous emission) ของโฟตอนของ โดยที่พวกเขาใช้สมการดิแรคฮามิลโทเนียน (Dirac Hamiltonain) ซึ่งเป็นสมการที่พิจารณาอิเล็กตรอนที่อยู่ที่ระดับงานพลังงานต่ำๆ หรือที่อยู่บริเวณรอบๆ จุดดิแรค (Dirac point) โดยทำให้สมการดิแรคฮามิลโทเนียนอยู่ในเทอมของอันตรกริยา $\hat{\mathscr{H}}_{\text{int}}$ ในควอนไทซ์อันดับที่สอง (second quantize) แล้วนำไปคำนวณหาแอมพลิจูดในรูปแบบอย่างง่าย ที่เรียกว่า “แผนภาพต้นไม้ของไฟน์แมน (Tree-level Feynman diagram)” แล้วนำแอมพลิจูดนี้ไปวิเคราะห์หารูปแบบการแผ่รังสีของโฟตอน และอัตราการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนจากสถานเริ่มต้นไปยังสถานะสุดท้าย



ภาพที่ 4 แผนภาพแสดงรูปแบบของการแผ่รังสีของโฟตอนในพิกัดทรงกลมของแกรฟีน

จากภาพที่ 4 จะพบว่ารูปแบบของการแผ่รังสีของโฟตอนมีลักษณะคล้ายกับโดนัด โดยที่ตรงกลางบุ๋มลงไป

ในปี ค.ศ. 2011 M. Lewkowicz และคณะ ได้ทำการใส่สนามแม่เหล็กเข้าไปในบริเวณรอบๆ จุดดิแรคของแกรฟีน เพื่อศึกษารูปแบบของการแผ่รังสีของโฟตอนในแกรฟีน (Novoselov *et al.*, 2004; Lewkowicz *et al.*, 2011) ซึ่งรูปแบบของการแผ่รังสีของโฟตอนในแกรฟีนที่พวกเขาได้รับมีลักษณะ ดังรูป



(ก) (ข)

(ค)

ภาพที่ 5 แผนภาพแสดงรูปแบบของการแผ่รังสีของโฟตอนในขณะที่ใส่สนามแม่เหล็กในระนาบของแกรฟีน โดยที่ (ก) คือกราฟแสดงการแผ่รังสีของโฟตอนขณะที่ใส่สนามแม่เหล็กขนานกับ ในระนาบของแกรฟีน (ข) คือกราฟแสดงการแผ่รังสีของโฟตอนขณะที่สนามแม่เหล็กตั้งฉากกับระนาบของแกรฟีน และ (ค) คือกราฟแสดงการแผ่รังสีของโฟตอนขณะที่ไม่มีสนามแม่เหล็ก

ในงานวิจัยนี้ เราจะทำการศึกษางานวิจัยที่ผ่านมาของ M. Mecklenburg และ M. Lewkowicz ต่อมาเราจึงมีแนวคิดที่จะดูรูปแบบของการแผ่รังสีของโฟตอนในแกรฟีนโดยการดึงแกรฟีนหรือบีบอัดแกรฟีนในลักษระต่างๆ โดยใช้ทฤษฎีบทดิแรค-เวลย์ฮามิลโทเนียน (Wely-Dirac Hamiltonain) ในการอธิบายพฤติกรรมของอิเล็กตรอนอยู่ที่ระดับพลังงานต่ำๆ หรือที่อยู่รอบๆ จุดดิแรคภายใต้ความเครียดในแบบต่างๆ คือ ความเครียดแบบเฉือน (shear strain) ความเครียดแบบเทนไซน์ไอโซ-โทปิก (Tensile isotopic strain) ความเครียดแบบเก้าอี้พับแขน (Armchair uniaxial strain) และความเครียดแบบซิกแซก (Zigzag uniaxial strain) ในส่วนที่ 3 คำนวณหารูปแบบของการแผ่รังสีของโฟตอนเนื่องจากความเครียด (stain) ต่อจากนั้นเราจะแสดงผลของที่ได้จากการคำนวณในส่วนที่ 4 และสุดท้ายเราจะสรุปผลและวิเคราะห์ผลในส่วนที่ 5

วัตถุประสงค์

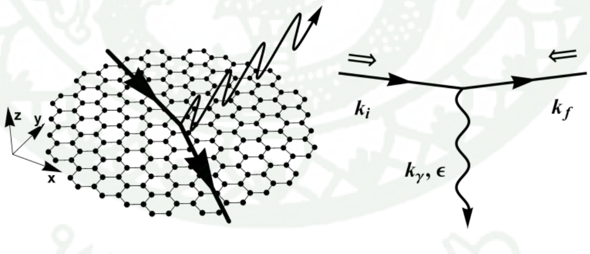
ในงานวิจัยนี้ เราจะการพิจารณารูปแบบของสมการทั่วไปของเวลย์ฮามิลโทเนียน (Wely Hamiltonial) ในพิกัด 2 มิติ ที่อิเล็กตรอนมีระดับพลังงานต่ำๆ หรือบริเวณรอบๆ จุดดิแรค (Dirac point) เพื่ออธิบายลักษณะการบิดเบี้ยวไปของแลตทิซในแกรฟีนภายใต้ความเครียดแบบต่างๆ (Kitt *et al.*, 2012) คือ ความเครียดแบบเทนไซน์ไอโซโทปิก (Tensile isotopic strain) ความเครียดแบบฉือน (shear stain) ความเครียดแบบเก้าอี้พับแขน (Armchair uniaxial strain) และความเครียดแบบซิกแซก (Zigzag uniaxial strain) และแสดงให้เห็นถึงแอมพลิจูดของการแผ่รังสีของโฟตอนที่มุมต่างๆ

การตรวจเอกสาร

ในส่วนนี้ของงานวิจัย เราจะกล่าวถึงงานวิจัยที่ผ่านมา เพื่อใช้เป็นแนวทางในการศึกษางานวิจัยของเรา ดังนี้

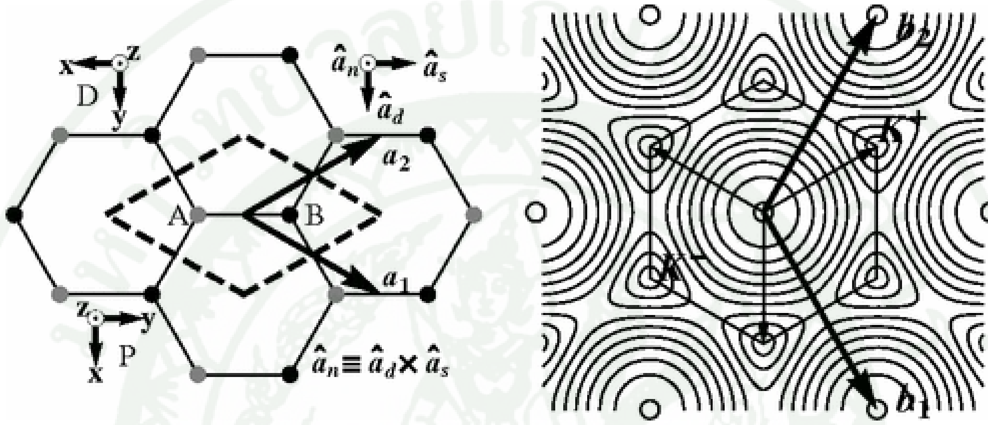
1. อันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับโฟตอนในแกรฟีน

ในปี ค.ศ. 2010 ได้มีการศึกษาเกี่ยวกับกับคุณสมบัติทางแสง (optical properties) ของแกรฟีน โดย M. Mecklenburg และคณะ ซึ่งพวกเขาได้ศึกษารูปแบบของการแผ่รังสีแบบเกิดเอง (spontaneous emission) ของโฟตอนของ โดยที่พวกเขาใช้สมการดิแรคฮามิลโทเนียน (Dirac Hamiltonain) ซึ่งเป็นสมการที่พิจารณาอิเล็กตรอนที่อยู่ที่ระดับงานพลังงานต่ำๆ หรือที่อยู่บริเวณรอบๆ จุดดิแรค (Haseggaea *et al.*, 2006) โดยทำให้สมการดิแรคฮามิลโทเนียนอยู่ในเทอมของอันตรกริยา $\hat{\mathscr{H}}_{\text{int}}$ ในควอนไทซ์อันดับที่สอง (second quantize) แล้วนำไปคำนวณหาแอมพลิจูดในรูปแบบ อย่างง่ายที่เรียกว่า “แผนภาพต้นไม้ของไฟน์แมน (Tree-level Feynman diagram)” แล้วนำแอมพลิจูดนี้ไปวิเคราะห์หารูปแบบการแผ่รังสีของโฟตอน (Schwinger, 1951) และอัตราการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนจากสถานเริ่มต้นไปยังสถานะสุดท้าย



ภาพที่ 6 รูปทางด้านซ้ายมือเป็นแผนภาพตัวอย่างของรูปแบบของการแผ่รังสี และรูปขวามือเป็นแผนภาพไฟแมนจากรูปจะเห็นว่าโฟตอนจะอยู่ในปริภูมิ 3 มิติ ส่วนอิเล็กตรอนจะถูกจำกัดขอบเขตให้อยู่ในแผ่นของแกรฟีน อิเล็กตรอนเริ่มต้นมีโมเมนตัม (momentum) คือ $\mathbf{p}_i = \hbar\mathbf{k}_i$ และ $\Rightarrow$ เป็นสปินปลอมๆ (psudospin) ซึ่งเริ่มต้นอิเล็กตรอนอยู่ที่แถบการนำ (conduction band) ใกล้ๆ กับจุดดิแรค $\mathbf{K}^+$ มีทิศทางชี้ไปตามโมเมนตัม $\mathbf{k}_i$ ไปทำอันตรกิริยากับโฟตอนทำให้เกิดการทำลายอิเล็กตรอนที่แถบการนำแล้วสร้างอิเล็กตรอนที่แถบเวเลนซ์ (valence band) กับโมเมนตัม $\hbar\mathbf{k}_f$ และสปินปลอมๆ $\Leftarrow$

ในที่นี้ M. Mecklenburg และคณะสนใจรูปแบบของการแผ่รังสีแบบเกิดเอง (spontaneous emission) ของแกรฟีนในอุดมคติ (ideal graphene) แกรฟีนในอุดมคติมีลักษณะคล้ายกับรังผึ้งหกเหลี่ยมใน 2 มิติ ในหนึ่งหน่วย (unit cell) ของแกรฟีนจะมีคาร์บอนอะตอมอยู่สองตัว ซึ่งกำหนดให้คาร์บอนอะตอมตัวที่อยู่ทางด้านซ้ายมือเป็นอะตอม A และตัวที่อยู่ทางด้านขวามือเป็นอะตอม B โดยที่ระยะห่างระหว่างอะตอมสองตัวเท่ากับ 1.42 อังสตรอม ดังรูป



ภาพที่ 7 รูปซ้ายแสดงให้เห็นถึงลักษณะของแกรฟีนในปริภูมิจริง (real space) ซึ่งมีลักษณะคล้ายกับรังผึ้ง (honeycomb lattice) ซึ่งจุดสีเทาและจุดสีดำแทนตำแหน่งของแลตทิซ A และ B ตามลำดับ เส้นประสีดำรูปสี่เหลี่ยมขนมเปียกปูนแทนเซลล์หนึ่งเซลล์ในแกรฟีน ซึ่งรูปแบบของแกนพิกัดของอิเล็กตรอนในฮามิลโทเนียนที่มีสองรูปแบบ คือ แบบเพาลี (Pauli) และดิแรค (Dirac) แทนด้วยสัญลักษณ์ “P” และ “D” และรูปขวาแสดงให้เห็นถึงลักษณะโครงสร้างโซนบริลเลียน (Brillouin Zone) ของแกรฟีนในปริภูมิส่วนกลับ (reciprocal space) ซึ่งมีลักษณะเป็นหกเหลี่ยม ซึ่งตำแหน่งของจุด $\mathbf{K}^+$ ระบุด้วยลูกศรบางๆ

โดยภาพที่ 7 แสดงถึงแบบจำลองการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนจากอะตอมหนึ่งไปอีกอะตอมหนึ่งของแกรฟีนที่ระดับพลังงานกระตุ้นต่ำๆ ซึ่งสัมพันธ์กับสมการดิแรค (Dirac equation) ใน 2+1 มิติ

ฮามิลโทเนียนของอิเล็กตรอน (Electronic Hamiltonian) ประกอบด้วยสองเทอม คือเทอมที่หนึ่งแทนพลังงานของอิเล็กตรอนที่อยู่ในแต่ละอนุภาค และอีกเทอมแทนพลังงานเนื่องจากการกระโดดของอิเล็กตรอนจากอะตอมหนึ่งไปยังอีกอะตอมหนึ่งที่อยู่รอบๆ ตัวมันเอง พลังงานเนื่องจากการกระโดดของอิเล็กตรอนไปยังอะตอมที่อยู่รอบๆ ตัวมันเอง (nearest-neighbor hopping energy) แทนด้วยพารามิเตอร์ t เมื่อ $\hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{R}_j}$ เป็นตัวดำเนินการสร้าง (creation operator) และ $\hat{A}_{\mathbf{R}_j}$ เป็นตัวดำเนินการทำลาย (annihilation operator) อิเล็กตรอนที่สับแลตทีซ (sublattice) “A” ในเซลล์ที่ j โดยที่ฮามิลโทเนียนของแกรฟีน คือ

$$\hat{H} = \sum_j (\varepsilon_A \hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{R}_j} \hat{A}_{\mathbf{R}_j} + \varepsilon_B \hat{B}^{\dagger}_{\mathbf{R}_j} \hat{B}_{\mathbf{R}_j}) - t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{R}_i} \hat{B}_{\mathbf{R}_j} + \hat{B}^{\dagger}_{\mathbf{R}_j} \hat{A}_{\mathbf{R}_i}) \tag{1}$$

เมื่อสัญลักษณ์ $\langle i, j \rangle$ แทนผลรวมสับแลตทีซที่ตำแหน่ง j ทั้งหมด และแต่ละสับแลตทีซที่ตำแหน่ง i $(i = 0, 1, 2)$ ที่อยู่รอบๆ ตำแหน่งของสับแลตทีซ j สำหรับแกรฟีนสับแลตทีซ A และสับแลตทีซ B เป็นคาร์บอนอะตอมเหมือนกัน ดังนั้นจึงมีพลังงานเท่ากัน $\varepsilon_A = \varepsilon_B$ แต่ในที่นี้เรากำหนดให้ตำแหน่ง A และ B มีพลังงานต่างกัน $(\varepsilon_A \neq \varepsilon_B)$

ทำการแปลงฟูเรียร์ (Fourier Transform) ของตัวดำเนินการสร้าง $\hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{R}_j}$ และตัวดำเนินการทำลาย $\hat{A}_{\mathbf{R}_j}$ จะได้ว่า

$$\hat{A}_{\mathbf{R}_i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \hat{A}_{\mathbf{Q}_j} e^{i\mathbf{R}_i \cdot \mathbf{Q}_j}, \quad \hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{R}_i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{Q}_j} e^{-i\,\mathbf{R}_i \cdot \mathbf{Q}_j} \tag{2}$$

เมื่อ $\mathbf{Q}_j = \dfrac{m}{N_1}\mathbf{b}_1 + \dfrac{n}{N_2}\mathbf{b}_2$ เป็นเวกเตอร์คลื่น (wave vector) ในโซนบริลเลียน (Brillouin zone) และ $N = N_1 N_2$ เป็นจำนวนอะตอมทั้งหมดในแกรฟีน แทนสมการ (2) ลงใน (1) และใช้ความสัมพันธ์ $\sum_j e^{i\mathbf{R}_j \cdot (\mathbf{Q}-\mathbf{Q}')} \equiv N\delta_{\mathbf{Q},\mathbf{Q}'}$ จะได้

$$\begin{aligned}\hat{H} = &\sum_l \left\{ \varepsilon_A \hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{Q}_l} \hat{A}_{\mathbf{Q}_l} + \varepsilon_B \hat{B}^{\dagger}_{\mathbf{Q}_l} \hat{B}_{\mathbf{Q}_l} \right\} - t \sum_l \left\{ \hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{Q}_l} \hat{B}_{\mathbf{Q}_l} (1 + e^{i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{a}_2}) \right\} \\ &- t \sum_l \left\{ \hat{B}^{\dagger}_{\mathbf{Q}_l} \hat{A}_{\mathbf{Q}_l} (1 + e^{-i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{a}_2}) \right\}\end{aligned} \tag{3}$$

เราสามารถเขียนสมการฮามิลโทเนียนในสมการที่ (3) ให้อยู่ในรูปของเมทริกซ์ ได้เป็น

$$\hat{H} = -t \sum_l \begin{pmatrix} \hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{Q}_l} & \hat{B}^{\dagger}_{\mathbf{Q}_l} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\varepsilon_A / t & 1 + e^{i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{a}_2} \\ 1 + e^{-i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{a}_2} & -\varepsilon_B / t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{A}_{\mathbf{Q}_l} \\ \hat{B}_{\mathbf{Q}_l} \end{pmatrix} \tag{4}$$

นิยามให้ $\Delta \equiv (\varepsilon_A - \varepsilon_B)/2$ เป็นผลต่างของพลังงานของอิเล็กตรอน และกำหนดให้พลังงานเริ่มต้นมีค่าเป็น $(\varepsilon_A + \varepsilon_B)/2 = 0$ ดังนั้นเราสามารถเขียนฮามิลโทเนียนในสมการ (4) ใหม่ ได้เป็น

$$\hat{H} \;=\; -t\sum_{l}\begin{pmatrix}\hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{Q}_l} & \hat{B}^{\dagger}_{\mathbf{Q}_l}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-\Delta/t & 1+e^{i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{a}_1}+e^{i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{a}_2}\\ 1+e^{-i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{a}_1}+e^{-i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{a}_2} & \Delta/t\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{A}_{\mathbf{Q}_l}\\ \hat{B}_{\mathbf{Q}_l}\end{pmatrix} \tag{5}$$

หรือ

$$H \;=\; \sum_{l}\begin{pmatrix}\hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{Q}_l} & \hat{B}^{\dagger}_{\mathbf{Q}_l}\end{pmatrix}\mathscr{H}\begin{pmatrix}\hat{A}_{\mathbf{Q}_l}\\ \hat{B}_{\mathbf{Q}_l}\end{pmatrix} \tag{6}$$

โดยที่นิยามให้ $\mathscr{H}$ เป็นฮามิลโทเนียนของอนุภาคหนึ่งตัว (single particle Hamiltonian) คือ

$$\mathscr{H} = -t\begin{pmatrix}-\Delta/t & 1+e^{i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{a}_1}+e^{i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{a}_2}\\ 1+e^{-i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{a}_1}+e^{-i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{a}_2} & \Delta/t\end{pmatrix} \tag{7}$$

สำหรับแกรฟีนฮามิลโทเนียน $\mathscr{H}$ ในสมการ (7) จะมีเมทริกซ์ในแนวทแยงมุมเป็นศูนย์ (off-diagonal matrix) และที่มุมของโซนบริลเลียน (Brillouin zone) จะมีค่า $\mathbf{Q}=\mathbf{K}$ เนื่องจากตำแหน่งของสับแลตทิซ A และ B ของแกรฟีนเป็นคาร์บอนอะตอมเหมือนกัน ดังนั้นที่ตำแหน่งแลตทิซ A และ B จึงมีพลังงานเท่ากัน ($\mathcal{E}_A=\mathcal{E}_B$) จากภาพที่ 7 แสดงให้เห็นว่าจุดดิแรค (Dirac point) ที่ตำแหน่งต่างๆ มีรูปแบบดั้งนี้ คือ

$$\mathbf{K}^{\kappa} = \kappa\frac{2\mathbf{b}_2+\mathbf{b}_1}{3}+m\mathbf{b}_1+n\mathbf{b}_2 \tag{8}$$

เมื่อ $\kappa=\pm 1$ เป็นดัชนี (valley index) ที่จำแนกความแตกต่างของจุดดิแรค $\mathbf{K}$ สองจุดที่แตกต่างกัน เนื่องจากที่พลังงานกระตุ้นต่ำๆ บริเวณรอบ จุดดิแรคของแกรฟีนเรานิยามให้

$$\mathbf{k}=\mathbf{Q}-\mathbf{K} \tag{9}$$

และกำหนดขอบเขตของการคำนวณให้ $\mathbf{K}\gg\mathbf{k}$ เพื่อพิจารณาเทอมของฮามิลโทเนียน $\mathscr{H}$ ในสมการที่ (7) จะได้ว่า

$$1+e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{a}_1}+e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{a}_2} \;=\; 1+e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{a}_1}+e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{a}_2} \tag{10}$$

เนื่องจาก $\mathbf{K}\gg\mathbf{k}$ ดังนั้น $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}\approx 1+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}$ และที่พลังงานกระตุ้นต่ำๆ จะได้ $\mathbf{a}_i\cdot\mathbf{b}_j=2\pi\delta_{i,j}$ โดยที่ $\delta_{i,j}=0$, $\delta_{i,i}=1$ แทนสมการ (8) ลงในสมการที่ (10) จะได้

$$1+e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{a}_1}+e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{a}_2} \;=\; -\kappa\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)-\frac{1}{2}i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2) \tag{11}$$

จากภาพที่ 7 นิยามให้เวกเตอร์หนึ่งหน่วย (unite vector) $\hat{\mathbf{a}}_n \equiv \hat{\mathbf{a}}_d \times \hat{\mathbf{a}}_s$ เป็นเวกเตอร์ที่ตั้งฉากกับระนาบของแกรฟีน โดยที่ $\hat{\mathbf{a}}_d = (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)/a$ และ $\hat{\mathbf{a}}_s = (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/\sqrt{3}a$ ดังนั้น

$$1 + e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{a}_2} = -\frac{\sqrt{3}}{2}a\mathbf{k}\cdot(\kappa\hat{\mathbf{a}}_d - i\hat{\mathbf{a}}_s) \tag{12a}$$

และในทำนองเดียวกัน จะได้

$$1 + e^{-i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{Q}_l\cdot\mathbf{a}_2} = -\frac{\sqrt{3}}{2}a\mathbf{k}\cdot(\kappa\hat{\mathbf{a}}_d + i\hat{\mathbf{a}}_s) \tag{12b}$$

แทนสมการที่ (12) ลงใน (7) ดังนั้นที่พลังงานต่ำๆ ฮามิลโทเนียน $\mathcal{H}$ จะกลายเป็น

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} \Delta & \sqrt{3}ta\mathbf{k}(\kappa\hat{a}_d - i\hat{a}_s)/2 \\ \sqrt{3}ta\mathbf{k}(\kappa\hat{a}_d + i\hat{a}_s)/2 & -\Delta \end{pmatrix} \tag{13}$$

ฮามิลโทเนียนในสมการที่ (13) จะไม่มีการเปลี่ยนแปลงเนื่องการหมุนเนื่องจากว่ามันขึ้นอยู่กับปริมาณสเกลาร์ และผลคูณเชิงสเกลาร์ของเวกเตอร์ใน 3 มิติ จากภาพที่ 7 แสดงให้เห็นว่าค่าเจาะจง (eigenvalue) ของฮามิลโทเนียน $\hat{\mathcal{H}}$ ไม่ขึ้นอยู่กับทิศทางของเวกเตอร์ $\mathbf{k}$ ที่อยู่รอบๆ จุดดิแรค $\mathbf{K}$ ซึ่งกล่าวได้ว่าฮามิลโทเนียนให้ผลลัพธ์ที่เหมือนกันในทุกทิศทาง

จัดรูปฮามิลโทเนียนในสมการที่ (13) ใหม่ให้อยู่ในรูปเวกเตอร์อย่างง่าย และไม่ขึ้นอยู่กับทิศทางเวกเตอร์ $\hat{a}_d$ และ $\hat{a}_s$ โดยกำหนดให้อยู่ในรูปของพิกัด D และ P ดังภาพที่ 7 ซึ่งนิยามให้ความเร็วเฟอร์มี (Fermi velocity) $v_F = \sqrt{3}at/2\hbar$ และโมเมนตัม $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ จะได้ว่า

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} \Delta & v_F\mathbf{p}(\kappa\hat{a}_d - i\hat{a}_s) \\ v_F\mathbf{p}(\kappa\hat{a}_d + i\hat{a}_s) & -\Delta \end{pmatrix} \tag{14}$$

พิจารณาพิกัด D ในภาพที่ 7 จะได้ $\hat{a}_n = \hat{z}$, $\hat{a}_d = \hat{y}$ และ $\hat{a}_s = -\hat{x}$ จะได้ฮามิลโทเนียน $\hat{\mathcal{H}}_D$ เป็น

$$\hat{\mathcal{H}}_D = v_F(\kappa\sigma_x p_y - i\sigma_y p_x) + \sigma_z\Delta \tag{15a}$$

และในทำนองเดียวกัน จะได้สมการฮามิลโทเนียนในพิกัด P อยู่ในรูปของ

$$\hat{\mathcal{H}}_P = v_F(\kappa\sigma_x p_x + i\sigma_y p_y) + \sigma_z\Delta \tag{15b}$$

เมื่อพิจารณาพิกัด P จากภาพที่ 7 จะได้ $\hat{a}_n = \hat{z}$, $\hat{a}_d = \hat{y}$ และ $\hat{a}_s = \hat{x}$ จะเห็นว่าเมทริกซ์ $\hat{\mathscr{H}}_D$ และฮามิลโทเนียน $\hat{\mathscr{H}}_P$ ในสมการที่ (15b) เป็นตัวอย่างที่แสดงให้เห็นถึงมีความสัมพันธ์กันระหว่างฮามิลโทเนียนในแกรฟีนกับสมการดิแรค

2. อัตราการแผ่รังสีของอิเล็กตอนในแกรฟีน

ในที่นี้ M. Mecklenburg และคณะได้พิจารณาฮามิลโทเนียนในพิกัด P เนื่องจากว่าแกรฟีนมีเฉพาะในพิกัด xy เท่านั้น ดังนั้นจึงไม่ปรากฏ σ_z และ p_z ดังนั้นสามารถเขียนสมการฮามิลโท-เนียนในสมการ (15b) ใหม่ ได้เป็น

$$\hat{\mathscr{H}} = v_F(\kappa\sigma_x p_x + i\sigma_y p_y) \tag{16}$$

เมื่อโมเมนตัม $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} = \hbar(\mathbf{Q}-\mathbf{K})$ และนิยามให้มุม ϕ เป็นมุมในระนาบ $\vec{p}$ ของโมเมนตัม $\mathbf{p} = \vec{p} + p_z\hat{\mathbf{z}}$ สอดคล้องกับ $\mathbf{p} = p(\cos\phi\hat{\mathbf{x}} + \sin\phi\hat{\mathbf{y}})$ ดังนั้นสมการที่ (16) จะกลายเป็น

$$\hat{\mathscr{H}} = v_F p\begin{pmatrix} 0 & \kappa\cos\phi - i\sin\phi \\ \kappa\cos\phi + i\sin\phi & 0 \end{pmatrix} \tag{17}$$

เมื่อ $\kappa = \pm 1$ (valley indexs) เป็นตัวที่บ่งบอกถึงความแตกต่างกันของมุมสองมุมในโซนบริลเลียนของแกรฟีน พิจารณาฮามิลโทเนียนจากสมการที่ (17) ในกรณีที่ $\kappa = \pm 1$ ได้ดังนี้

กรณีที่ 1 $\kappa = 1$

$$\hat{\mathscr{H}} = v_F p\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix} \tag{18a}$$

กรณีที่ 2 $\kappa = -1$

$$\hat{\mathscr{H}} = -v_F p\begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} \tag{18b}$$

สามารถเขียนฮามิลโทเนียนทั้งสองกรณีในสมการที่ (18) ได้เป็น

$$\hat{\mathscr{H}} = \kappa v_F p\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\kappa\phi} \\ e^{i\kappa\phi} & 0 \end{pmatrix} \tag{19}$$

โดยที่สามารถหาพลังงานของฮามิลโทเนียน $\hat{\mathscr{H}}$ ในสมการที่ (19) ได้จาก $\det\left|\hat{\mathscr{H}} - \varepsilon\hat{\mathbf{I}}\right| = 0$ จะได้

$$\varepsilon = \beta v_F p \tag{20}$$

เมื่อ $\beta = \pm 1$ แสดงถึงแถบการนำ (conduction band) ในกรณีที่เป็นบวก และแถบพลังงานเวเลนซ์ (valence bane) ในกรณีที่เป็นลบ ผลลัพธ์ในสมการที่ (20) แสดงถึงพลังงานของฮามิลโทเนียน $\hat{\mathscr{H}}$ ในสมการที่ (19) และสถานะเจาะจง (eigenstate) ของฮามิลโทเนียนของอนุภาคหนึ่งตัว $\mathscr{H}$ (single particle Hamiltonian) หาได้จาก

$$\hat{\mathscr{H}}\,|\chi\rangle = \varepsilon\,|\chi\rangle \tag{21}$$

เมื่อนิยามให้สถานะเจาะจง $|\chi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ แทนฮามิลโทเนียน $\hat{\mathscr{H}}$ ในสมการที่ (19) และพลังงานของฮามิลโทเนียน $\hat{\mathscr{H}}$ ในสมการที่ (20) ลงในสมการที่ (21) ดังนั้น

$$\kappa\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\kappa\phi} \\ e^{i\kappa\phi} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \beta\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{22}$$

หรือ จะได้ว่า

$$\kappa e^{-i\kappa\phi} b = \beta a \quad\rightarrow\quad b = \frac{\beta}{\kappa} e^{i\kappa\phi} a = \beta\kappa e^{i\kappa\phi} a \tag{23a}$$

$$\kappa e^{i\kappa\phi} a = \beta b \quad\rightarrow\quad b = \frac{\kappa}{\beta} e^{i\kappa\phi} a = \beta\kappa e^{i\kappa\phi} a \tag{23b}$$

แทนค่า b ในสมการที่ (23) ลงในสถานะเจาะจงจะได้สถานะเจาะจง เป็น

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ \beta\kappa e^{i\kappa\phi} a \end{pmatrix} \tag{24}$$

ทำการนอร์มอลไลเซชัน (normalization) คือ $\langle\chi|\chi\rangle = 1$ ในสมการที่ (24) เพื่อหาค่า a ดังนี้

$$\langle\chi|\chi\rangle = \begin{pmatrix} a^* & \beta\kappa e^{-i\kappa\phi} a^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ \beta\kappa e^{i\kappa\phi} a \end{pmatrix}$$

$$1 = a^* a + \beta^2\kappa^2 a^* a$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{25}$$

แทนสมการที่ (25) ลงใน (24) จะได้

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\kappa\phi/2} \\ \beta\kappa e^{i\kappa\phi/2} \end{pmatrix} \tag{26}$$

สมการที่ (26) เป็นสถานะเจาะจงของฮามิลโทเนียน $\hat{\mathscr{H}}$

เราสามารถเขียนฮามิลโทเนียนรวม $\hat{H}$ (total Hamiltonian) ให้อยู่ในรูปของพลังสถานะเจาะจงของตัวดำเนินการสร้าง $\hat{C}^{\dagger}_{\mathbf{Q}}$ (create operator) และตัวดำเนินการทำลาย $\hat{C}_{\mathbf{Q}}$ (destroy operator) โดยใช้ควอนไทซ์อันดับที่สอง (second quantize)

$$\hat{H} = \int d^2\mathbf{r}\,\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\mathscr{H}}\,\hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{27}$$

เมื่อนิยามให้ควอนไทซ์ของสนามแม่เหล็ก (quantized electromagnetic field) คือ

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{Q}}\left\{\hat{C}_{c,\mathbf{Q}}\,|\chi_c\rangle + \hat{C}^{\dagger}_{v,\mathbf{Q}}\,|\chi_v\rangle\right\}e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} \tag{28a}$$

$$\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{Q}}\left\{\langle\chi_c|\,\hat{C}_{c,\mathbf{Q}} + \langle\chi_v|\,\hat{C}^{\dagger}_{v,\mathbf{Q}}\right\}e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} \tag{28b}$$

แทนฮามิลโทเนียน $\hat{\mathscr{H}}$ ในสมการที่ (19) และควอนไทซ์ของสนามแม่เหล็กลงในสมการที่ (28) ลงในสมการที่ (27) จะได้ ฮามิลโทเนียนรวม $\hat{H}$ เป็น

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{Q}}\left\{\kappa v_F\, p\left(\langle\chi_c|\,\hat{C}_{c,\mathbf{Q}} + \langle\chi_v|\,\hat{C}^{\dagger}_{v,\mathbf{Q}}\right)\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\kappa\phi} \\ e^{i\kappa\phi} & 0 \end{pmatrix}\left(\hat{C}_{c,\mathbf{Q}}\,|\chi_c\rangle + \hat{C}^{\dagger}_{v,\mathbf{Q}}\,|\chi_v\rangle\right)\right\} \tag{29}$$

จากสมการที่ (29) จะเราเห็นว่าฮามิลโทเนียนรวมของระบบเกิดจากการรวมผลของเวกเตอร์คลื่น $\mathbf{Q}$ (wave vector) ทั้งหมดในโซนบริลเลียนที่อยู่ใกล้ๆ กับจุดดิแรค $\mathbf{K}^{\kappa}$ และ c กับ v เป็นแถบการนำ (conduction band) และแถบเวเลนซ์ (valence band) ตามลำดับ

เมื่อใส่สนามแม่เหล็กเข้าไปในแผ่นแกรฟีนทำให้โมเมนตัมของระบบจะเปลี่ยนจากเดิมเป็น $\mathbf{p}\rightarrow\mathbf{p}-q\mathbf{A}/c$ จะเห็นได้ว่ามีเทอมของเวกเตอร์ศักย์ (potential vector) เพิ่มขึ้นมา ซึ่งเป็นเทอมของควอนไทซ์เพอร์เทอร์เบชัน $\hat{\mathscr{H}}'$ (quantize perturbation) ในของฮามิลโทเนียนรวม

$$\hat{H} = \hat{\mathscr{H}} + \hat{\mathscr{H}}'_{\mathrm{int}} \tag{30}$$

หรือสามารถเขียนฮามิลโทเนียนรวมใหม่ เป็น

$$\hat{H} = \int d^3\mathbf{r}\,\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r},t)\left\{v_F\vec{\sigma}\cdot\mathbf{p} - \frac{q}{c}v_F\vec{\sigma}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right\}\hat{\psi}(\mathbf{r},t) \tag{31}$$

โดยที่ตัวดำเนินการสนาม (field operator) คือ

$$\hat{\psi}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\sqrt{A}}\sum_{\mathbf{k}} F(z)\left(\hat{C}_{c,\mathbf{k}}\left|\chi_c\right\rangle e^{i(\mathbf{k}_c\cdot\mathbf{r}-\omega_c t)} + \hat{C}_{v,\mathbf{k}}\left|\chi_v\right\rangle e^{i(\mathbf{k}_v\cdot\mathbf{r}-\omega_v t)}\right) \tag{32}$$

เมื่อ $\omega_{c(\mathrm{v})} = v_F\left|\vec{k}\right|$ เป็นอัตราเร็วเชิงมุม (angular speed) ของอิเล็กตรอนที่แถบการนำ (แถบเวเลนซ์) A เป็นพื้นที่ของแผ่นแกรฟีน และเวกเตอร์ศักย์ $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ (potential vector) เป็น

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = c\sum_{\mathbf{k},j}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\varepsilon_r V\omega_\gamma}}(\hat{\varepsilon}_j\hat{C}_{\mathbf{k},j}e^{i\mathbf{k}_\gamma\cdot\mathbf{r}-i\omega_\gamma t} + \hat{\varepsilon}_j^*\hat{C}_{\mathbf{k},j}^{\dagger}e^{-i\mathbf{k}_\gamma\cdot\mathbf{r}+i\omega_\gamma t}) \tag{33}$$

เมื่อ j เป็นสถานะของการโพลาไรซ์ของโฟตอน (photon's polarization state) V เป็นปริมาตร (normalization volume) ε_r คือค่าความนำสนามไฟฟ้าสัมพันธ์ (relative permittivity) c เป็นความเร็วแสง (speed of light) และ $\omega_\gamma = c|\mathbf{k}|$ คืออัตราเร็วเชิงมุม (angular velocity) ของโฟตอน ซึ่งจะเห็นว่าอัตราเร็วเชิงมุม ω_γ มีความเร็วอยู่ในรูปของความเร็วแสงไม่ใช้ความเร็วเฟอร์มี v_F (Fermi velocity) และเมื่อทำการเปรียบเทียบสมการที่ (30) กับ (31) จะพบว่า

$$\hat{\mathscr{H}}'_{\mathrm{int}} = -\frac{q}{c}v_F\int d^3\mathbf{r}\,\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r},t)\{\vec{\sigma}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\}\hat{\psi}(\mathbf{r},t) \tag{34}$$

ฮามิลโทเนียนในสมการที่ (34) เป็นควอนไทซ์เพอร์เทอร์เบชัน $\hat{\mathscr{H}}'_{\mathrm{int}}$ แทนสมการที่ (32) และ (33) ลงในสมการที่ (34) จะได้

$$\begin{aligned}
\mathscr{H}'_{\mathrm{int}} = {} & -qv_F\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\varepsilon_r V\omega_\gamma}}\int\frac{d^3\mathbf{r}}{A}|F(z)|^2\,e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \\
& \times\Big\{\Big[e^{i\mathbf{k}_\gamma\cdot\mathbf{r}-i\omega_\gamma t}\Big(\hat{C}_{v,\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{C}_{\mathbf{k}_\gamma}\hat{C}_{c,\mathbf{k}'}\langle\chi_v|\vec{\sigma}\cdot\hat{\varepsilon}|\chi_c\rangle + \hat{C}_{c,\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{C}_{\mathbf{k}_\gamma}\hat{C}_{c,\mathbf{k}'}\langle\chi_c|\vec{\sigma}\cdot\hat{\varepsilon}|\chi_c\rangle \\
& + \hat{C}_{v,\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{C}_{\mathbf{k}_\gamma}\hat{C}_{v,\mathbf{k}'}\langle\chi_v|\vec{\sigma}\cdot\hat{\varepsilon}|\chi_v\rangle + \hat{C}_{c,\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{C}_{\mathbf{k}_\gamma}\hat{C}_{v,\mathbf{k}'}\langle\chi_c|\vec{\sigma}\cdot\hat{\varepsilon}|\chi_v\rangle\Big)\Big] \\
& + \Big[e^{-i\mathbf{k}_\gamma\cdot\mathbf{r}+i\omega_\gamma t}\Big(\hat{C}_{v,\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{C}_{\mathbf{k}_\gamma}^{\dagger}\hat{C}_{c,\mathbf{k}'}\langle\chi_v|\vec{\sigma}\cdot\hat{\varepsilon}^*|\chi_c\rangle + \hat{C}_{c,\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{C}_{\mathbf{k}_\gamma}^{\dagger}\hat{C}_{c,\mathbf{k}'}\langle\chi_c|\vec{\sigma}\cdot\hat{\varepsilon}^*|\chi_c\rangle \\
& + \hat{C}_{v,\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{C}_{\mathbf{k}_\gamma}^{\dagger}\hat{C}_{v,\mathbf{k}'}\langle\chi_v|\vec{\sigma}\cdot\hat{\varepsilon}^*|\chi_v\rangle + \hat{C}_{c,\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{C}_{\mathbf{k}_\gamma}^{\dagger}\hat{C}_{v,\mathbf{k}'}\langle\chi_c|\vec{\sigma}\cdot\hat{\varepsilon}^*|\chi_v\rangle\Big)\Big]\Big\}e^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega' t)}
\end{aligned} \tag{35}$$

จะเห็นว่าควอนไทซ์เพอร์เทอร์เบชัน $\hat{\mathcal{H}}'_{\text{int}}$ ในสมการที่ (35) เขียนให้อยู่ในเทอมของตัวดำเนินการสร้าง $\hat{C}^{\dagger}_{\mathbf{Q}}$ (create operator) และตัวดำเนินการทำลาย $\hat{C}_{\mathbf{Q}}$ (destroy operator)

อัตราการเกิดอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับโฟตอนสามารถคำนวณได้จากการกฎของเฟอร์มี-โกลเด้น (Fermi's Golden Rule) คือ

$$\Gamma_{i\to f} = \frac{d}{dt}\left|\left\langle \varphi_f(t)\middle|\psi(t)\right\rangle\right|^2 \tag{36}$$

ซึ่งเป็นอัตราการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอน $\Gamma_{i\to f}$ จากสถานะเริ่มต้น $|\varphi_i\rangle$ เริ่มต้นไปยังสถานะสุดท้าย $\left|\varphi_f\right\rangle$ เมื่อ $|\psi(t)\rangle$ เป็นตัวดำเนินการวิวัฒนาการไปในเวลา (Time-Evolution Operator) คือ

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_o)|\varphi_i(t_0)\rangle \tag{37}$$

โดยที่ $\hat{U}(t,t_o)$ เป็นอนุกรมไดสัน (Dison series) คือ

$$\begin{aligned}\hat{U}(t,t_o) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\hat{\mathcal{H}}'_{\text{int}}(t) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_o}^{t} dt'\int_{t_0}^{t'} dt''\hat{\mathcal{H}}'_{\text{int}}(t')\hat{\mathcal{H}}'_{\text{int}}(t'') + \ldots \\ + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_o}^{t} dt'\int_{t_0}^{t'} dt''\ldots\int_{t_0}^{t^{(n-1)}} \hat{\mathcal{H}}'_{\text{int}}(t')\hat{\mathcal{H}}'_{\text{int}}(t'')\ldots\hat{\mathcal{H}}'_{\text{int}}(t^{(n)})\end{aligned} \tag{38}$$

เนื่องจากงานวิจัยของ M. Mecklenburg และคณะได้พิจารณาแค่เทอมแรกของอนุกรมไดสันหรือเรียกอีกอย่างว่า "แผนภาพต้นไม้ของไฟน์แมน (tree-level Feynman diagram)" ดังนั้นเราจะได้แอมพลิจูดของการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนจากสถานะเริ่มต้นไปยังสถานะสุดท้าย เป็น

$$\left\langle \varphi_f(t)\middle|\psi(t)\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \left\langle \varphi_f(t')\middle|\hat{\mathcal{H}}'_{\text{int}}(t')\middle|\varphi_i(t_o')\right\rangle dt' \equiv M \tag{39}$$

โดยกำหนดให้สถานะเจาะจงเริ่มต้น $|\varphi_i\rangle$ (initial state) และสถานเจาะจงสุดท้าย $\left|\varphi_f\right\rangle$ (final state) เป็น

$$|\varphi_i(t_0)\rangle = \left|n_\gamma\right\rangle|1-n_v\rangle|n_c\rangle \tag{40a}$$

$$\left|\varphi_f(t)\right\rangle = \left|n_\gamma+1\right\rangle|n_v\rangle|1-n_c\rangle \tag{40b}$$

เมื่อ n_c กับ n_v เป็นจำนวนอิเล็กตรอนที่แถบการนำและแถบเวเลนซ์ตามลำดับ และ $n_\gamma +1$ แทนจำนวนของโฟตอนที่สอดคล้องกับการรังสีแบบเกิดเอง (spontaneous emission) ทำการแทนค่าสมการที่ (35) และ (40) ลงในสมการที่ (39) จะได้แอมพลิจูดของการเปลี่ยนสถานะ เป็น

$$\begin{aligned} M &= \frac{iqv_F}{\hbar}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\varepsilon_r V\omega_\gamma}}\int_0^t e^{i(\omega_v+\omega_\gamma-\omega_c)t'}dt'\int_A e^{-i(\mathbf{k}_v+\mathbf{k}_\gamma-\mathbf{k}_c)\cdot\mathbf{x}'}\,\frac{d^2\mathbf{x}'}{A}\int\left|F(z')\right|^2 e^{-ik_{\gamma,z}\cdot z}dz' \\ &\quad\times\sqrt{n_c}\sqrt{1-n_v}\sqrt{1+n_\gamma}\,\langle\chi_v|\vec{\sigma}\cdot\hat{\varepsilon}^*|\chi_c\rangle \end{aligned} \tag{41}$$

โดยที่ M. Mecklenburg และคณะได้พิจารณากระบวนการการทำลายอิเล็กตรอนที่แถบการนำเป็น $|\varphi_i\rangle \propto \left|\chi(\hbar\vec{k}_c, 1, \kappa)\right\rangle$ และสร้างอิเล็กตรอนที่แถบเวเลนซ์เป็น $|\varphi_f\rangle \propto \left|\chi(\hbar\vec{k}_v, -1, \kappa)\right\rangle$ แล้วในระหว่างที่อิเล็กตรอนเปลี่ยนสถานะจากสถานะเริ่มต้นไปยังสถานะสุดท้ายได้สร้างโฟตอนออกมา $\left|\mathbf{k}_\gamma, \hat{\varepsilon}\right\rangle$ และใช้ความสัมพันธ์ $\hat{C}^\dagger|n\rangle = \sqrt{1\pm n}\,|1\pm n\rangle$, $\hat{C}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ และ $\langle n'|n\rangle = \delta_{n',n}$

เนื่องจาก $F(z)$ เป็นฟังก์ชันของคาร์บอนอะตอมของแผ่นแกรฟีนใน $2P_z$ ออร์บิทัล ซึ่งมีขนาดเพียงไม่กี่อังสตรอม ดังนั้นจึงประมาณให้อินทิเกรตทุกๆ dz' เป็นหนึ่ง ดังนั้นแอมพลิจูดของการเปลี่ยนสถานะในสมการที่ (41) จะกลายเป็น

$$\begin{aligned} M &= \frac{iqv_F}{\hbar}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\varepsilon_r V\omega_\gamma}}\left\{\frac{2e^{i(\omega_v+\omega_\gamma-\omega_c)t/2}}{(\omega_v+\omega_\gamma-\omega_c)}\sin\left(\frac{(\omega_v+\omega_\gamma-\omega_c)t}{2}\right)\right\} \\ &\quad\times\left\{\frac{1}{A}2\pi\delta(\mathbf{k}_v+\mathbf{k}_\gamma-\mathbf{k}_c)\right\}\sqrt{n_c}\sqrt{1-n_v}\sqrt{1+n_\gamma}\,\langle\chi_v|\vec{\sigma}\cdot\hat{\varepsilon}^*|\chi_c\rangle \end{aligned} \tag{42}$$

ยกกำลังสองสมการที่ (42) และใช้ความสัมพันธ์ $\lim\limits_{a\to\infty}\frac{\sin^2 ax}{ax^2} = \pi\delta(x)$ ดังนั้นสมการที่ (42) จะกลายเป็น

$$\begin{aligned} |M|^2 &= \left(\frac{q^2v_F^2}{\hbar^2}\right)\left(\frac{2\pi\hbar}{\varepsilon_r V\omega_\gamma}\right)\left\{2\pi t\delta(\omega_v+\omega_\gamma-\omega_c)\right\}\left\{\frac{1}{A^2}(2\pi)^2 A\delta^2(\mathbf{k}_v+\mathbf{k}_\gamma-\mathbf{k}_c)\right\} \\ &\quad\times(n_c)(n_v-1)(1+n_\gamma)\left|\langle\chi_v|\vec{\sigma}\cdot\hat{\varepsilon}^*|\chi_c\rangle\right|^2 \end{aligned} \tag{43}$$

แทนสมการที่ (43) ลงในสมการอัตราการเปลี่ยนสถานะ $\Gamma_{i\to f}$ ในสมการที่ (36) จะได้

$$\begin{aligned} \Gamma_{i\to f} &= \frac{q^2v_F^2}{\hbar^2}\frac{2\pi\hbar}{A^2\varepsilon_r V\omega_\gamma}\left|\langle\chi_v|\vec{\sigma}\cdot\hat{\varepsilon}^*|\chi_c\rangle\right|^2 2\pi\delta(\omega_v+\omega_\gamma-\omega_c) \\ &\quad\times(2\pi)^2 A\delta^2(\mathbf{k}_v+\mathbf{k}_\gamma-\mathbf{k}_c)(n_c)(n_v-1)(1+n_\gamma) \end{aligned} \tag{44}$$

เนื่องจากว่าช่วงเวลา Δt ของการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนน้อยมากๆ เมื่อเทียบกับช่วงเวลาของ $1/\Gamma$ และช่วงเวลา Δt จะมีค่ามากกว่าช่วงเวลาของ $1/\omega$ มากๆ คือ $1/\Gamma \gg \Delta t \gg 1/\omega$ และขนาดของพื้นที่ของแกรฟีน A มีขนาดใหญ่มากๆ ดังนั้นเราสามารถเขียนสมการที่ (44) ใหม่ ได้เป็น

$$\begin{aligned} d\Gamma_{c\to v} &= \frac{q^2 v_F^2}{\hbar} \frac{2\pi\hbar}{A^2 \varepsilon_r V \omega_\gamma} \left| \langle \chi_v | \vec{\sigma} \cdot \hat{\varepsilon}^* | \chi_c \rangle \right|^2 2\pi\delta\left(\hbar(\omega_v + \omega_\gamma - \omega_c)\right) \\ &\times (2\pi)^2 A \delta^2(\mathbf{k}_v + \mathbf{k}_\gamma - \mathbf{k}_c)(n_c)(n_v - 1)(1 + n_\gamma) \frac{A d^2\mathbf{k}_v}{(2\pi)^2} \frac{V d^3\mathbf{k}_\gamma}{(2\pi)^3} \end{aligned} \tag{45}$$

เราจะเห็นว่าอัตราการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอน (recombination rate) เป็นสัดส่วนโดยตรงกับจำนวนอิเล็กตรอนที่แถบคอนดักชัน n_c และจำนวนของโฮล $1 - n_c$ เมื่อเราพิจารณาสมการที่ (45) จะพบว่ามีการอนุรักษ์พลังและโมเมนตัน คือ

$$E_v = E_c - \hbar c \left| \mathbf{k}_\gamma \right| \tag{46}$$

และ

$$\mathbf{k}_v = \mathbf{k}_c - \mathbf{k}_\gamma \tag{47}$$

เมื่อเวกเตอร์คลื่น (wave vector) $\mathbf{k}_v = k_v \cos\phi_v \hat{\mathbf{i}} + k_v \sin\phi_v \hat{\mathbf{j}}$, $\mathbf{k}_c = k_c \cos\phi_c \hat{\mathbf{i}} + k_c \sin\phi_v \hat{\mathbf{j}}$ และ $\mathbf{k}_\gamma = k_\gamma \sin\theta_\gamma \cos\phi_\gamma \hat{\mathbf{i}} + k_\gamma \sin\theta_\gamma \sin\phi_\gamma \hat{\mathbf{j}}$ ดังนั้น

$$\left| \mathbf{k}_v \right| = \left\{ k_c^2 - 2k_c k_\gamma \sin\theta_\gamma \cos(\phi_c - \phi_\gamma) + k_\gamma^2 \sin^2\theta_\gamma \right\}^{\frac{1}{2}} \tag{48}$$

เป็นขนาดของเวกเตอร์คลื่นของอิเล็กตรอนที่แถบแวเลนซ์

คำนวณหาองค์ประกอบของเมทริกซ์เชิงมุม (angular matrix element) ในสมการที่ (45) โดยกำหนดให้ $\hat{\mathbf{k}}_\gamma = \sin\theta_\gamma \cos\phi_\gamma \hat{\mathbf{i}} + \sin\theta_\gamma \sin\phi_\gamma \hat{\mathbf{j}} + \cos\theta_\gamma \hat{\mathbf{k}}$, $\hat{\varepsilon}_1 = \hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{k}}_\gamma / \left| \hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{k}}_\gamma \right|$ และ $\hat{\varepsilon}_2 = \hat{\mathbf{k}}_\gamma \times \hat{\varepsilon}_2 / \left| \hat{\mathbf{k}}_\gamma \times \hat{\varepsilon}_2 \right|$ เป็นเวกเตอร์ที่ใช้ในการอธิบายโฟตอนและความน่าเป็นของการโพลาไรเซชันของโฟตอน รวมทุกๆ ทิศทาง j ของการโพลาไรเซชันของการสร้างโฟตอน และแทนสมการสถานะเจาะจง $|\chi\rangle$ ในสมการที่ (26) จะได้

$$\sum_j \left| \langle \chi_v | \vec{\sigma} \cdot \hat{\varepsilon}_j^* | \chi_c \rangle \right|^2 = 1 - \sin^2\theta_\gamma \sin^2\left(\frac{\phi_v}{2} + \frac{\phi_c}{2} - \phi_\gamma \right) \tag{49}$$

เนื่องจากฮามิลโทเนียน $\hat{\mathscr{H}}$ ไม่มีอิเล็กตรอนอยู่ใน p_z ออร์บิทัล ดังนั้นทิศทางของการแผ่รังสีของโฟตอนในแนวแกน z ปรากฏในเมทริกซ์เชิงมุมนี้ (angular matrix element) อินทิเกรตทุกๆ

ค่าของพลังงานและฟังก์ชันดิแรคเดลต้าของโมเมนตัม (δ - function) ในสมการที่ (45) โดยใช้ความสัมพันธ์

$$\delta\big(f(x)\big) = \sum_i \frac{1}{\left|\frac{\partial f(x_i)}{\partial x_i}\right|} \delta(x - x_i) \tag{50}$$

โดยที่เรากำหนดให้

$$f(k_\gamma) = \hbar v_F \left|\mathbf{k}_v\right| + \hbar c k_\gamma - \hbar v_F k_c = 0 \tag{51}$$

แทนขนาดของเวกเตอร์คลื่นในสมการที่ (48) ลงใน (51) เพื่อหาผลเฉลยซึ่งได้ผลลัพธ์ ดังนี้

$$k_\gamma^{(1)} = 0 \tag{52}$$

และ

$$k_\gamma^{(2)} = \frac{2k_c\left(\frac{v_F}{c}\right)\left(1 - \left(\frac{v_F}{c}\right)\sin\theta_\gamma \cos(\phi_c - \phi_\gamma)\right)}{1 - \left(\frac{v_F}{c}\right)^2 \sin^2\theta_\gamma} \tag{53}$$

และหาอนุพันธ์ของสมการที่ (51) เทียบกับตัวแปร k_γ จะได้

$$\frac{\partial f(k_\gamma)}{\partial k_\gamma} = \hbar c + \hbar v_F \frac{\left(\frac{k_\gamma}{k_c}\right)\sin^2\theta_\gamma - \sin\theta_\gamma \cos(\phi_c - \phi_\gamma)}{\left\{1 - 2\left(\frac{k_\gamma}{k_c}\right)\sin\theta_\gamma \cos(\phi_c - \phi_\gamma) + \left(\frac{k_\gamma}{k_c}\right)^2 \sin^2\theta_\gamma\right\}^{\frac{1}{2}}} \tag{54}$$

เนื่องจากว่า k_γ / k_c มีค่าประมาณ $1/300$ เท่า ซึ่งมีค่าน้อยมาก ดังนั้นเราจึงประมาณให้สมการที่ (54) เป็น

$$\frac{\partial f(k_\gamma)}{\partial k_\gamma} \approx \hbar c \tag{55}$$

แทนสมการที่ (54) ลงในสมการที่ (50) จะได้

$$\delta\big(\hbar(\omega_v + \omega_\gamma - \omega_c)\big) = \frac{1}{\hbar c} \tag{56}$$

ดังนั้นเราจะได้อัตราของการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนต่อมุมตัน $d\Omega = d\cos\theta_\gamma d\sin\phi_\gamma$ เป็น

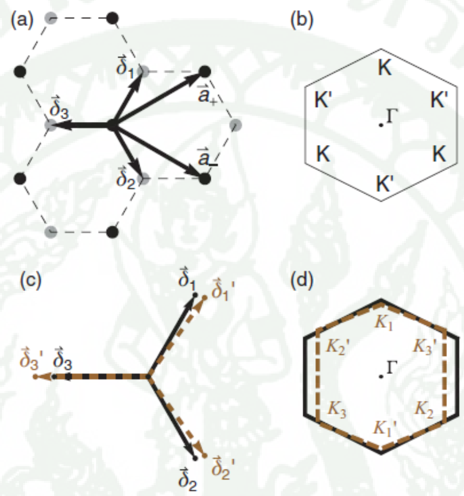
$$\begin{aligned}\frac{d\Gamma_{c\to v}}{d\Omega} &= \frac{q^2}{\hbar c}\left(\frac{v_F}{c}\right)^2\left(\frac{\omega_c}{\pi\varepsilon_r}\right)(n_c)(n_v-1)(1+n_\gamma)\\ &\times\frac{1-2\left(\frac{v_F}{c}\right)\sin\theta_\gamma\cos(\phi_\gamma-\phi_c)+\left(\frac{v_F}{c}\right)^2\sin^2\theta_\gamma\cos^2(\phi_\gamma-\phi_c)}{\left\{1-\left(\frac{v_F}{c}\right)\sin^2\theta_\gamma\right\}^2}\\ &\times\left\{1-\frac{\sin^2\theta_\gamma\cos^2(\phi_\gamma-\phi_c)}{1-2\left(\frac{v_F}{c}\right)\sin\theta_\gamma\cos(\phi_\gamma-\phi_c)+\left(\frac{v_F}{c}\right)^2\sin^2\theta_\gamma\cos^2(\phi_\gamma-\phi_c)}\right\}\end{aligned} \tag{57}$$

ในที่นี้เราประมาณให้ $v_F / c \sim 1/300$ ซึ่งมีค่าน้อยมาก และประมาณให้ $\vec{k}_c \simeq \vec{k}_v$ และ $k_\gamma / k_{c(v)} \simeq 2v_F / c$ พลังงานของอิเล็กตรอนที่สถานะเริ่มต้นที่แถบการนำ (conduction band) เป็นครึ่งหนึ่งของพลังงานของโฟตอน และมีขนาดของพลังงานเท่ากันกับพลังงานของอิเล็กตรอนที่สถานะสุดท้ายที่แถบแวเลนซ์แต่มีทิศทางตรงกันข้ามกัน โมเมนตัมของโฟตอนมีค่าน้อยมากเมื่อเทียบกับโมเมนตัมของอิเล็กตรอน ดังนั้นจึงประมาณให้ $\phi_c \approx \phi_v$ และมีการเปลี่ยนตำแหน่งของอิเล็กตรอนระหว่าง $\mathrm{K}^+ \leftrightarrow \mathrm{K}^-$ ที่ระดับพลังงานต่ำๆ

อุปกรณ์และวิธีการ

1. เวกเตอร์ศักย์ของแลตทีซที่บิดเบียนไปเนื่องจากความเครียดในแกรฟีน

เมื่อเราทำการดึงแผ่นแกรฟีนอย่างช้าๆ โดยที่ความเครียดอยู่ในช่วง 20% ทำให้ตำแหน่งของแลตทีซในแกรฟีนเปลี่ยนแปลงไป ดังรูป



ภาพที่ 8 (a) แลตทิซของแกรฟีนในปริภูมิจริงขณะที่ไม่มีความเครียด โดยที่ $\vec{\delta}_i$ คือเนียร์เรสท์เนเบอร์เวกเตอร์ (nearest-neighbor vector) เป็นเวกเตอร์ที่ชี้จากแลตทิชหนึ่งไปยังอื่นแลตทิชที่อยู่ใกล้เคียงตัวมัน $\vec{R}_i = n\vec{a}_+ + m\vec{a}_-$ คือแลตทิชทรานซเลชันเวกเตอร์ (lattice translation vector) เมื่อ n และ m เป็นจำนวนเต็ม และจุดสีดำกับจุดสีเทาแทนด้วยสับแลตทิช (sublattice) A และ B ตามลำดับ (b) โซนบริลเลียนของแกรฟีนขณะที่ไม่มีความเครียด (c) ตำแหน่งของเวกเตอร์ $\vec{\delta}_i$ ขณะที่ไม่มีความเครียด (สีดำ) และตำแหน่งของเวกเตอร์ $\vec{\delta}_i'$ ขณะที่มีความเครียด (สีน้ำตาล) สำหรับความเครียด 20% ตามทิศทางของเก้าอี้พับแขน (armchair direction) (d) โซนบริลเลียนขณะที่มีความเครียด (สีดำ) และโซนบริลเลียนขณะที่มีความเครียด (สีน้ำตาล) สำหรับความเครียด 20% ตามทิศทางของเก้าอี้พับแขน (armchair direction)

ดังนั้นสมการไทท์บายด์ดิง (tight-binding equation) ก็จะเปลี่ยนไปด้วยเนื่องจากความเครียด (Kitt *et al.*, 2012) และแอมพลิจูดของความน่าจะเป็นในการกระโดดของอิเล็กตรอนจากแลตทิซหนึ่งไปยังแลตทิซหนึ่งที่ใกล้เคียงกันต่างกันด้วย (Yichen Chang *et al.*, 2012) ซึ่งสามารถเขียนฮามิลโท-เนียนในสมการที่ (1) ใหม่ ได้เป็น

$$\hat{H} = -t\sum_{\langle i,j\rangle}(\hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{R}_i}\hat{B}_{\mathbf{R}_j} + \hat{B}^{\dagger}_{\mathbf{R}_j}\hat{A}_{\mathbf{R}_i}) - \sum_{\langle i,j\rangle}\delta t_{ij}(\hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{R}_i}\hat{B}_{\mathbf{R}_j} + \hat{B}^{\dagger}_{\mathbf{R}_j}\hat{A}_{\mathbf{R}_i}) \tag{58}$$

จากสมการที่ (58) เป็นการรวมผลทุกๆ คู่ของ $\hat{A}_i$ และ $\hat{B}_j$ ที่อยู่ใกล้เคียงกัน เมื่อ $A_i^{\dagger}$ เป็นตัวกระทำการสร้างอิเล็กตรอนที่อยู่ในสับแลตทิซ A และ $\hat{B}_j$ เป็นตัวกระทำการทำลายอิเล็กตรอนที่อยู่ในสับแลตทิซ B โดยที่ t เป็นแอมพลิจูดของความน่าเป็นของการกระโดดของอิเล็กตรอนจากสับแลตทิซหนึ่งไปยังอีกสับแลตทิซหนึ่งที่อยู่ใกล้กันในขณะที่ไม่มีความเครียด และ δt_{ij} เป็นแอมพลิจูดของความน่าจะเป็นที่เปลี่ยนไปเนื่องจากความเครียด ซึ่งจะค่ามากหรือน้อยขึ้นอยู่กับระยะห่างระหว่างสับแลตทิซ

สิ่งที่สำคัญเของการบิดเบี้ยวของแลตทิซในแกรฟีนแฝงอยู่ในเฟสเฟกเตอร์ (phase factor) นำไปสู่ความความสัมพันธ์ของกระจาย และเขียนสมการที่ (58) ให้อยู่ในปริภูมิฟูเรียร์ ในงานวิจัยนี้ Alexander L. Kitt และคณะ ได้แสดงให้เห็นว่าให้เฟสแฟคเตอร์ (phase factor) อยู่ในรูปของการแปลงฟูเรียร์ ซึ่งเป็นผลมาจากการเปลี่ยนตำแหน่งของสับแลตทิซ ดังนั้นตัวกระทำการสร้าง (creation operator) และตัวกระทำการทำลาย (annihilation operator) สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของการแปลงฟูเรียร์ ได้เป็น

$$A^{\dagger}_{\mathbf{R}_i} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{Q}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{R}'_i}A^{\dagger}_{\mathbf{Q}} \tag{59a}$$

$$B_{\mathbf{R}_j} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{Q}} e^{-i\mathbf{Q}\cdot(\vec{R}'_i+\vec{\delta}'_j)}B^{\dagger}_{\mathbf{Q}} \tag{59b}$$

ความสัมพันธ์ของขอบเขตของศักย์เวกเตอร์ปลอมๆ (pseudovector potential) ประกอบด้วยตำแหน่งสัมพัทธ์ของอะตอมที่เปลี่ยนไป ซึ่งอยู่ในสมการที่ (59) และแอมพลิจูดของการกระโดดที่เปลี่ยนไป (hopping amplitude) ในสมการที่ (58) และทำการแทนค่าสมการที่ (59) ลงใน (58) และใช้ความสัมพันธ์ $\sum_i e^{i(\mathbf{Q}-\mathbf{Q}')\cdot\vec{R}'} = N\delta_{\mathbf{Q},\mathbf{Q}'}$ จะได้

$$\hat{H} = -\sum_{\mathbf{Q}}\left[A^{\dagger}_{\mathbf{Q}}B_{\mathbf{Q}}\sum_{j=1,2,3}(t+\delta t_j)e^{-i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}'_j} + A_{\mathbf{Q}}B^{\dagger}_{\mathbf{Q}}\sum_{j=1,2,3}(t+\delta t_j)e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}'_j}\right] \tag{60}$$

เมื่อ $\vec{\delta}'_j$ เป็นเนียร์เรสท์เนเบอร์เวกตอร์ที่เปลี่ยนไป (change of nearest-neighbor vector) เขียนได้เป็น

$$\vec{\delta}'_j = (I+\varepsilon)\cdot\vec{\delta}_j \tag{61}$$

โดยที่ ε เป็นสเทรนเทนเซอร์ (strain tensor) และ I เป็นเมทริกซ์เอกลักษณ์ (identity matrix) แทนสมการที่ (61) ลงในสมการที่ (60) จะได้ฮามิลโทเนียนในปริภูมิฟูเรียร์ที่พลังงานต่ำๆ เป็น

$$\begin{aligned}\hat{H} = &-\sum_{\mathbf{Q}}\left[A^{\dagger}_{\mathbf{Q}}B_{\mathbf{Q}}\sum_{j=1,2,3}\left(t+\delta t_j - it\mathbf{Q}\cdot(\varepsilon\cdot\vec{\delta}_j)\right)e^{-i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_j}\right]\\ &-\sum_{\mathbf{Q}}\left[A_{\mathbf{Q}}B^{\dagger}_{\mathbf{Q}}\sum_{j=1,2,3}\left(t+\delta t_j + it\mathbf{Q}\cdot(\varepsilon\cdot\vec{\delta}_j)\right)e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_j}\right]\end{aligned} \tag{62}$$

เนื่องจากว่าเราสนใจลักษณะของแกรฟีนที่มีความเครียดน้อยๆ หรือความเครียดไม่เกิน 20% ดังนั้นเราจึงประมาณให้ $e^{i\mathbf{Q}\cdot\varepsilon\cdot\vec{\delta}_j} \simeq 1 + i\mathbf{Q}\cdot\varepsilon\cdot\vec{\delta}_j$ และสามารถเขียนสมการที่ (60) ใหม่ ให้อยู่ในรูปของเมทริกซ์ ได้เป็น

$$\begin{aligned}\hat{H} = &-\sum_{\mathbf{Q}}\sum_{j=1,2,3}\begin{pmatrix}\hat{A}^{\dagger}_{\mathbf{Q}} & \hat{B}^{\dagger}_{\mathbf{Q}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \left(t+\delta t_j - it\mathbf{Q}\cdot(\varepsilon\cdot\vec{\delta}_j)\right)e^{-i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_j}\\ \left(t+\delta t_j + it\mathbf{Q}\cdot(\varepsilon\cdot\vec{\delta}_j)\right)e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_j} & 0\end{pmatrix}\\ &\times\begin{pmatrix}\hat{A}_{\mathbf{Q}}\\ \hat{B}_{\mathbf{Q}}\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{63}$$

โดยที่กำหนดให้เมทริกซ์ตรงกลางในสมการที่ (63) เป็นฮามิลโทเนียนของอนุภาคหนึ่งตัว (single-particle Hamiltonian) คือ

$$\hat{\mathscr{H}} = -\sum_{j=1,2,3}\begin{pmatrix}0 & \left(t+\delta t_j - it\mathbf{Q}\cdot(\varepsilon\cdot\vec{\delta}_j)\right)e^{-i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_j}\\ \left(t+\delta t_j + it\mathbf{Q}\cdot(\varepsilon\cdot\vec{\delta}_j)\right)e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_j} & 0\end{pmatrix} \tag{64}$$

หรือสามารถเขียนฮามิลโทเนียนในสมการที่ (64) ใหม่ ได้เป็น

$$\hat{\mathscr{H}} = \hat{\mathscr{H}}_0 + \hat{\mathscr{H}}_p + \hat{\mathscr{H}}_K \tag{65}$$

เมื่อ

$$\hat{\mathscr{H}}_0 = -t_o \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_1} + e^{-i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_2} + e^{-i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_3} \\ e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_1} + e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_2} + e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_3} & 0 \end{pmatrix} \tag{66}$$

โดยที่ $t = t_0$ สมการที่ (66) เป็นฮามิลโทเนียนขณะที่ยังไม่มีความเครียด

$$\hat{\mathscr{H}}_p = -\begin{pmatrix} 0 & \delta t_1 e^{-i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_1} + \delta t_2 e^{-i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_2} + \delta t_3 e^{-i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_3} \\ \delta t_1 e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_1} + \delta t_2 e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_2} + \delta t_3 e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_3} & 0 \end{pmatrix} \tag{67}$$

และ

$$\begin{aligned} \hat{\mathscr{H}}_K = &-\begin{pmatrix} 0 & -it\mathbf{Q}\cdot(\varepsilon\cdot\vec{\delta}_1)e^{-i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_1} \\ it\mathbf{Q}\cdot(\varepsilon\cdot\vec{\delta}_1)e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_1} & 0 \end{pmatrix} \\ &-\begin{pmatrix} 0 & -it\mathbf{Q}\cdot(\varepsilon\cdot\vec{\delta}_2)e^{-i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_2} \\ it\mathbf{Q}\cdot(\varepsilon\cdot\vec{\delta}_2)e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_2} & 0 \end{pmatrix} \\ &-\begin{pmatrix} 0 & -it\mathbf{Q}\cdot(\varepsilon\cdot\vec{\delta}_3)e^{-i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_3} \\ it\mathbf{Q}\cdot(\varepsilon\cdot\vec{\delta}_3)e^{i\mathbf{Q}\cdot\vec{\delta}_3} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{68}$$

เมื่อเวกเตอร์ $\vec{\delta}_j$ (nearest-neighbor vector) คือ

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{\mathbf{y}} \tag{69a}$$

$$\vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}} - \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{\mathbf{y}} \tag{69b}$$

$$\vec{\delta}_3 = -a\hat{\mathbf{x}} \tag{69c}$$

สมการที่ (69) เป็นเวกเตอร์ที่ชี้จากสับแลตทิซหนึ่งไปยังอีกสับแลตทิซหนึ่งที่อยู่ใกล้เคียงกับตัวมันซึ่งเป็นสับแลตทิซที่ต่างกัน พิจารณารูปที่ 8(d) จะพบว่าเวกเตอร์คลื่นในโซนบริลเลียน $\mathbf{Q} = \vec{k} + \vec{K}$ ที่จุดดิแรค $\vec{K}_1 = -\vec{K}_1' = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\hat{\mathbf{y}}$ เนื่องจากว่า $\vec{K} \gg \vec{k}$ ดังนั้น จึงประมาณให้ $e^{i\vec{\mathrm{k}}\cdot\vec{\delta}} \simeq 1 + i\,\vec{\mathrm{k}}\cdot\vec{\delta}$ และนิยามให้ความเร็วเฟอร์มี (Fermi velocity) $v_F = 3at/2\hbar$ ดังนั้นฮามิลโทเนียน $\hat{\mathscr{H}}_0$ ในสมการที่ (65) จะกลายเป็น

$$\hat{\mathscr{H}}_0 = \begin{pmatrix} 0 & v_F\hbar\vec{k}\cdot(\hat{\mathbf{y}} - i\hat{\mathbf{x}}) \\ v_F\hbar\vec{k}\cdot(\hat{\mathbf{y}} + i\hat{\mathbf{x}}) & 0 \end{pmatrix} \tag{70}$$

ฮามิลโทเนียน $\hat{\mathscr{H}}_p$ ในสมการที่ (67) จะกลายเป็น

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathscr{H}}_p = &-\begin{pmatrix} 0 & \delta t_1(1-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1)e^{-i\vec{K}\cdot\vec{\delta}_1} \\ \delta t_1(1+i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1)e^{i\vec{K}\cdot\vec{\delta}_1} & 0 \end{pmatrix} \\
&-\begin{pmatrix} 0 & \delta t_2(1-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2)e^{-i\vec{K}\cdot\vec{\delta}_2} \\ \delta t_2(1+i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2)e^{i\vec{K}\cdot\vec{\delta}_2} & 0 \end{pmatrix} \\
&-\begin{pmatrix} 0 & \delta t_3(1-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_3)e^{-i\vec{K}\cdot\vec{\delta}_3} \\ \delta t_3(1+i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_3)e^{i\vec{K}\cdot\vec{\delta}_3} & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{71}
$$

เนื่องจากพามิเตอร์ของแอมพลิจูดของความน่าจะเป็นของการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนจากแลตทีซหนึ่งยังแลตทีซที่อยู่ใกล้เคียงกับตัวมัน เป็น

$$
t\left(\left|\vec{\delta}_i'\right|\right) = t_0 e^{-\beta(\frac{\left|\vec{\delta}_i'\right|}{a}-1)} \qquad ; \ \beta \approx 3 \tag{72}
$$

โดยที่ a เป็นระยะห่างของแลตทีซที่อยู่ติดกันเท่ากับ 1.42 อังสตรอม t_0 เป็นพลังงานของความน่าจะเป็นของอิเล็กตรอนที่กระโดดจากแลตทีซหนึ่งไปยังอีกแลตทีซที่หนึ่งที่อยู่ใกล้เคียงกัน ซึ่งมีค่าประมาณ 2.7 อิเล็กตรอนโวลต์ และเวกเตอร์ของแลตทีซที่อยู่ใกล้เคียงกันที่เปลี่ยนไปเนื่องความเครียด เป็น

$$
\vec{\delta}_i' = (\mathrm{I}+\varepsilon)\cdot\vec{\delta}_i = \vec{\delta}_i + \Delta\vec{\delta}_i \tag{73}
$$

เราสามารถเขียนสมการที่ (72) ใหม่ และทำการกระจายโดยใช้อนุกรมเทเลอร์ (Taloy's series) ได้เป็น

$$
t\left(\delta_i'\right) = t\left(\delta_i + \Delta\delta_i\right) = \left[t(\delta_i) + \frac{\partial t(\delta_i)}{\partial \delta_i}\Delta\delta_i + \dots \right]\Bigg|_{\delta_i = a} \tag{74}
$$

แทนสมการที่ (72) ลงใน (74) จะได้

$$
t(\delta_i') = \left[t(\delta_i) + t_0 e^{-\beta(\frac{\delta_i}{a}-1)}\left(-\frac{\beta}{a}\right)\Delta\delta_i + \dots \right]\Bigg|_{\delta_i = a} \simeq t_0 + \left(-\frac{\beta}{a}\right)t_0\Delta\delta_i \tag{75}
$$

เขียนสมการที่ (75) ใหม่ ได้เป็น

$$
t(\delta_i') \simeq t_0 + \delta t_j \tag{76}
$$

ทำกาเปรียบเทียบสมการที่ (75) กับ (76) จะได้

$$\delta t_j = -\frac{\beta}{a} t_0 \Delta \delta_i \tag{77}$$

สมการที่ (77) เป็นความน่าจะเป็นที่เปลี่ยนไปของอิเล็กตรอนที่กระโดดจากแลตที่หนึ่งไปยังอีกแลตทีซหนึ่งที่อยู่รอบๆ ตัวมัน เนื่องจากความเครียด โดยที่ขนาดของผลต่างของเนียร์เรสท์เนเบอร์เวกเตอร์ที่เปลี่ยนไปเนื่องจากความเครียด คือ

$$\Delta \delta_i = \left| (\hat{\mathbf{I}} + \varepsilon) \cdot \vec{\delta}_i \right| - \left| \vec{\delta}_i \right| \tag{78}$$

เมื่อ $\hat{\mathbf{I}}$ เป็นเมทริกซ์เอกลักษณ์ในสองมิติ และ ε เป็นสเทรนเทนเซอร์ (strain tenser) ในระบบพิกัดคาร์ทีเซียนในสองมิติ คือ

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} \end{pmatrix} \tag{79}$$

โดยที่ ε_{ij} เป็นความยาวใหม่ที่เปลี่ยนไปในแนวแกน j ต่อความยาวเดิมในแนวแกน i ทำการแทนสมการที่ (78) ลงในสมการที่ (77) จะได้

$$\delta t_i = -\frac{\beta}{a} t_0 \left\{ \left| (\hat{\mathbf{I}} - \varepsilon) \cdot \vec{\delta}_i \right| - \left| \vec{\delta}_i \right| \right\} \quad ; i = 1,\ 2,\ 3 \tag{80}$$

แทนสมการที่ (69) และ (79) ลงในสมการที่ (79) จะได้

$$\delta t_1 = -\beta t_0 \left(\frac{1}{4} \varepsilon_{xx} + \frac{\sqrt{3}}{2} \varepsilon_{xy} + \frac{3}{4} \varepsilon_{yy} \right) \tag{81a}$$

$$\delta t_2 = -\beta t_0 \left(\frac{1}{4} \varepsilon_{xx} - \frac{\sqrt{3}}{2} \varepsilon_{xy} + \frac{3}{4} \varepsilon_{yy} \right) \tag{81b}$$

$$\delta t_3 = -\beta t_0 \varepsilon_{xx} \tag{81c}$$

ขนาดของเนียร์เรสท์เนเบอร์เวกเตอร์ที่เปลี่ยนไปในสมการที่ (81) เป็นการประมาณโดยการเก็บเฉพาะพหุนามของความเครียดที่ดีกรีอันดับที่หนึ่งเท่านั้น (Pereira *et al.*, 2009) เนื่องจากว่าเราพิจารณาที่ค่าของความเครียดมีค่าไม่เกิน 20% และทำการแทนค่าสมการที่ (81) ลงใน (71) จะได้

$$\hat{\mathscr{H}}_p = v_F\hbar\begin{pmatrix} 0 & \left(-\frac{\beta}{2}\varepsilon_{xy} + i(\frac{3\beta}{4}\varepsilon_{xx} + \frac{\beta}{4}\varepsilon_{yy})\right)\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{x}} \\ \left(-\frac{\beta}{2}\varepsilon_{xy} - i(\frac{3\beta}{4}\varepsilon_{xx} + \frac{\beta}{4}\varepsilon_{yy})\right)\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{x}} & 0 \end{pmatrix}$$
$$+ v_F\hbar\begin{pmatrix} 0 & \left(-\frac{3\beta}{4}\varepsilon_{yy} + i(\frac{\beta}{4}\varepsilon_{xx} + \frac{\beta}{2}\varepsilon_{xy})\right)\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{y}} \\ \left(-\frac{3\beta}{4}\varepsilon_{yy} - i(\frac{\beta}{4}\varepsilon_{xx} + \frac{\beta}{2}\varepsilon_{xy})\right)\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{y}} & 0 \end{pmatrix}$$
$$+ v_F\hbar\begin{pmatrix} 0 & \frac{\beta}{2a}\varepsilon_{xx} - \frac{\beta}{2a}\varepsilon_{yy} - \frac{\beta}{a}i\varepsilon_{xy} \\ \frac{\beta}{2a}\varepsilon_{xx} - \frac{\beta}{2a}\varepsilon_{yy} + \frac{\beta}{a}i\varepsilon_{xy} & 0 \end{pmatrix} \tag{82}$$

และฮามิลโทเนียน $\hat{\mathscr{H}}_K$ ในสมการที่ (68) จะกลายเป็น

$$\hat{\mathscr{H}}_K = -\hbar v_F\begin{pmatrix} 0 & \frac{2\pi}{3\sqrt{3}}(-\varepsilon_{xy} + i\varepsilon_{yy})\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{x}} \\ \left(\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}(-\varepsilon_{xy} - i\varepsilon_{yy})\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}\right. & 0 \end{pmatrix}$$
$$-\hbar v_F\begin{pmatrix} 0 & \frac{2\pi}{3\sqrt{3}}(\varepsilon_{yy} + i\varepsilon_{xy})\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{y}} \\ \frac{2\pi}{3\sqrt{3}}(\varepsilon_{yy} - i\varepsilon_{xy})\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{y}} & 0 \end{pmatrix} \tag{83}$$
$$-\hbar v_F\begin{pmatrix} 0 & \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}(-\varepsilon_{yy} + i\varepsilon_{xy}) \\ \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}(-\varepsilon_{yy} - i\varepsilon_{xy}) & 0 \end{pmatrix}$$

แทนสมการที่ (70), (82) และ (83) ลงในสมการที่ (64) จะได้

$$\begin{aligned}\hat{\mathscr{H}} &= \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \left(-\frac{\beta}{2}\varepsilon_{xy}+\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\varepsilon_{xy}\right)\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{x}} \\ \left(-\frac{\beta}{2}\varepsilon_{xy}+\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\varepsilon_{xy}\right)\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{x}} & 0 \end{pmatrix} \\ &+\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & i\left(-1+\frac{\beta}{4}(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy})-\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\varepsilon_{xy}\right)\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{x}} \\ i\left(1-\frac{\beta}{4}(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy})+\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\varepsilon_{xy}\right)\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{x}} & 0 \end{pmatrix} \\ &+\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \left(1-\frac{3\beta}{4}\varepsilon_{yy}-\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\varepsilon_{yy})\right)\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{y}} \\ \left(1-\frac{3\beta}{4}\varepsilon_{yy}-\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\varepsilon_{yy}\right)\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{y}} & 0 \end{pmatrix} \\ &+v_F\hbar \begin{pmatrix} 0 & i\left(\frac{\beta}{4}(\varepsilon_{xx}+2\varepsilon_{xy})-\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\varepsilon_{xy}\right)\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{y}} \\ i\left(-\frac{\beta}{4}(\varepsilon_{xx}+2\varepsilon_{xy})+\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\varepsilon_{xy}\right)\vec{k}\cdot\hat{\mathbf{y}} & 0 \end{pmatrix} \\ &+\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \frac{\beta}{2a}\varepsilon_{xx}-\frac{\beta}{2a}\varepsilon_{yy}-\frac{\beta}{a}i\varepsilon_{xy} \\ \frac{\beta}{2a}\varepsilon_{xx}-\frac{\beta}{2a}\varepsilon_{yy}+\frac{\beta}{a}i\varepsilon_{xy} & 0 \end{pmatrix} \\ &+\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \frac{4\pi}{3\sqrt{3}}(\varepsilon_{yy}-i\varepsilon_{xy}) \\ \frac{4\pi}{3\sqrt{3}}(\varepsilon_{yy}+i\varepsilon_{xy}) & 0 \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{84}$$

รูปแบบที่พบในสมการที่ (84) คือฮามิลโทเนียนขณะที่มีความเครียด และกำหนดให้ศักย์เวกเตอร์ปลอมๆ $\mathbf{A}_{pse}$ (pseudovector potential) เป็น

$$\mathbf{A}_{pse}=\frac{cv_F\pi\hbar}{ea}\left((\frac{4}{3\sqrt{3}}\varepsilon_{yy}+\frac{\beta}{2\pi}(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}))\hat{\mathbf{i}}+(\frac{4}{3\sqrt{3}}\varepsilon_{yy}+\frac{\beta}{\pi}\varepsilon_{xy})\hat{\mathbf{j}}\right) \tag{85}$$

ฮามิลโทเนียนในสมการที่ (84) เป็นฮามิลโทเนียนสำหรับอิเล็กตรอนที่ระดับพลังงานต่ำๆ หรืออยู่รอบๆ จุดดิแรค $\mathbf{K}$ (Dirac point) และใช้โซนบริลเลียนขณะที่ไม่มีความเครียดเป็นตัวอ้างอิง

2. สมการของเวลย์สำหรับแกรฟีนที่ถูกทำให้บิดเบี้ยว

เราจะพิจารณาฮามิลโทเนียนแบบเชิงเส้นในสองมิติที่มีฟังก์ชันคลื่น $\mathbf{k}=(k_x,k_y)$ เราเรียกว่า "เวลย์ฮามิลโทเนียน (Wely Hamiltonain)" ซึ่งมีรูปแบบของสมการ ดังนี้

$$\hat{H}=\sum_{\mu=0,\dots,3}\hbar\mathbf{v}_\mu\cdot\mathbf{k}\sigma^\mu \tag{86}$$

ในเทอมของความเร็ว $\mathbf{v}_\mu=(v_\mu^x,v_\mu^y)$ ซึ่งส่วนประกอบทั้งสองของความเร็วในสองมิติสองส่วน คือ $\mathbf{v}_\mu^x=(v_0^x,\,\vec{v}^x)\equiv(v_0^x,\,v_1^x,\,v_2^x,\,v_3^x)$ และ $\mathbf{v}_\mu^y=(v_0^y,\,\vec{v}^y)\equiv(v_0^y,\,v_1^y,\,v_2^y,\,v_3^y)$ และเพาลีเมทริกซ์ในสองมิติ $\sigma_0\equiv 1$ และ $\vec{\sigma}=(\sigma_1,\,\sigma_2,\,\sigma_3)$

เวลย์ฮามิลโทเนียนอธิบายโดยพารามิเตอร์ที่แตกต่างกันแปดตัว ซึ่งได้มาจากความเร็ว $\mathbf{v}_\mu$ ดังนั้นเราจึงสามารถเขียนฮามิลโทเนียนในสมการที่ (86) ใหม่ ได้เป็น

$$\hat{\mathbf{H}}=\hbar\mathbf{v}_0\cdot\mathbf{k}\sigma^0+\hbar\left(\vec{v}^x k_x+\vec{v}^y k_y\right)\cdot\vec{\sigma} \tag{87}$$

หรือสามารถเขียนฮาโทเนียนในสมการที่ (87) ให้อยู่ในรูปของเมทริกซ์ ได้เป็น

$$\hat{\mathbf{H}}=\hbar\begin{pmatrix}(v_0^x+v_3^x)k_y+(v_0^y+v_3^y)k_y & (v_1^x-iv_2^x)k_x+(v_1^y-iv_2^y)k_y\\(v_1^x+iv_2^x)k_x+(v_1^y+iv_2^y)k_y & (v_0^x-v_3^x)k_x+(v_0^y-v_3^y)k_y\end{pmatrix} \tag{88}$$

สำหรับในกรณีของแกรฟีนที่อิเล็กตรอนอยู่ที่ระดับพลังงานต่ำๆ เราจะพิจารณาให้ $\mathbf{v}_0=\mathbf{v}_3=0$ เวลย์ฮามิลโทเนียนในสมการที่ (88) จะกลายเป็น

$$\hat{\mathbf{H}}=\hbar\begin{pmatrix}0 & (v_1^x-iv_2^x)k_x+(v_1^y-iv_2^y)k_y\\(v_1^x+iv_2^x)k_x+(v_1^y+iv_2^y)k_y & 0\end{pmatrix} \tag{89}$$

ทำการเปรียบเทียบสมการที่ (84) กับ (89) เราจะได้

$$v_1^x=-v_F\frac{\beta}{2}\varepsilon_{xy}+\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}v_F\varepsilon_{xy} \tag{90a}$$

$$v_2^x=v_F-\frac{\beta}{4}v_F(3\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy})+\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}v_F\varepsilon_{xy} \tag{90b}$$

$$v_1^y=v_F-\frac{\beta}{4}v_F(\varepsilon_{xx}+3\varepsilon_{yy})-\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}v_F\varepsilon_{xy} \tag{90c}$$

$$v_2^y = -v_F \frac{\beta}{2}\varepsilon_{xy} + \frac{2\pi}{3\sqrt{3}} v_F \varepsilon_{xy} \tag{90d}$$

โดยที่สมการที่ (90) เป็นองค์ประกอบของความเร็ว หาพลังงานของเวลย์ฮามิลโทเนียนในสมการที่ (89) โดยใช้ความสัมพันธ์ $\det(\hat{\mathbf{H}} - \lambda\hat{\mathbf{I}}) = 0$ เมื่อ $\hat{\mathbf{I}}$ เป็นเมทริกซ์เอกลักษณ์ (identity matrix) ดังนั้นจะได้พลังงาน E ของเวลย์ฮาร์มิลโทเนียนในสมการที่ (89) เป็น

$$E = \kappa\hbar\sqrt{(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k})^2 + (\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k})^2} \tag{91}$$

เมื่อ $\kappa = \pm 1$ เป็นตัวบ่งชี้แถบพลังงาน คือเครื่องหมายบวกแสดงถึงพลังงานที่แถบการนำ และเครื่องหมายลบแสดงถึงพลังงานที่แถบแวเลนซ์ หาสถานะเจาะจง (eigenstate) $|\chi\rangle$ ของเวลย์ฮามิล-โทเนียน ได้จาก $\hat{\mathbf{H}}|\chi\rangle = E|\chi\rangle$ โดยกำหนดให้สถานะเจาะจง $|\chi\rangle = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ ดังนั้น จะได้

$$\hbar\begin{pmatrix} 0 & \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k} - i\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k} \\ \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k} + i\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \kappa\hbar\sqrt{(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k})^2 + (\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k})^2}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \tag{92}$$

หรือ

$$\kappa\sqrt{(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k})^2 + (\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k})^2}\, A = \{(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k}) - i(\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k})\} B \tag{93a}$$

$$\kappa\sqrt{(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k})^2 + (\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k})^2}\, B = \{(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k}) + i(\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k})\} A \tag{93b}$$

ในงานวิจัยนี้ เราจะเลือกใช้สมการที่ (93a) ในการคำนวณ เราจะได้ $A = (\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k}) - i(\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k})$ และ $B = \kappa\sqrt{(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k})^2 + (\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k})^2}$ และทำการนอร์เมิลไลซ์เซชัน (Normalization) โดยใช้ความสัมพันธ์ $N^2 = A^2 + B^2$ จะได้

$$N = \sqrt{2(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k})^2 + 2(\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k})^2} \tag{94}$$

เราสามารถเขียนสมการสถานะเจาะจง $|\chi\rangle$ ของเวลย์ฮามิลโทเนียนในสมการที่ (89) ได้เป็น

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k})^2 + 2(\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k})^2}}\begin{pmatrix} (\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k}) - i(\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k}) \\ \kappa\sqrt{(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k})^2 + (\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k})^2} \end{pmatrix} \tag{95}$$

เมื่อเรานิยามให้ $a \equiv \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k} = \sqrt{a^2 + b^2}\cos\phi$ และ $b \equiv \mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k} = \sqrt{a^2 + b^2}\sin\phi$ ดังนั้นเราสามารถเขียนพลังงานในสมการที่ (89) ได้เป็น

$$E = \kappa\hbar\sqrt{\left(\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k}\right)^2 + \left(\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k}\right)^2} \tag{96}$$

และเขียนสถานะเจาะจงในสมการที่ (95) ใหม่ ได้เป็น

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \kappa \end{pmatrix} \tag{97}$$

เมื่อ $\phi(\mathbf{k}_\kappa) = \tan^{-1}\left(\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{k}_\kappa / \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{k}_\kappa\right)$ โดยที่กำหนดให้เวกเตอร์คลื่น $\mathbf{k}_\kappa$ (wave vector) เป็น

$$\mathbf{k}_\kappa = k_\kappa(\cos\theta_\kappa\,\hat{\mathrm{i}} + \sin\theta_\kappa\,\hat{\mathrm{j}}) \tag{98}$$

เมื่อแลตทิซในแกรฟีนเปลี่ยนตำแหน่งไปจากเดิมเนื่องจากความเครียดแล้วผลกระทบทบที่เกิดขึ้นคือรูปแบบของพลังงานเฟอร์มีเปลี่ยนจากวงกลมไปเป็นวงรี โดยที่มุมของแกนเอก θ_r ของพลังงานเฟอร์มีที่บิดเบือนไปจากในแนวแกน k_x เป็น

$$\theta_r = \frac{1}{2}\tan^{-1}\left(\frac{2(\mathrm{v}_1^x\mathrm{v}_1^y + \mathrm{v}_2^x\mathrm{v}_2^y)}{((\mathrm{v}_1^x)^2 + (\mathrm{v}_2^x)^2) - ((\mathrm{v}_1^y)^2 + (\mathrm{v}_2^y)^2)}\right) \tag{99}$$

สมการที่ (99) เป็นตัวที่บ่งบอกถึงลักษณะมุมของพลังงานเฟอร์มีที่บิดเบือนไป เนื่องลักษณะการดึงของแกรฟีนในแต่แบบมีความแตกต่างกันออกไปดังนั้นสแทรนเทนเซอร์ (strain tensor) สำหรับความเครียดในแบบต่างๆ ก็ต่างกันออกไป ดังนี้

$$\varepsilon_{ss} = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xy} & 0 \end{pmatrix}, \varepsilon_{is} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & \varepsilon_{yy} \end{pmatrix}, \varepsilon_{as} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & -\nu\varepsilon_{yy} \end{pmatrix}, \varepsilon_{zs} = \begin{pmatrix} -\nu\varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & \varepsilon_{yy} \end{pmatrix} \tag{100}$$

สมการที่ (100) คือสแทรนเทนเซอร์สำหรับความเครียดแบบเฉือน (shear strain) ความเครียดแบบเทนไซน์ไอโซโทปิก (tensile isotropic strain) ความเครียดแบบเก้าอี้พับแขน (armchair uniaxial strain) และความเครียดแบบซิกแซก (zigzag strain) ตามลำดับ เมื่อ ν คืออัตราส่วนของปัวซอง (Poisson's ratio) เป็นตัวที่บ่งบอกถึงอัตราการยืดออกหรือหดเข้าของแกรฟีน และ ε_{ij} คือความเครียดหมายถึงความยาวที่ยืดออกในแนวแกน j ต่อความยาวเดิมในแนวแกน i

3. อัตราการวมตัวกันใหม่ของอิเล็กตรอนกับโฮลในแกรฟีนที่บิดเบี้ยวเนื่องจากความเครียด

ในส่วนนี้เราจะพิจารณาอัตราการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนที่อยู่ที่แถบการนำไปยังแถบแวเลนซ์โดยที่ควอนไทซ์เพอร์เทอร์เบชันอยู่ในเทอมของแผนภาพไฟน์แมน (Feynman diagram) พิจารณาเมื่อเราใส่สนามแม่เหล็กลงไปทำให้ $\mathbf{p}\rightarrow\mathbf{p}-e\mathbf{A}/c$ ซึ่งจะได้เทอมของศักย์-เวกเตอร์ (vector potential) เพิ่มขึ้นมาซึ่งเป็นควอนไทซ์เพอร์เทอร์เบชัน $\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}}$ ในฮามิลโทเนียนรวม คือ

$$\hat{\mathbf{H}} = \sum_{\mu=1,2}\int d^{3}\mathbf{r}\,\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})\left[\mathbf{v}_{\mu}\cdot\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)\sigma^{\mu}\right]\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{H}}_{0}+\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} \tag{101}$$

เมื่อ $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ เป็นสนามควอนไทซ์อันดับที่สอง (second quantized field) คือ

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{A}}\sum_{\mathbf{k}}F(\mathrm{z})\left(\hat{C}_{c,\mathbf{k}}\left|\chi_{c}\right\rangle e^{i(\mathbf{k}_{c}\cdot\mathbf{r}-\omega_{c}t)}+\hat{C}_{v,\mathbf{k}}\left|\chi_{v}\right\rangle e^{i(\mathbf{k}_{v}\cdot\mathbf{r}-\omega_{v}t)}\right) \tag{102}$$

เมื่อ $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ เป็นเวกเตอร์ศักย์ (potential vector) สามารถเขียนสมการได้ เป็น

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = c\sum_{\mathbf{k}_{\gamma},j}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\varepsilon_{\gamma}V\omega_{\gamma}}}\left(\hat{\varepsilon}_{j}\hat{C}_{\mathbf{k}_{\gamma},j}e^{i\mathbf{k}_{\gamma}\cdot\mathbf{r}-i\omega_{\gamma}t}+\hat{\varepsilon}_{j}^{*}\hat{C}_{\mathbf{k}_{\gamma},j}^{\dagger}e^{-i\mathbf{k}_{\gamma}\cdot\mathbf{r}+i\omega_{\gamma}t}\right) \tag{103}$$

โดยที่ j เป็นสถานะของการโพลาไรเซชันของโฟตอน (photon's polarization state) V เป็นปริมาตร ε_{γ} คือค่าความนำสนามไฟฟ้าสัมพันธ์ (relative permittivity) c เป็นความเร็วแสง (speed of light) และ $\omega_{\gamma}=c\left|\mathbf{k}_{\gamma}\right|$ คืออัตราเร็วเชิงมุม (angular velocity) ซึ่งจะเห็นว่าอัตราเร็วเชิงมุม ω_{γ} มีความเร็วอยู่ในรูปของความเร็วแสงไม่ใช้ความเร็วเฟอร์มี่ (v_{F}) จากสมการที่ (101) จะได้ควอน-ไทซ์เพอร์เทอร์เบชันในส่วนที่เป็นอันตรกิริยา $\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}}$ เป็น

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} = -\frac{e}{c}\hbar\sum_{\mu=1,2}\int d^{3}\mathbf{r}\,\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})\left[\mathbf{v}_{\mu}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r})\sigma^{\mu}\right]\hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{104}$$

แทนสมการที่ (102) และ (103) ลงในสมการที่ (104) จะได้

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} = {} & -e\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\varepsilon_{\gamma}V\omega_{\gamma}}}e^{i(\omega_{v}+\omega_{\gamma}-\omega_{c})t}\int\frac{d^{3}\mathbf{r}}{A}\sum_{\mathbf{k}_{c}}\sum_{\mathbf{k}_{\gamma},j}\sum_{\mathbf{k}_{v}}\left|F(z)\right|^{2}e^{-i(\mathbf{k}_{v}+\mathbf{k}_{\gamma}-\mathbf{k}_{c})\cdot\mathbf{r}}\hat{C}_{v}^{\dagger}\hat{C}_{\gamma}^{\dagger}\hat{C}_{c} \\ & \times\left\{\left\langle\chi_{v}\right|(\sigma_{x}\mathbf{v}_{1}+\sigma_{x}\mathbf{v}_{2})\cdot\hat{\varepsilon}_{j}^{*}\left|\chi_{c}\right\rangle\right\}\end{aligned} \tag{105}$$

สมการที่ (105) เป็นควอนไทซ์เพอร์เทอร์เบชัน (quantize perturbation) ในกรณีของการแผ่รังสีแบบเกิดเอง เมื่อ $F(\mathrm{z})$ เป็นฟังก์ชันของคาร์บอนอะตอมใน $2P_z$ ออร์บิทัลในระนาบของแกรฟีน ซึ่งเราประมาณให้มีค่าน้อยๆ

คำนวณหาอัตราการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนจากสถานะเริ่มต้นที่แถบการนำไปยังสถานะสุดท้ายที่แถบแวเลนซ์ได้จากกฎของเฟอร์มี่โกลเด้น (Fermi's golden rule) คือ

$$\Gamma_{i\to f} = \frac{d}{dt}\left|\left\langle \varphi_f(t)\middle|\psi(t)\right\rangle\right|^2 \tag{106}$$

เมื่อ $\left|\psi(t)\right\rangle = \hat{\mathbf{U}}_0(\mathrm{t})\left|\varphi_i(0)\right\rangle$ โดยที่ $\hat{\mathbf{U}}(\mathrm{t}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\,\hat{\mathbf{H}}_{\mathrm{int}}(t)\right)$ เป็นตัวกระทำการที่วิวัฒนาการไปในเวลา (time evolution operator) ทำการกระจายตัวกระทำการที่วิวัฒนาการไปตามเวลาโดยใช้อนุกรมไดสัน (Dyson's series) จะได้

$$\hat{\mathbf{U}}(\mathrm{t}) = 1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_0^{t_1} dt_1\hat{\mathbf{H}}^{(\mathrm{I})}_{\mathrm{int}}(t) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_0^{t_1} dt_1\int_0^{t_2} dt_2\hat{\mathbf{H}}^{(\mathrm{II})}_2(t) + \ldots \tag{107}$$

เราจะทำการประมาณโดยเก็บแค่พหุนามดีกรีกำลังหนึ่งของอนุกรมไดสัน หรือเราเรียกอีกอย่างว่า "แผนภาพต้นไม้ของไฟน์แมน (tree-level Feynman diagram)" ตัวกระทำการวิวัฒนาการที่ไปในเวลาสมการที่ (107) จะกลายเป็น

$$\hat{\mathbf{U}}(\mathrm{t}) \approx 1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_0^{t_1} dt_1\hat{\mathbf{H}}^{(\mathrm{I})}_{\mathrm{int}}(t) \tag{108}$$

ดังนั้นเราจะได้แอมพลิจูดของการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนจากสถานะเริ่มต้น $\left|\varphi_i\right\rangle$ ไปยังสถานะสุดท้าย $\left|\varphi_f\right\rangle$ ในสมการที่ (106) เป็น

$$\left\langle \varphi_f(t)\middle|\psi(t)\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \left\langle \varphi_f(t')\middle|\hat{\mathbf{H}}_{\mathrm{int}}(t')\middle|\varphi_i(t')\right\rangle \equiv M \tag{109}$$

โดยกำหนดให้กระบวนการทำลายอิเล็กตรอนที่สถานะเริ่มต้น $\left|\varphi_i\right\rangle$ และกระบวนการสร้างอิเล็กตรอนที่สถานะสุดท้าย $\left|\varphi_f\right\rangle$ เป็น

$$\left|\varphi_i\right\rangle = \left|n_\gamma\right\rangle\left|1-n_v\right\rangle\left|n_c\right\rangle \tag{110a}$$

$$\left|\varphi_f\right\rangle = \left|n_\gamma+1\right\rangle\left|n_v\right\rangle\left|1-n_c\right\rangle \tag{110b}$$

เมื่อ n_c เป็นจำนวนของอิเล็กตรอนที่แถบการนำ n_γ แทนจำนวนของโฟตอนที่แผ่รังสีออกมา และ $1-n_v$ คือจำนวนของอิเล็กตรอนในแถบแวเลนซ์ และแทนสมการที่ (105) และ (110) ลงใน (109) จะได้

$$
\begin{aligned}
M = i\frac{e}{\hbar}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\varepsilon_\gamma V\omega_\gamma}}\left[\frac{2e^{i(\omega_v+\omega_\gamma-\omega_c)t/2}}{\omega_v+\omega_\gamma-\omega_c}\sin\left(\frac{\omega_v+\omega_\gamma-\omega_c}{2}t\right)\right]\left[\frac{1}{A}2\pi\delta(\mathbf{k}_v+\mathbf{k}_\gamma-\mathbf{k}_c)\right] \\
\times\sum_j\left\langle\chi_v\right|(\sigma_x\mathbf{v}_1+\sigma_y\mathbf{v}_2)\cdot\hat{\varepsilon}_j^*\left|\chi_c\right\rangle\left\langle n_c'\right|\left\langle n_v'\right|\left\langle n_\gamma'\right|\hat{C}_v^\dagger\hat{C}_\gamma^\dagger\hat{C}_c\left|n_\gamma\right\rangle\left|n_v\right\rangle\left|n_c\right\rangle
\end{aligned}
\tag{111}
$$

ยกกำลังสอง M แล้วแทนค่าที่ได้ลงในสมการที่ (106) โดยในที่นี้เรากำหนดให้ขอบเขตของพื้นที่ A ของแกรฟีนมีขนาดใหญ่มาก จะได้

$$
\begin{aligned}
d\Gamma_{c\to v} = \frac{e^2}{\hbar}\frac{2\pi\hbar}{A^2\varepsilon_\gamma V\omega_\gamma}\left[2\pi\delta(\omega_v+\omega_\gamma-\omega_c)\right]\left[(2\pi)^2A\delta(\mathbf{k}_v+\mathbf{k}_\gamma-\mathbf{k}_c)\right] \\
\times\sum_j\left|\left\langle\chi_v\right|(\sigma_x\mathbf{v}_1+\sigma_y\mathbf{v}_2)\cdot\hat{\varepsilon}_j^*\left|\chi_c\right\rangle\right|^2(n_\gamma+1)(1-n_v)(n_c)\frac{Ad^2\mathbf{k}_v}{(2\pi)^2}\frac{Vd^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}
\end{aligned}
\tag{112}
$$

โดยที่เราใช้ความสัมพันธ์ $\hat{C}^\dagger\left|n\right\rangle=\sqrt{n\pm1}\left|n\pm1\right\rangle$, $\hat{C}\left|n\right\rangle=\sqrt{n}\left|\pm(n-1)\right\rangle$ และ $\left\langle n'\middle|n\right\rangle=\delta_{n',n}$

ในการคำนวณเมทริกซ์เชิงมุม (angular matrix) ในสมการที่ (112) เรากำหนดให้เวกเตอร์ $\hat{\mathbf{k}}_\gamma=(\sin\theta_\gamma\cos\phi_\gamma,\ \sin\theta_\gamma\sin\phi_\gamma,\ \cos\theta_\gamma)$, $\hat{\varepsilon}_1=\hat{\mathbf{z}}\times\hat{\mathbf{k}}_\gamma/\left|\hat{\mathbf{z}}\times\hat{\mathbf{k}}_\gamma\right|$ และ $\hat{\varepsilon}_2=\hat{\mathbf{k}}_\gamma\times\hat{\varepsilon}_2/\left|\hat{\mathbf{k}}_\gamma\times\hat{\varepsilon}_2\right|$ ซึ่งเป็นเวกเตอร์ที่ใช้ในการอธิบายเกี่ยวกับโฟตอนและความน่าจะเป็นของการโพลาไรเซชันของโฟตอน ทำการรวมทุกค่าที่เป็นไปได้ของการโพลาไรเซชัน j ของโฟตอนที่สร้างขึ้นมา จะได้

$$
\begin{aligned}
&\sum_{j=1,2}\left|\left\langle\chi_v\right|(\sigma_x\mathbf{v}_1+\sigma_y\mathbf{v}_2)\cdot\hat{\varepsilon}_j^*\left|\chi_c\right\rangle\right|^2 \\
&=\frac{1}{2}\left[v_1^2+v_2^2-(v_1^2-v_2^2)\cos(\phi_v+\phi_c)-2v_1v_2\cos(\Theta_1-\Theta_2)\sin(\phi_v+\phi_c)\right] \\
&-\frac{1}{2}\sin^2\theta_\gamma\left[v_1^2\cos^2(\phi_\gamma-\Theta_1)+v_2^2\cos^2(\phi_\gamma-\Theta_2)-v_1^2\cos^2(\phi_\gamma-\Theta_1)\cos(\phi_v+\phi_c)\right. \\
&\left.+v_2^2\cos^2(\phi_\gamma-\Theta_2)\cos(\phi_v+\phi_c)-2v_1v_2\cos(\phi_\gamma-\Theta_1)\cos(\phi_\gamma-\Theta_2)\sin(\phi_v+\phi_c)\right] \\
&\equiv\mathcal{M}(\theta_\gamma,\phi_\gamma,\varepsilon)
\end{aligned}
\tag{113}
$$

เมื่อเรานิยามให้ $v_{1(2)}^x\equiv\sqrt{(v_{1(2)}^x)^2+(v_{1(2)}^y)^2}\cos\Theta_{1(2)}$, $v_{1(2)}^y\equiv\sqrt{(v_{1(2)}^x)^2+(v_{1(2)}^y)^2}\sin\Theta_{1(2)}$ และ $v_{1(2)}=\sqrt{(v_{1(2)}^x)^2+(v_{1(2)}^y)^2}$ ในการพิจารณาสมการที่ (112) เราพบว่ามีสภาวะของการอนุรักษ์พลังงานและการอนุรักษ์โมเมนตัม คือ

$$E_v(\mathbf{k}_v) = E_c(\mathbf{k}_c) - \hbar \mathrm{c} \left|\mathbf{k}_\gamma\right| \tag{114}$$

และ

$$\mathbf{k}_v = \mathbf{k}_c - \mathbf{k}_\gamma \tag{115}$$

อินทิเกรตฟังก์ชัน δ ของพลังงานและโมเมนตัมในสมการที่ (112) โดยใช้ความสัมพันธ์

$$\delta\left(f(x)\right) = \sum_i \frac{1}{\left|\dfrac{\partial f(x_i)}{\partial x_i}\right|} \delta(x - x_i) \tag{116}$$

เราจะได้การแผ่รังสีของโฟตอนแบบเกิดเอง ซึ่งขึ้นอยู่กับสเทรนเทนเซอร์ ε เป็น

$$\frac{d\Gamma_{c\to v}(\varepsilon)}{d\Omega} = \frac{e^2}{2\pi\varepsilon_\gamma\omega_\gamma} \frac{1}{\hbar c} \mathscr{M}(\theta_\gamma, \phi_\gamma, \varepsilon) \sum_{i=1,\,2} (n_c)(1-n_v)(1+n_\gamma^{(i)}) \left|k_\gamma^{(i)}\right|^2 \tag{117}$$

เมื่อ $d\Omega = d\cos\theta_\gamma d\sin\phi_\gamma$ คือมุมตัน (solid angle) และ $k_\gamma^{(i)}$ เป็นขนาดของเลขคลื่นของโฟตอน (wave number of photon) ในสภาวะที่มีการอนุรักษ์พลังงานและอนุรักษ์โมเมนตัม คือ

$$k_\gamma^{(1)} = \frac{-B + \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A}, \;\; k_\gamma^{(2)} = \frac{-B - \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A} \tag{118}$$

เมื่อกำหนดให้ A, B และ C เป็น

$$\begin{aligned} A = {}& -c^2 + (v_1^x v_1^y + v_2^x v_2^y)\sin(2\phi_\gamma)\sin^2\theta_\gamma \\ & + ((v_1^x)^2 + (v_2^x)^2)\cos^2\phi_\gamma \sin^2\theta_\gamma + ((v_1^y)^2 + (v_2^y)^2)\sin^2\phi_\gamma \sin^2\theta_\gamma \end{aligned} \tag{119}$$

$$\begin{aligned} B = {}& 2cE_c - 2k_c(v_1^x v_1^y + v_2^x v_2^y)\sin\theta_\gamma \sin(\phi_\gamma + \phi_c) \\ & - 2k_c \sin\theta_\gamma \left[((v_1^x)^2 + (v_2^x)^2)\cos\phi_c \cos\phi_\gamma + ((v_1^y)^2 + (v_2^y)^2)\sin\phi_c \sin\phi_\gamma \right] \end{aligned} \tag{120}$$

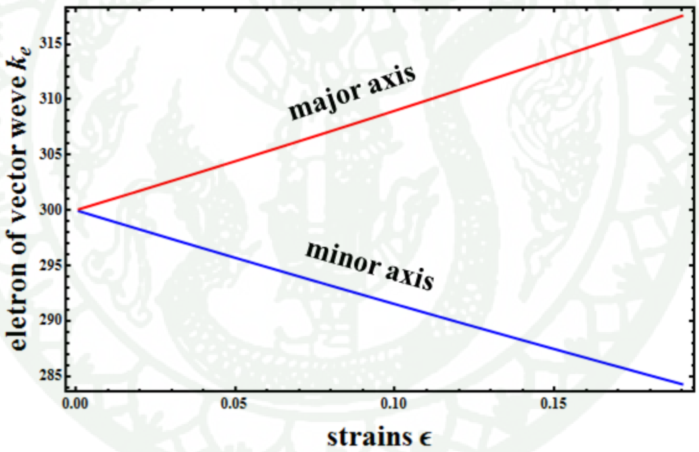
และ

$$\begin{aligned} C = {}& -E_c^2 k_c^2 + k_c^2(v_1^x v_1^y + v_2^x v_2^y)\sin(2\phi_c) \\ & + k_c^2((v_1^x)^2 + (v_2^x)^2)\cos^2\phi_c + k_c^2((v_1^y)^2 + (v_2^y)^2)\sin^2\phi_c \end{aligned} \tag{121}$$

ผลและวิจารณ์

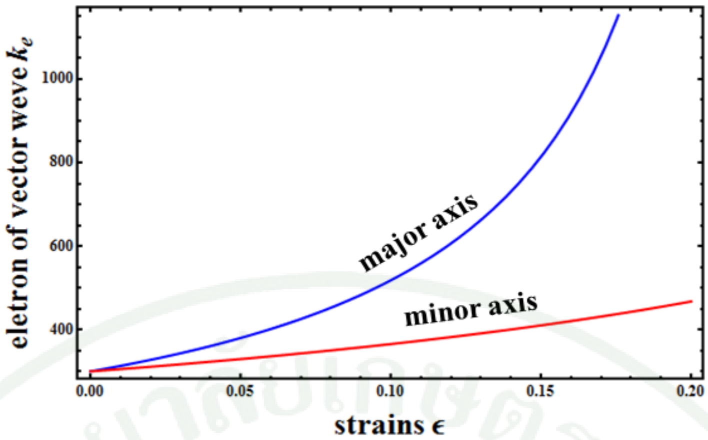
ในส่วนนี้ เราจะพิจารณาผลที่ได้จากการคำนวณโดยการนำมาวาดกราฟ เพื่อนำมาวิเคราะห์ผลลัพธ์ที่ได้รับจากความเครียดแบบเฉือน (shear strain) ความเครียดแบบเทนไซน์ไอโซโทปิก (tensile isotropic strain) ความเครียดแบบเก้าอี้พับแขน (armchair uniaxaul strain) และความเครียดแบบซิกแซก (zigzag strain) ตามลำดับ

ผลลัพธ์ได้รับจากการเปลี่ยนตำแหน่งของแลตทีซในแกรฟีนเนื่องความเครียด คือทำให้รูปแบบของเส้นพลังงานเฟอร์มี (Fermi line) เปลี่ยนรูปร่างจากวงกลมไปเป็นวงรี โดยที่ความยาวของแกนเอกและความยาวของแกนโทของวงรีจะเปลี่ยนไปซึ่งขึ้นอยู่กับขนาดของความเครียดที่ใช้ในการดึงแกรฟีนและลักษณะของความเครียดที่ใช้ในการดึงแกรฟีน

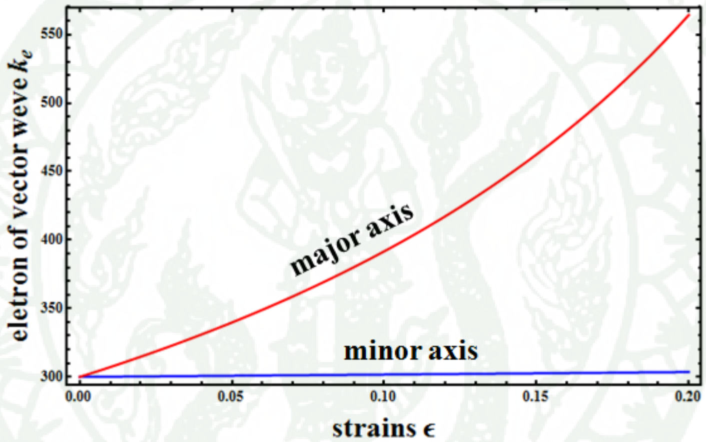


(ก) ความเครียดแบบเฉือน

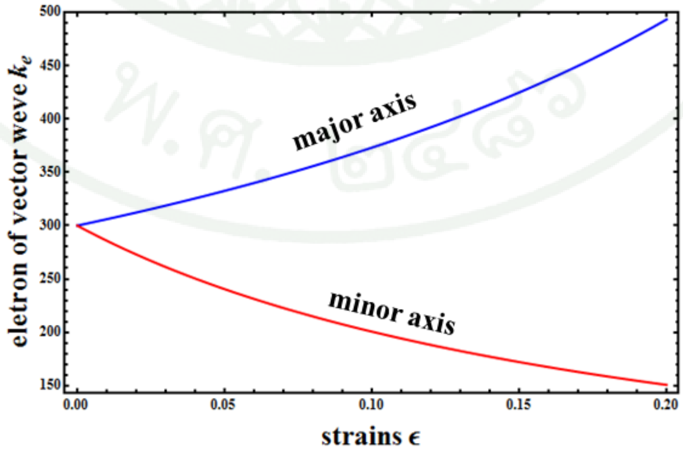
ภาพที่ 9 ขนาดขงความยาวของแกนเอกและแกนโทของเส้นพลังงานเฟอร์มีโดยที่เส้นสีแดงแทนความยาวที่ยืดออก (หดเข้า) ในแนวแกน y และเส้นสีน้ำเงินแทนความยาวที่ยืดออก (หดเข้า) ในแนวแกน x ของเส้นพลังงานเฟอร์มี สำหรับความเครียดในแบบต่างๆ อยู่ในช่วง $0 \le \varepsilon \le 0.2$



(ข) ความเครียดแบบเทนไซน์ไอโซโทปิก



(ค) ความเครียดแบบเก้าอีพับแขน



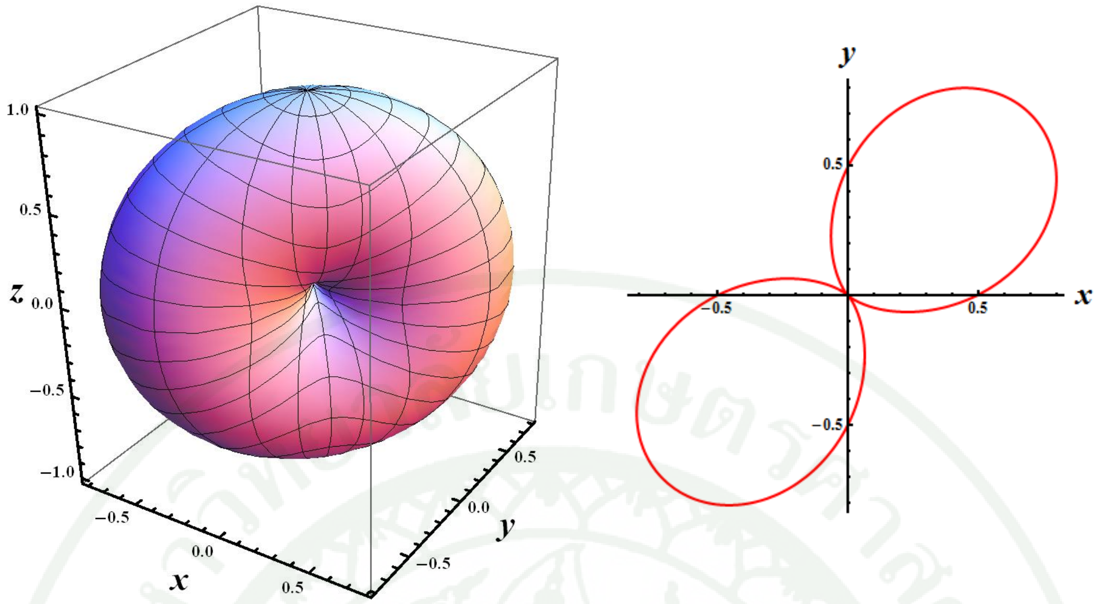
(ค) ความเครียดแบบซิกแซก

ภาพที่ 9 (ต่อ)

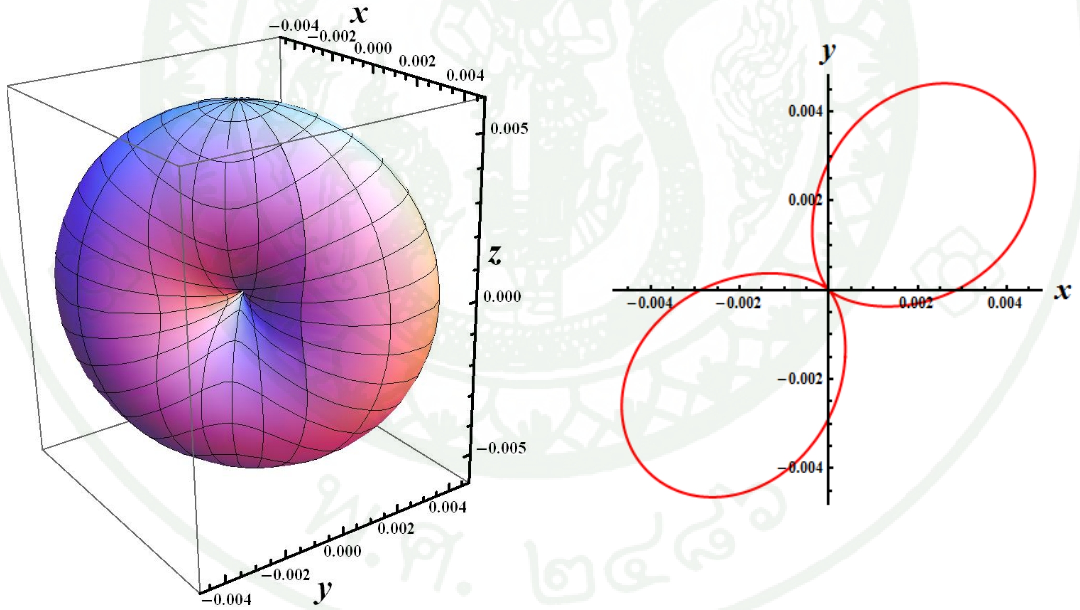
จากภาพที่ 9 เราจะพบว่าเมื่อความเครียดเปลี่ยนไปรูปแบบของเส้นพลังงานเฟอร์มีจะเปลี่ยนรูปแบบจากวงกลมไปเป็นวงรี เนื่องจากมีการยืดออกหรือหดเข้าของเส้นพลังงานเฟอร์มี ซึ่งลักษณะของการยืดออกหรือหดเข้าของเส้นพลังงานเฟอร์มีขึ้นอยู่กับความเครียดแบบต่างๆ คือสำหรับความเครียดแบบเฉือน (ภาพที่ 9ก) ยิ่งความเครียดเพิ่มมากขึ้นเส้นพลังงานเฟอร์มีด้านแกน y (เส้นสีแดง) ยิ่งยืดออกมากขึ้น แต่ด้านแกน x (เส้นสีน้ำเงิน) ยิ่งหดตัวมากขึ้น สำหรับความเครียดแบบเทนไซน์ไอ-โทปิก (ภาพที่ 9ก) ยิ่งความเครียดเพิ่มมากขึ้นเส้นพลังงานเฟอร์มีด้านแกน x (เส้นน้ำเงิน) และด้านแกน y (เส้นสีแดง) ยิ่งหดตัวมากขึ้น แต่ด้านแกน x (เส้นสีน้ำเงิน) จะยืดออกมากว่า สำหรับความเครียดแบบเก้าอีพับแขน (ภาพที่ 9ค) ยิ่งความเครียดเพิ่มมากขึ้นเส้นพลังงานเฟอร์มีด้านแกน y (เส้นแดง) ยิ่งยืดออกมากขึ้น และด้านแกน x (เส้นสีน้ำเงิน) ค่อยข้างคงที่ สำหรับความเครียดแบบซิกแซก (ภาพที่ 9ง) ยิ่งความเครียดเพิ่มมากขึ้นเส้นพลังงานเฟอร์มีด้านแกน x (เส้นน้ำเงิน) ยิ่งยืดออกมากขึ้น และด้านแกน y (เส้นสีแดง) ยิ่งหดตัวมากขึ้น

ผลกระทบต่อมา คือของแบบของการแผ่รังสีของแกรฟีน เราจะพิจารณารูปแบบของการแผ่รังสีของโฟตอนโดยใช้โปรแกรม Mathematica วาดกราฟการแผ่รังสีของโฟตอนในสมการที่ (116) สำหรับความเครียดแบบเฉือน (shear strain) ความเครียดแบบเทนไซล์ไอโซโทปิก (tensile isotropic strain) ความเครียดเก้าอี้พับแขน (Armchair uniaxial strain) และความเครียดแบบซิกแซก (Zixzag uniaxial strain) ว่ารูปแบบของการแผ่รังรังสีของโฟตอนแบบเกิดเองเป็นอย่างไร

รูปแบบการแผ่รังสีของโฟตอนในพิกัดทรงกลม สำหรับความเครียดในแบบต่างๆ เมื่อกำหนดให้มุมเริ่มต้นของเลขคลื่น k_c (wave number) ในแถบการนำอยู่ที่มุม $\phi_c = \pi / 4$ เรเดียน และความเครียด $\varepsilon = 0.2$ มีลักษณะ ดังภาพ

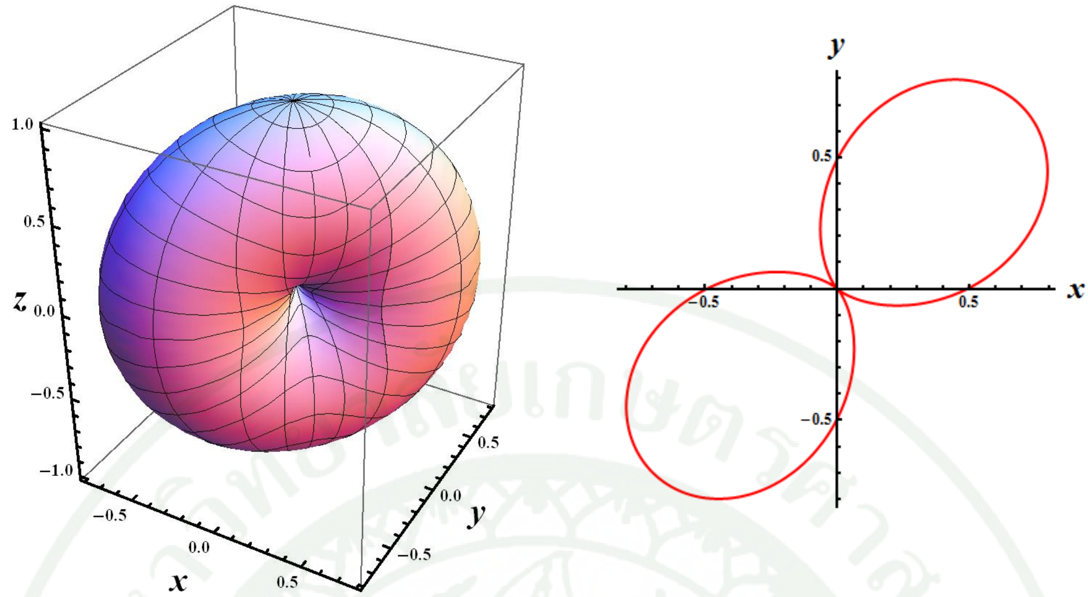


(ก) ความเครียดแบบเฉือน

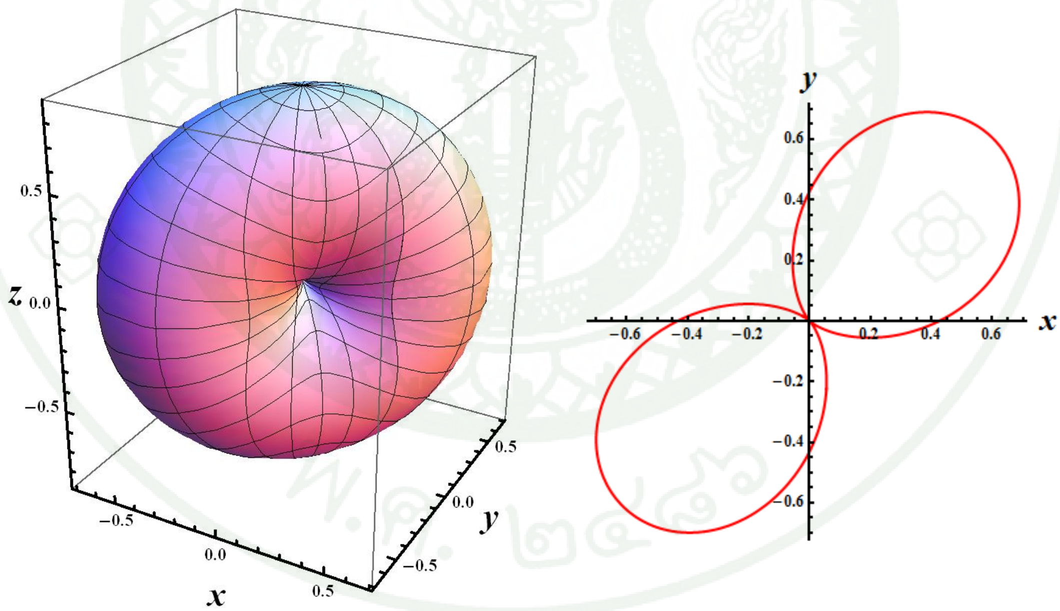


(ข) ความเครียดแบบเทนไซน์ไอโซโทปิก

ภาพที่ 10 รูปแบบการแผ่รังสีของโฟตอนในแกรฟีนขณะที่มีความเครียด ภาพซ้ายแสดงรูปแบบของการแผ่รังสีของโฟตอนในพิกัดทรงกลม และภาพขวาเป็นกราฟในพิกัดเชิงขั้วของการแผ่รังสีของโฟตอนในระนาบของแกรฟีน โดยกำหนดให้มุมของการแผ่รังสีของโฟตอนเป็น $\theta_\gamma = \pi/2$ และ $0 \le \phi_\gamma \le 2\pi$ และความเครียด $\varepsilon = 0.2$



(ค) ความเครียดแบบเก้าอี้พับแขน



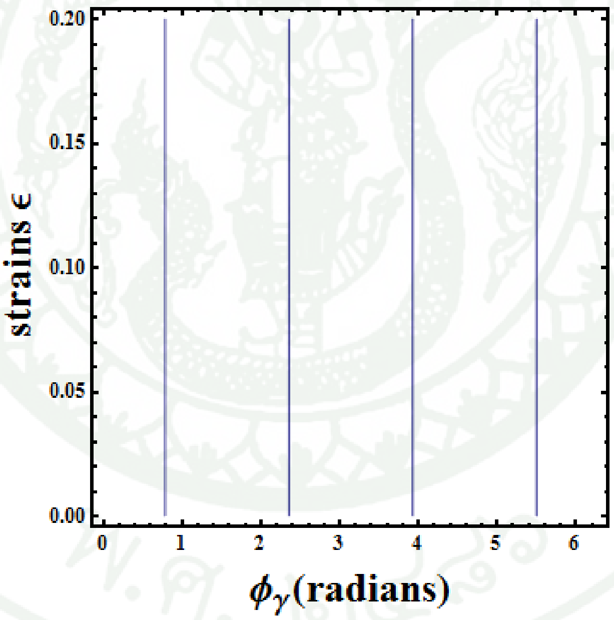
(ง) ความเครียดแบบซิกแซก

ภาพที่ 10 (ต่อ)

จากภาพที่ 10 จะเห็นว่ารูปแบบของการแผ่รังสีของโฟตอนในพิกัดทรงกลม (ภาพซ้าย) มีลักษณะคล้ายกันทั้งหมดสำหรับความเครียดในแบบต่างๆ คือมีลักษณะคล้ายกับโดนัดที่ตรงกลางบุ๋มลงไป แต่เมื่อดูภาพตัดขวางในระนาบของแกรฟีน (ภาพขวา) ที่ความเครียด $\varepsilon = 0.2$ จะพบว่าปริมาณของการแผ่รังสีของโฟตอนสำหรับความเครียดในแต่ละแบบแตกต่างกันออกไป คือปริมาณของการแผ่-รังสีของความเครียดแบบเทนไซน์ไอโซโทปิกจะมีปริมาณการแผ่รังสีน้อยที่สุด

1.1 มุมของการแผ่รังสีของโฟตอน

เมื่อนำเอาแอมพลิจูดของการแผ่รังสีของโฟตอนสมการที่ (117) ไปหาอนุพันธ์เทียบกับมุม ϕ_γ แล้วนำไปวาดกราฟเพื่อหามุมของการของการแผ่รังสีต่ำสุดและสูงสุดในระนาบของแกรฟีน โดยกำหนดให้ความเครียดอยู่ในช่วง $0 \le \varepsilon \le 0.2$ และมุมของการแผ่รังสีของโฟตอนในระนาบของแกรฟีนอยู่ในช่วง $0 \le \phi_\gamma \le 2\pi$ และ $\theta_\gamma = \pi/2$

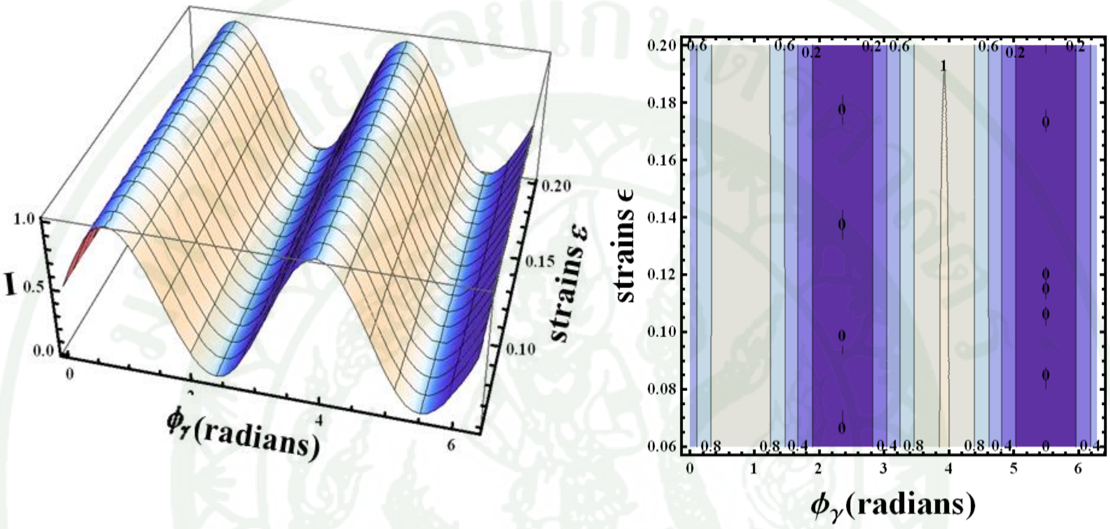


ภาพที่ 11 กราฟแสดงมุมของการแผ่รังสีสูงสุดและต่ำสุดของโฟตอน สำหรับความเครียดแบบต่างๆ

จากภาพที่ 11 จะพบว่ามุมของการแผ่รังสีสูงสุดและต่ำสุดสำหรับความเครียดแบบต่างๆ จะอยู่ที่มุมเดิมเสมอ ถึงแม้ว่าความเครียดจะเพิ่มขึ้นก็ตาม โดยที่มุมของการแผ่รังสีสูงสุดอยู่ที่มุม 0.79 เรเดียน กับ 3.93 เรเดียน (45 องศา กับ 225 องศา) และมุมของการแผ่รังสีต่ำสุดอยู่ที่มุม 2.36 เรเดียน กับ 5.50 เรเดียน (135 องศา กับ 315 องศา)

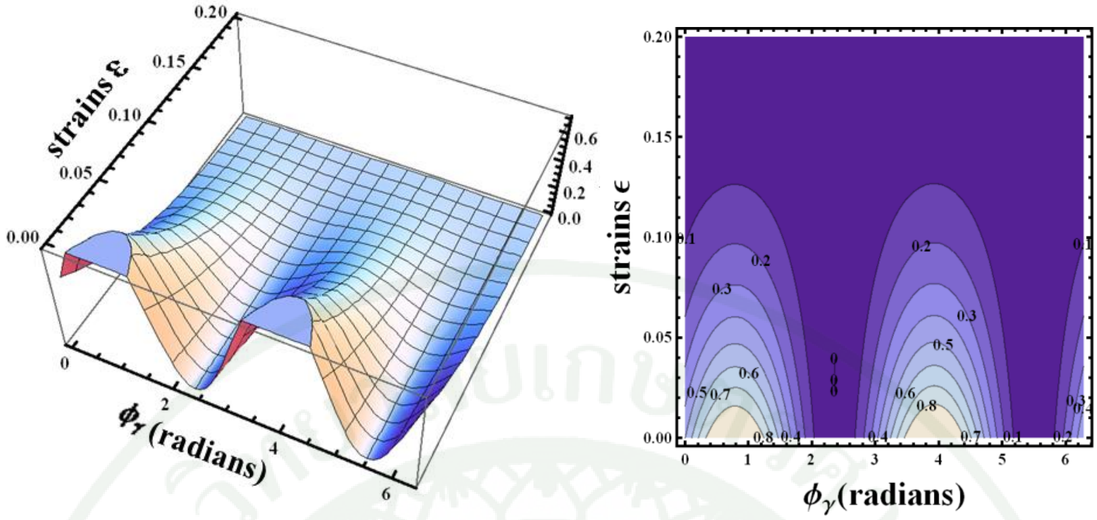
1.2 ความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนในระนาบของแกรฟีน (ระนาบ xy)

นำสมการการแผ่รังสีของโฟตอนในสมการที่ (117) มาวาดกราฟเพื่อดูความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนในระนาบของแกรฟีน โดยกำหนดให้ความเครียดอยู่ในช่วง $0 \le \varepsilon \le 0.2$ และมุมของการแผ่รังสีของโฟตอนในระนาบของแกรฟีนอยู่ในช่วง $0 \le \phi_\gamma \le 2\pi$ เรเดียน และ $\theta_\gamma = \pi / 2$ เรเดียน

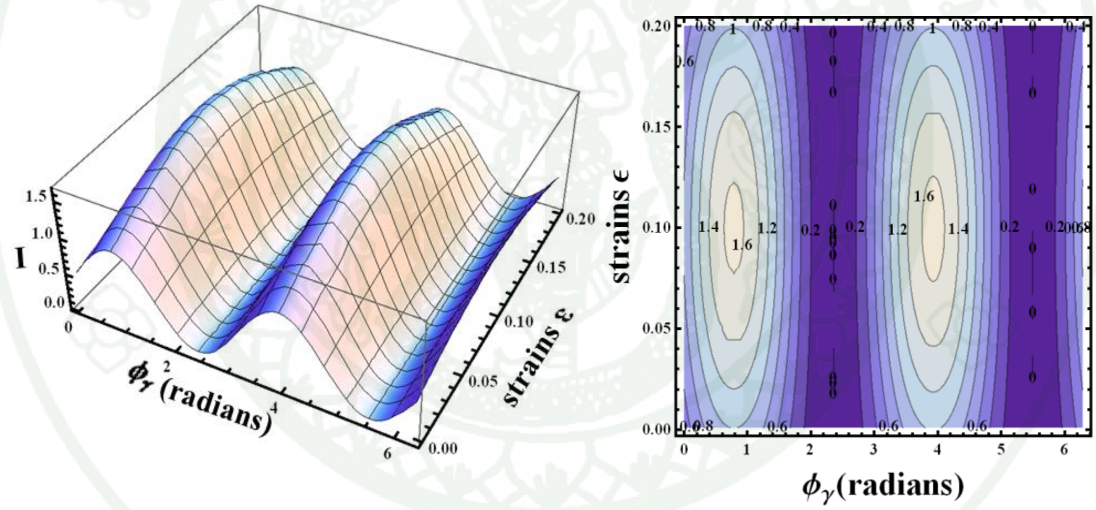


(ก) ความเครียดแบบเฉือน

ภาพที่ 12 กราฟแสดงสัมพันธ์ของมุมของการแผ่รังสีของโฟตอนขณะที่มีความเครียดอยู่ในช่วง $0 \le \varepsilon \le 0.2$ และความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนในระนาบของแกรฟีน โดยที่ภาพซ้ายแสดงกราฟแสดงความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนใน 3 มิติ และรูปขวาเป็นกราฟคอนทัวร์พล็อต (contour plot) ของความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอน

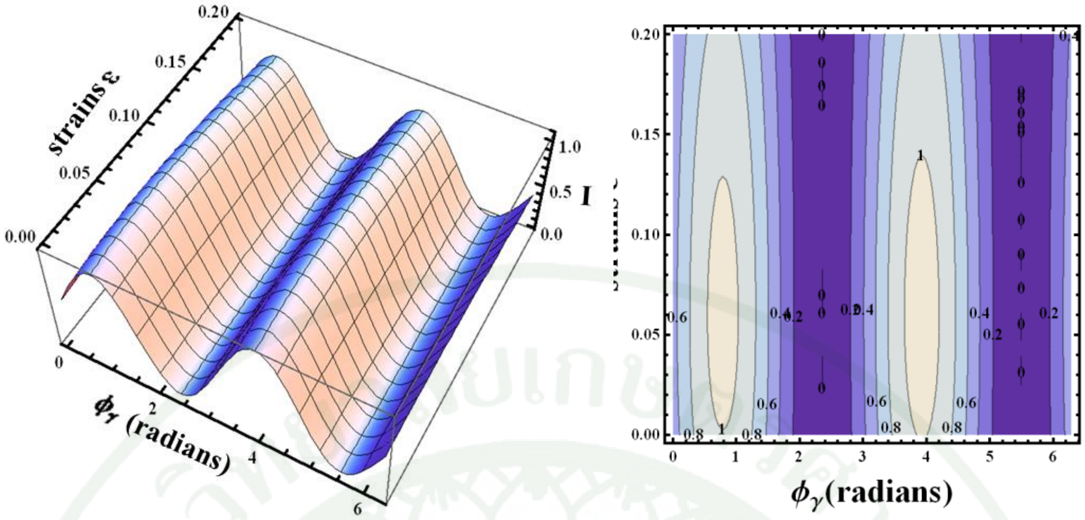


(ข) ความเครียดแบบเทนไซน์ไอโซโทปิก



(ค) ความเครียดแบบเก้าอีพับแขน

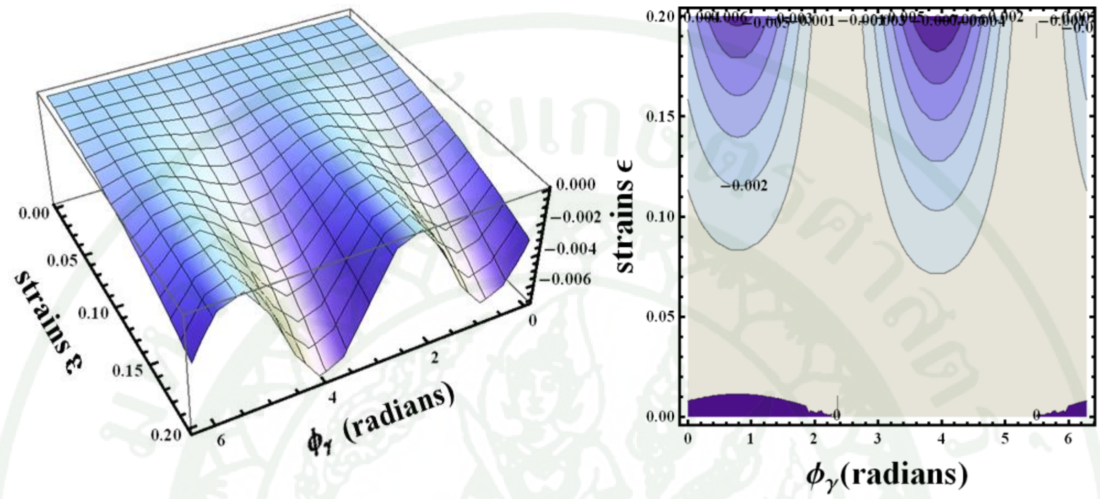
ภาพที่ 12 (ต่อ)



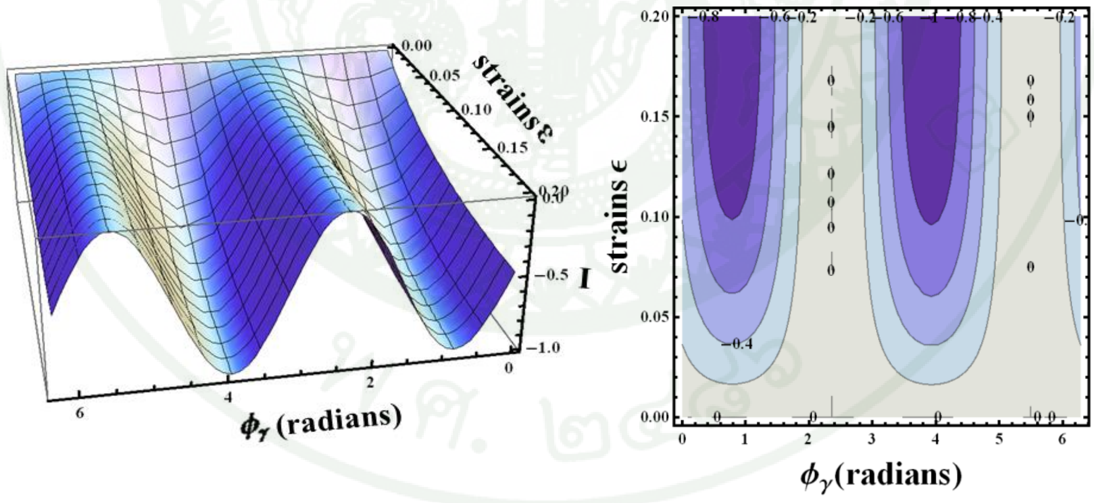
ภาพที่ 12 (ต่อ)

จากภาพที่ 12 เราจะพบว่ายิ่งความเครียดเพิ่มมากขึ้นความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนมีทั้งเพิ่มขึ้นและลดลงขึ้นอยู่กับความเครียดในแบบต่างๆ คือสำหรับความเครียดแบบเฉือน (ภาพที่ 12ก) และความเครียดแบบเทนไซน์ไอโซโทปิก (ภาพที่ 12ข) เราพบว่ายิ่งความเครียดเพิ่มมากขึ้นความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนยิ่งลดลงแต่ลดลง แต่สำหรับความเครียดแบบเฉือนความเข้มของการแผ่รังสีจะลดลงน้อยมาก สำหรับความเครียดแบบเก้าอี้พับแขน (ภาพที่ 12ค) เราพบว่ายิ่งความเครียดเพิ่มมากขึ้นความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนก็จะเพิ่มขึ้นด้วย และมีความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนมากที่สุดที่ความเครียดประมาณ 10% และสำหรับความเครียดแบบซิกแซก (ภาพที่ 12ง) เราพบว่ายิ่งความเครียดเพิ่มมากขึ้นความเข้มของการแผ้รังสีของโฟตอนมีทั้งเพิ่มขึ้นและลดลง คือความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนเพิ่มขึ้นในช่วงความเครียดประมาณ $0 \le \varepsilon \le 0.15$ และลดลงในช่วงความเครียดประมาณ $0.15 \le \varepsilon \le 0.20$

พิจารณากราฟของผลต่างของความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนในระนาบของแกรฟีน คือนำเอาความเข้มของการแผ่รังสีขณะที่มีความเครียดลบด้วยความเข้มของการแผ่รังสีขณะที่ไม่มีความเครียด ดังรูป

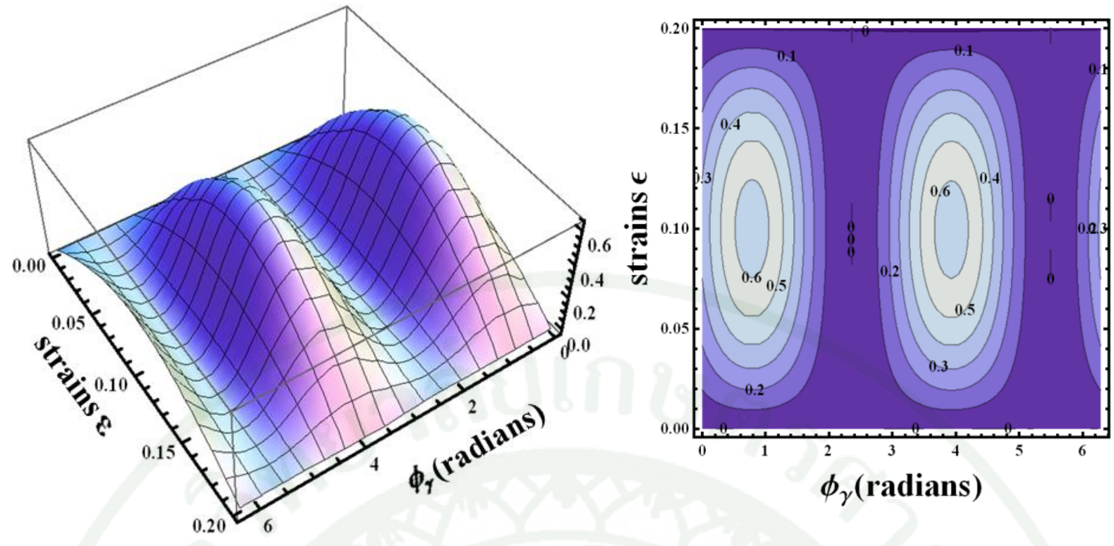


(ก) ความเครียดแบบเฉือน

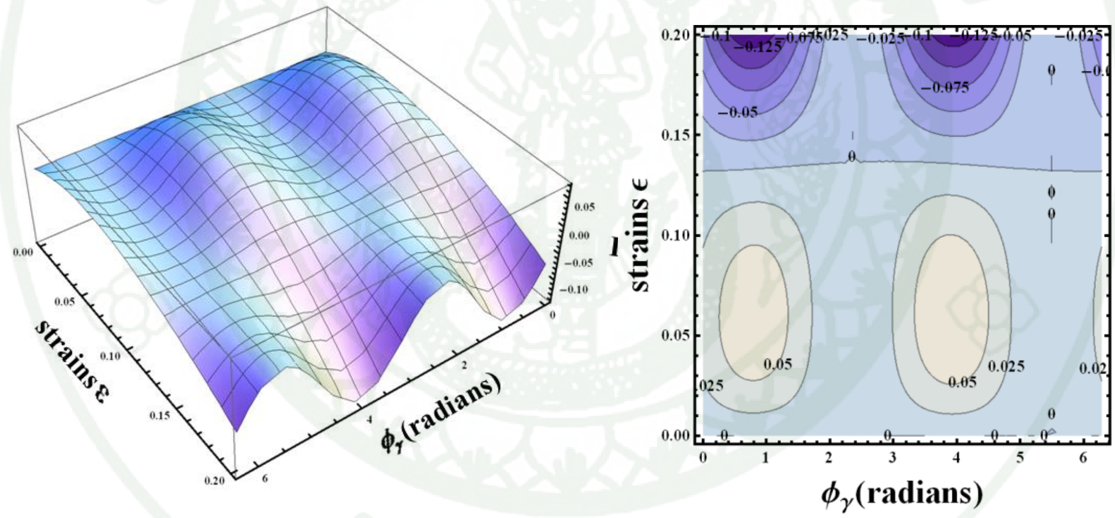


(ข) ความเครียดแบบเทนไซน์ไอโซโทปิก

ภาพที่ 13 กราฟแสดงผลต่างของความเข้มสัมพัทธ์ของการแผ่รังสีของโฟตอนขณะที่มีความเครียดลบกับความเข้มขณะที่ไม่มีความเครียด โดยที่รูปซ้ายเป็นกราฟผลต่างของความเข้มสัมพัทธ์ของการแผ่รังสีใน 3 มิติ และรูปขวาเป็นกราฟคอนทัวร์พล็อตของผลต่างของการแผ่รังสีของโฟตอนสำหรับความเครียดสำหรับความเครียดในช่วง $0 \le \varepsilon \le 0.2$



(ค) ความเครียดแบบเก้าอีพับแขน



(ง) ความเครียดแบบซิกแซก

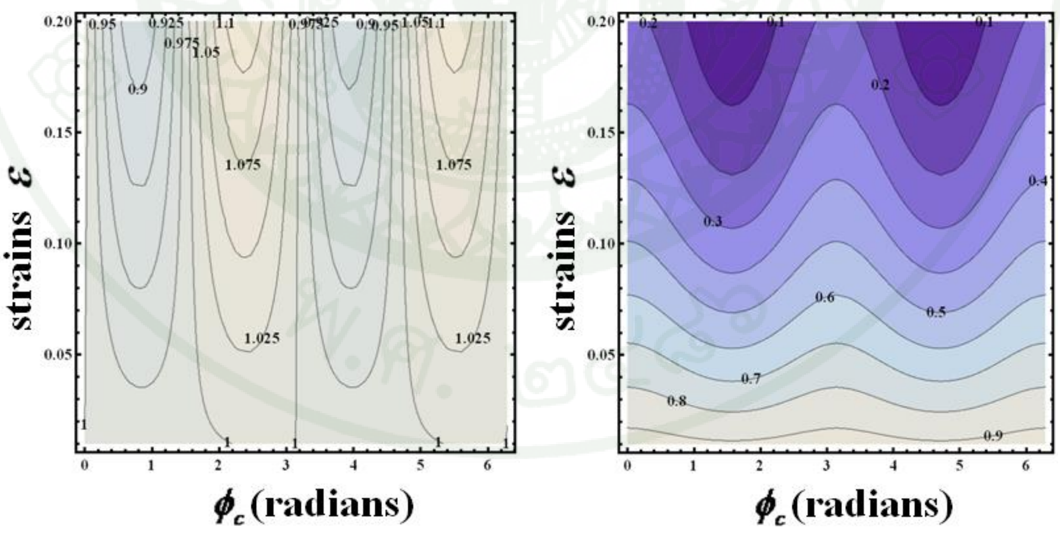
ภาพที่ 13 (ต่อ)

จากภาพที่ 13 เป็นภาพแสดงความสัมพันธ์ของความเข้มสัมพัทธ์ I เนื่องจากความเครียด ความแรงของความเครียด และมุม ϕ_γ เป็นมุมเป็นมุมของเวกเตอร์คลื่น k_γ ของโฟตอน โดยที่เริ่มต้นการคำนวณในสมการที่ (40) เรากำหนดให้ $n_c = 1$ และ $n_v = 0$ กระบวนการนี้สอดคล้องกับรูปแบบของการแผ่รังสีของโฟตอนที่เริ่มต้นอิเล็กตรอนเคลื่อนที่ไปตามทิศทางของเวกเตอร์คลื่น k_c และกำหนดให้มุมอิเล็กตรอนที่แถบการนำเท่ากับ $\phi_c = \pi / 4$ เรเดียน ซึ่งจากภาพที่ 14 เราจะเห็นว่ายิ่ง

ความเครียดเพิ่มมากขึ้นความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนขณะที่มีความเครียดมีทั้งเพิ่มขึ้นและลดลงเมื่อเทียบกับขณะที่ไม่มีความเครียด คือสำหรับความเครียดแบบเฉือน (ภาพที่13ก) และความ-เครียดแบบเทนไซน์ไอโซโทปิก (ภาพที่ 13ข) จะมีความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนขณะที่มีความเครียดจะน้อยกว่าขณะที่ไม่มีความเครียดมากขึ้นเมื่อความเครียดเพิ่มมากขึ้น สำหรับความ-เครียดแบบเก้าอีพับแขน (ภาพที่ 13ค) เราพบว่ายิ่งความเครียดเพิ่มขึ้นจะมีความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนในขณะที่มีความเครียดมากกว่าขณะที่ไม่มีความเครียดและมากที่สุดที่ความเครียดประมาณ 10% และสำหรับความเครียดแบบซิกแซก (ภาพที่13ง) เราจะเห็นว่าผลต่างของความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนขณะที่มีความเครียดมากกว่าขณะที่ไม่มีความเครียดในช่วงความเครียดประมาณ $0 \le \varepsilon \le 0.15$ และน้อยกว่าขณะที่ไม่มีความเครียดในช่วงความเครียดประมาณ $0.15 \le \varepsilon \le 0.20$

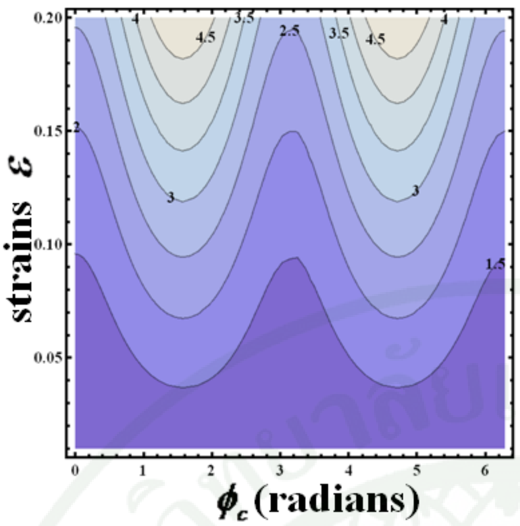
ผลรวมของขนาดของเวกเตอร์คลื่นของโฟตอน K_s เป็นตัวที่บ่งบอกว่าความเข้มสัมพัทธ์ของการแผ่รังสีของโฟตอนจะมีค่ามากหรือน้อย ดังรูป

$$K_s = \sum_{i=1,\,2} \left| k_\gamma^{(i)} \right|^2 \tag{122}$$

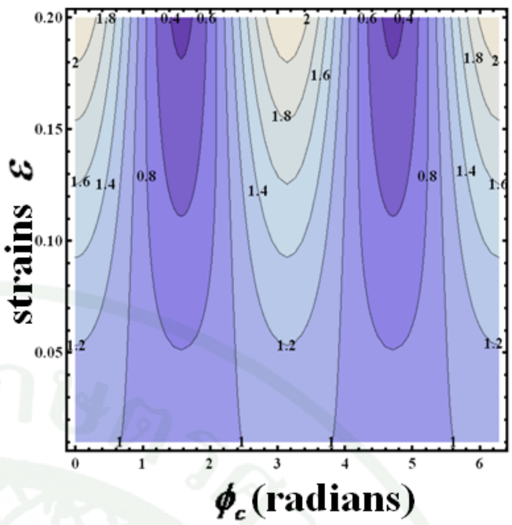


(ก) ความเครียดแบบเฉือน (ข) ความเครียดแบบแทนไซน์ไอโซโทปิก

ภาพที่ 14 กราฟคอนทัวร์พล็อต (contour plot) ของผลรวมของขนาดของเวกเตอร์คลื่น k_γ ในระนาบของแกรฟีนที่เปลี่ยนไปตามทิศทางของเวกเตอร์คลื่น $\mathbf{k}_c$ และความเครียด ε



(ค) ความเครียดแบบเก้าอี้พับแขน



(ง) ความเครียดแบบซิกแซก

ภาพที่ 13 (ต่อ)

จากกราฟคอนทัวร์พล็อต (contour plot) ในภาพที่ 14 เราพบว่าของผลรวมของ $\left|k_{\gamma}^{(i)}\right|^2$ เมื่อ $k_{\gamma}^{(i)}$ สอดคล้องกับเงื่อนไขของการอนุรักษ์พลังงานในสมการที่ (114) และการอนุรักษ์โมเมนตัม ในสมการที่ (115) เมื่อไม่มีความเครียด $\varepsilon = 0$ ขนาดของเวกเตอร์คลื่นของโฟตอน K_s มีแนวโน้มที่คงที่ตลอดช่วงของมุม $\phi_c = [-\pi, \pi]$ สำหรับความเครียดแบบเฉือน (ภาพที่ 14ก) ความเครียดแบบเก้าอี้พับแขน (รูปที่ 14ค) และความเครียดแบบซิกแซก (ภาพที่ 14ง) พบว่ายิ่งความเครียดเพิ่มขึ้นผลรามของขนาดของเวกเตอร์คลื่น K_s จะเพิ่มขึ้น แต่ความเครียดแบบเก้าอี้พับแขนผลรามของขนาดของเวกเตอร์คลื่น K_s จะเพิ่มขึ้นมากที่สุด และสำหรับความเครียดแบบเทนไซน์ไอโซ-โทปิก (ภาพที่ 15ข) จะมีผลรามของขนาดของเวกเตอร์คลื่น K_s ลดลงเมื่อความเครียดเพิ่มขึ้น

สรุปผล

ในงานวิจัยนี้ เราจะพิจารณาการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนที่กระโดดจากสับแลตทีชหนึ่งไปยังอีกสับแลตทีชหนึ่งที่อยู่รอบๆ ตัวมันซึ่งเป็นสับแลตทีชที่ต่างกันในระนาบของแกรฟีนที่ถูกดึงหรือบีบอัดเนื่องจากความเครียดอย่างช้าๆ โดยที่อิเล็กตรอนอยู่ที่ระดับพลังงานต่ำๆ หรือที่บริเวณรอบๆ จุดดิแรค (Dirac point) การเปลี่ยนตำแหน่งของแลตทีชในแกรฟีนเนื่องจากความเครียดเป็นผลทำให้พลังงานของการกระโดดของอิเล็กตรอน (the hopping energy) เปลี่ยนไปจากขณะที่ไม่มีความเครียด ในงานวิจัยของเรานี้จะใช้สมการเวลย์-ดิแรค (Wely-Dirac equation) ในการอธิบายแกรฟีนที่ตำแหน่งของแลตทีซเปลี่ยนแปลงไปจากเดิมเนื่องจากความเครียด ซึ่งสมการเวล์ดิแรคอธิบายโดยพารามิเตอร์สี่ตัวที่อยู่ในความเร็วทั้งสอง คือ v_i^x กับ v_i^y เมื่อ $i=1, 2$ ซึ่งขึ้นอยู่กับสเทรนเทนเซอร์ (strain tenser) ε เมื่อความเครียดอยู่ในช่วง $0 \le \varepsilon \le 0.2$ ซึ่งผลกระทบที่เกิดจากความเครียด คือเส้นพลังงานเฟอร์มี (Fermi line) เปลี่ยนจากวงกลมไปเป็นวงรี และความเข้มสัมพัทธ์ของการแผ่รังสีของโฟตอนอาจจะเพิ่มขึ้นหรือลดลดขึ้นอยู่กับความเครียดในแต่ละแบบ

เอกสารและสิ่งอ้างอิง

Novoselov , K.S., A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, A. A. Firsov, and I. V. Grigorieva. 2004. Electric field effect in atomically thin carbon films. **Science.** 306: 666.

Novoselov , K. S., D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov and A. K. Geim. 2005. Two-dimensional atomic crystals. **Proc. Natl. Acad. Sci. USA.** 102:10451.

Beenakker , C.W. J. 2008. Andreev reflection and Klein tunneling in grapheme. **Rev. Mod. Phys.** 80: 1337.

Cheianov ,V. V. 2007. The focusing of electron flow and a veselago lens in graphene p-n junctions. **Science.** 315: 1252.

Kitt, A.L., M. Pereira, K. Swan and B. Goldberg. 2012. Lattice-corrected strain-induced vector potentials in grapheme. **Phys. *Rev. B*** 85: 115432.

Bonaccorso, F. Z., Sun, T. Hasan and A. C. Ferrari. 2010. Graphene photonics and optoelectronics. **Nature Photon.** 4: 611.

Castro Neto, A.H., F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim. 2009. The electronic properties of grapheme. **Rev. Mod. Phys**. 81: 109.

Mak, K.F., Y. Sfeir, Y. Wu, C.H. Lui, A. Misewich, and F. Heinz. 2008. Measurement of the Optical Conductivity of Graphene. **Phys. Rev. Lett**. 101: 196405.

Choi, S., S. Jhi and Y. Son, 2010. Effects of strain on electronic properties of grapheme. **Phys. Rev. B**. 81: 081407.

Pereira, V. and A. H. Castro Neto. 2009. Tight-binding approach to uniaxial strain in grapheme. **Phys. Rev. B.** 80: 045401.

Mecklenburg, M., J. Woo and B.C. Reganl. 2010. Tree-level electron-photon interactions in grapheme. **Phys. Rev. B**. 81: 245401.

Lewkowicz, M., H.C. Kao and B. Rosenstein. 2011. Signature of the Schwinger pair creation rate via radiation generated in grapheme by a strong electric current. **Phys. Rev. B**. 84: 035414.

Schwinger, J. 1951. On Gauge Invariance and Vacuum Polarization. **Phys. Rev**. 82: 664.

Hasegawa, Y., R. Konno, H. Nakano and M. Kohmoto. 2006. Zero modes of tight-binding electrons on the honeycomb lattice. **Phys. Rev.B.** 74: 033413.

Chang, Y., T. Albash and S. Haas. 2012. Quantum Hall states in graphene from strain-induced nonuniform magnetic fields. **Phys. Rev. B.** 86: 125402.

Goerbig, M., J.N. Fuchs, G. Montambaux and F. Piéchon. 2008. Tilted anisotropic Dirac cones in quinoid-type graphene and a-(BEDT-TTF) 2I3. **Phys. Rev. B**. 78: 045415.

ประวัติการศึกษาและการทำงาน

ชื่อ นางสาวพันธุ์ทิพย์ ฟื่นบ้านไร่

เกิดวันที่ 28 สิงหาคม 2531

สถานที่เกิด อำเภอตรอน จังหวัดอุตรดิตถ์

ประวัติการศึกษา วท.บ. (ฟิสิกส์) มหาวิทยาลัยนเรศวร

ตำแหน่งปัจจุบัน -

สถานที่ทำงานปัจจุบัน -

ผลงานดีเด่นและ/หรือรางวัลทางวิชาการ -

ทุนการศึกษาที่ได้รับ -