

学校代码：10730

分类号：

密级：

# 兰州大学

## 博士 学位 论 文 (学术学位)

论文题目 (中文) 石墨烯中与波函数相关的量子输运  
及多体效应研究

论文题目 (外文) Wavefunction-Related Quantum Transport and  
Many-Body Effects in Graphene

作者姓名 \_\_\_\_\_

学科专业 物理学·理论物理

研究方向 量子输运理论

教育类型 学历教育

指导老师 \_\_\_\_\_

合作导师 \_\_\_\_\_

论文工作时段 2016年9月至2023年6月

答辩日期 \_\_\_\_\_



# 石墨烯中与波函数相关的量子输运及多体效应研究

## 中文摘要

波函数是量子力学中最重要的基本概念之一，其丰富的物理内涵在量子混沌、量子输运等领域被广泛的探讨。石墨烯因其室温下的高迁移率以及其低能下准粒子可由无质量狄拉克方程描述的性质，近二十年来一直是实验和理论物理关注的焦点之一。因此探测和研究石墨烯中的波函数性质具有重要的意义。扫描门显微镜技术是对输运器件中局域电子态密度观测的常见手段之一，近年来也被广泛的应用在石墨烯相关的研究中，为了解决实验中可能遇到的参数和几何特征的多样性，需要开发一种扫描门显微镜对电导响应的理论方法。相对论性的量子疤痕态可以在石墨烯系统中观测到，但是对相对论性的磁性疤痕态的研究还是一个开放问题，因此探究石墨烯中的磁性疤痕态及其输运特征很有价值。量子混沌领域的绝大多数工作都集中在单粒子非相对论体系，研究多体相互作用、相对论性量子力学和经典动力学三者之间的关系很有意义。在本论文中，我们主要从理论和数值上研究了与石墨烯中波函数相关的扫描门显微镜技术、磁性输运和多体能谱统计。

在第一章绪论中，我们主要对本论文相关的背景知识和基本概念做了简单的介绍。最后，我们给出了本论文的研究目的和研究内容。

第二章介绍了本论文主要的研究对象——石墨烯，着重分析了石墨烯及石墨烯条带的电学性质，并介绍了石墨烯弹球和石墨烯量子点。我们从石墨烯的蜂窝状晶格结构出发，介绍了该类晶格在低能近似下的无质量狄拉克方程的由来。随后，我们介绍了量子输运研究中常用的石墨烯纳米带，分析了由于锯齿形和扶手椅形两种不同边界导致的不同色散关系及波函数。此外，我们对量子混沌研究中的石墨烯弹球模型以及量子输运中的石墨烯量子点也进行了介绍。

第三章以扶手椅形石墨烯为例，推导了石墨烯中的输运理论，并介绍了本论文所用的数值计算方法。我们利用石墨烯条带的本征波函数，构建了石墨烯的导线态及其离散形式，随后利用导线态构建输运器件中的散射态，并通过石墨烯中的 Fisher-Lee 关系得到了石墨烯量子输运的 Landauer 公式。此外，我们也介绍了用于量子输运计算的格林函数方法以及现在普遍被使用的开源软件 Kwant。

第四章系统的研究了在扫描门显微镜探针作用下石墨烯纳米带和收缩结构

的电导修正。我们利用散射理论得到了非侵入探针引起的一阶和二阶电导修正的解析表达式。数值计算很好的符合了理论推导，结果表明二阶项在石墨烯纳米条带的电导平台中占主导地位，并且扶手椅形石墨烯条带能对不同宽度和强度的探针进行标度。在侵入探针机制下，在超出微扰范围的特定电势宽度和强度下，发现了被探针捕获的态的电导共振现象。对于石墨烯收缩结构，一阶电导修正通常在低探针强度下处于主导地位，而对于与微弱电导平台相关的费米能量，二阶电导修正在相对小范围的探针强度下占主导地位。由于部分局域态密度的空间依赖性，最大的探针效应会发生在收缩结构中心靠近边缘的部分。锯齿形边缘的石墨烯纳米条带和收缩结构具有类似的响应，除非由探针引起的谷间耦合破坏了手性边界态。

第五章探讨了多边形石墨烯量子点在小磁场下的输运特征。通过计算不同的多边形石墨烯量子点关于费米能和垂直于平面磁场的电导图，发现了石墨烯量子点中与形状有关的两种类型的电导等高线。结合半经典理论，我们给出了这两种类型的电导等高线出现的条件，并对其进行了数值验证。同时我们也发现电导等高线及其上的局域态密度都能在弱杂质上保持稳定。特别的，我们还推导出了器件大小、磁场范围和费米能范围三者之间的标度关系，结合费米能和背栅压的关系，为数值模拟实验结果提供了理论依据。此外，与电导等高线相关的结果也得到了实验数据的支持。

第六章对石墨烯弹球中的多体能谱统计进行了研究。利用单轨道平均场 Hubbard 模型处理电子-电子相互作用，计算了无相互作用下经典动力学分别为可积和混沌的扇形石墨烯弹球的本征值和本征态，并研究了其能谱统计随 Hubbard 相互作用强度的关系。我们发现电子-电子相互作用对狄拉克点附近的能谱统计具有显著影响。特别是，无论不加相互作用时系统的能谱统计类型如何，将相互作用强度提高到临界值时都会导致其能谱统计接近高斯正交系综（完全混沌系统）。然而当相互作用增加到超过临界值时，能谱统计开始偏向泊松统计（可积系统）。此外，我们还发现，高于和低于狄拉克点的能级可以表现出不同的能谱统计，而多体相互作用对于远离狄拉克点的能级几乎没有影响。

我们在最后一章对本论文进行了总结，并给出展望。

**关键词：**石墨烯，扫描门显微镜，磁性输运，多体能谱统计

# **Wavefunction-Related Quantum Transport and Many-Body Effects in Graphene**

## **Abstract**

The wave function is one of the most important basic concepts in quantum mechanics, and its rich physical implications are widely explored in the fields of quantum chaos and quantum transport. Graphene has been a focus of experimental and theoretical physics for nearly two decades due to its high mobility at room temperature and the properties of its quasi-particles, which can be described by the massless Dirac equation at low energies. Therefore, detecting and studying the properties of wave functions in graphene is of great significance. Scanning gate microscopy is one of the common techniques for observing the local electron density of states in transport devices and has been widely used in graphene-related research in recent years. To address the diversity of parameters and geometrical features that may be encountered in experiments, a theoretical method for the conductance response of scanning gate microscopy needs to be developed. Relativistic quantum scars can be observed in the graphene systems, but the study of relativistic magnetic scars in graphene is still an open problem, making the investigation of their transport characteristics valuable. Most of the work in the field of quantum chaos has focused on single-particle non-relativistic systems, and studying the relationship between many-body interaction, relativistic quantum mechanics, and classical dynamics is meaningful. In this thesis, we primarily examine scanning gate microscopy, magnetic transport, and many-body spectral statistics related to wave functions in graphene from theoretical and numerical viewpoints.

In the first chapter of introduction, we mainly provide a brief introduction to the background knowledge and fundamental concepts relevant to this thesis. Finally, we present the research objectives and contents of this thesis.

The second chapter introduces the main research subject of this thesis—graphene, focuses on the analysis of the electronic properties of graphene and graphene nanoribbons, and discusses graphene quantum dots and graphene billiards. We introduce the

genesis of the massless Dirac equation under the low-energy approximation starting from the honeycomb lattice structure of graphene. Then, we introduce graphene nanoribbons that are frequently used in transport study and examine the various band structures and wave functions brought on by the zigzag and armchair boundaries. In addition, we present graphene quantum dots for quantum transport and graphene billiards models for quantum chaos research.

In the third chapter, taking the armchair graphene as an example, we derive the transport theory in graphene and introduce the numerical calculation methods used in this thesis. We use the eigenfunctions of graphene nanoribbons to construct the lead states and their discrete forms, and then use the lead states to construct the scattering states in the transport devices. By using the Fisher-Lee relationship in graphene, we obtain the Landauer formula for quantum transport in graphene. Furthermore, we also introduce the Green's function method for quantum transport calculations and the open-source software Kwant that is commonly used nowadays.

In chapter 4, the conductance correction in graphene nanoribbons and nanoconstrictions under the effect of scanning gate microscopy tip is systematically studied. We derive analytical formulas for the first- and second-order conductance corrections brought on by non-intrusive probes using a scattering approach. The numerical computation closely follows the theoretical derivation, demonstrating the second-order term prevails in the conductance plateaus dominance, exhibiting a universal scaling law for armchair graphene strips. For stronger tips, conductance correction shows resonance phenomena coming from the state captured by the tip at specific potential widths and strengths outside the perturbation range. For nanoconstrictions defined on a strip, scanning gate microscopy allows to get insight into the breakdown of conductance quantization. The first-order correction generically dominates at low tip strength, while for Fermi energies associated with faint conductance plateaus, the second-order correction becomes dominant for relatively small potential tip strengths. In accordance with the spatial dependence of the partial local density of states, the largest tip-effect occurs in the central part of the constriction, close to the edges. Nanoribbons and nanoconstrictions with zigzag edges exhibit a similar response than in the case of armchair nanostructures, except when the intervalley coupling induced by the tip potential destroys the chiral edge states.

In chapter 5, the transport signatures of polygonal graphene quantum dots at low

field are investigated. By calculating the conductance maps with respect to the Fermi energy and the perpendicular magnetic field for different polygonal shapes of graphene quantum dots, two types of conductance contour lines depending on the shape of the graphene quantum dot are discovered. Combining with the semiclassical theory, we give the conditions for the appearance of these two types of conductance contour lines and verify them numerically. Meanwhile, we also find that the conductance contour lines, and the corresponding local density of states can remain stable under weak disorder. We derive the scaling relations among the device size, the magnetic field range and the Fermi energy range, and provide a theoretical basis for the numerical simulation results by combining with the relationship between Fermi energy and back gate voltage. Additionally, the results related to the conductance contour lines are experimentally supported.

In chapter 6, the many-body spectral statistics in graphene billiards are studied. We use the single-orbital mean-field Hubbard model to treat the electron-electron interactions and study the relationship between energy spectral statistics and Hubbard interaction strength by selecting two circular sector graphene billiards with classical dynamics integrable and chaotic in the absence of interaction. We find that, for energies near the Dirac point, the Hubbard interactions have a significant effect on the spectral statistics. Regardless of the type of spectral statistics to begin with, increasing the Hubbard interaction strength up to a critical value causes the statistics to approach Gaussian Orthogonal Ensemble (full chaotic system). As the interaction strength increases beyond the critical value, the statistics evolve toward Poisson (integrable system). We also find that the energy levels above and below the Dirac point can exhibit different statistics, and the many-body interactions have little effect on the statistics for levels far from the Dirac point.

We summarize this thesis in the final chapter and give an outlook.

**Key words:** Graphene, Scanning gate microscopy, magnetic transport, many-body spectral statistics



# 目 录

中文摘要 .....	I
<b>Abstract .....</b>	<b>III</b>
<b>第一章 绪论 .....</b>	<b>1</b>
1.1 石墨烯中的波函数 .....	1
1.2 石墨烯中局域态密度的探测 .....	3
1.3 石墨烯中指针态与磁性输运 .....	6
1.4 石墨烯中波函数与多体能谱统计 .....	9
1.5 论文的研究目的和研究内容 .....	11
<b>第二章 石墨烯简介 .....</b>	<b>13</b>
2.1 石墨烯的电子性质 .....	13
2.1.1 石墨烯格点 .....	13
2.1.2 石墨烯色散关系: 紧束缚模型 .....	15
2.1.3 低能近似: 狄拉克费米子 .....	18
2.2 石墨烯纳米带 .....	19
2.2.1 锯齿形石墨烯纳米条带 .....	19
2.2.2 扶手椅形石墨烯纳米条带 .....	20
2.3 石墨烯量子子弹球和石墨烯量子点 .....	22
<b>第三章 石墨烯中的输运理论 .....</b>	<b>25</b>
3.1 完美扶手椅形石墨烯纳米条带中的电子态 .....	25
3.1.1 哈密顿量和本征波函数 .....	25
3.1.2 导线态 .....	26
3.1.3 导线态的离散表示 .....	29
3.2 散射矩阵求解电导 .....	32
3.2.1 散射态 .....	33

3.2.2	石墨烯中的 Fisher-Lee 关系 .....	33
3.2.3	散射态的流 .....	35
3.2.4	电导 .....	35
3.3	求解量子输运的数值方法 .....	37
3.3.1	格林函数方法 .....	37
3.3.2	简介 Kwant 和 Pybinding .....	41
<b>第四章</b>	<b>石墨烯中扫描门显微镜的理论和数值研究 .....</b>	<b>43</b>
4.1	简介 .....	43
4.2	石墨烯纳米结构中的电子输运 .....	44
4.2.1	没有 SGM 探针的情况 .....	45
4.2.2	石墨烯纳米结构中的 SGM .....	50
4.3	非侵入探针的扰动方法 .....	52
4.3.1	扰动方法: 一阶修正 .....	52
4.3.2	扰动方法: 二阶修正 .....	54
4.4	结果 .....	57
4.4.1	金属性扶手椅石墨烯条带中的 SGM 响应 .....	57
4.4.2	石墨烯纳米收缩结构中的 SGM 响应 .....	64
4.4.3	锯齿形边界 .....	68
4.5	讨论和结论 .....	74
<b>第五章</b>	<b>石墨烯量子点在小磁场下的输运特征 .....</b>	<b>77</b>
5.1	简介 .....	77
5.2	模型和方法 .....	79
5.2.1	具有 Peierls 替换的紧束缚哈密顿量 .....	79
5.2.2	方形石墨烯量子点 .....	80
5.3	结果 .....	80
5.3.1	直线的和抛物线状的电导等高线 .....	81
5.3.2	杂质对于电导等高线以及指针态的影响 .....	89
5.3.3	量子点大小、磁场强度以及费米能三者间的标度关系 .....	93
5.3.4	实验验证 .....	96
5.4	讨论和结论 .....	100

<b>第六章 石墨烯弹球中的多体能谱统计</b>	<b>103</b>
6.1 简介	103
6.2 多体哈密顿量和求解方法	106
6.2.1 平均场 Hubbard 哈密顿量	106
6.2.2 圆形扇区石墨烯弹球	107
6.2.3 局域系统中的能谱统计	108
6.3 结果	109
6.3.1 不同能量范围和自旋的能谱统计	109
6.3.2 60°AA 石墨烯弹球的能谱统计	111
6.3.3 15°ZM 石墨烯弹球的能谱统计	115
6.4 对多体谱统计的启发式理解	119
6.5 讨论与结论	122
<b>第七章 总结与展望</b>	<b>125</b>
7.1 总结	125
7.2 展望	127
<b>附录 A 石墨烯纳米条带中的波函数</b>	<b>129</b>
A.1 锯齿形石墨烯纳米条带	129
A.2 扶手椅形石墨烯纳米带	131
<b>附录 B 能量积分的求解</b>	<b>133</b>
B.1 石墨烯 Fisher-Lee 关系中的积分	133
B.2 扰动方法中的积分	136
B.3 零横向能量模式的 SGM 响应	138
<b>附录 C 横向部分的加和</b>	<b>139</b>
<b>参考文献</b>	<b>141</b>
<b>在学期间的研究成果</b>	<b>163</b>



# 第一章 绪论

## 1.1 石墨烯中的波函数

从农耕时代的刀耕火种到工业时代的机器轰鸣，对传统碳材料的利用推动了人类历史的不断更迭，而对新形式碳的发现和研究也在推动着现代科技的巨大进步，如 Robert F. Curl Jr.、Sir Harold W. Kroto 以及 Richard E. Smalley 因为发现富勒烯分享了 1996 年的诺贝尔化学奖，Andre Geim 和 Konstantin Novoselov 因关于二维材料石墨烯的开创性实验而获得 2010 年的诺贝尔物理学奖。

在石墨烯被制备出来之前，人们对于碳材料的研究已经有十分悠久的历史。P. R. Wallace 在 1946 的工作是最早对石墨烯的能带结构的研究之一。Wallace 正确识别了具有两个非等价碳原子晶格的石墨烯层结构，描述并求解了石墨烯的紧束缚模型。Wallace 证明了石墨烯的导带和价带在布里渊区的两个非等效点处相接触，因此石墨烯是一种具有不寻常的线性色散关系的半金属材料。这种行为与狄拉克和外尔方程描述的无质量相对论粒子的色散关系非常相似 [1, 2]，由此将石墨烯中的电子被称为狄拉克费米子。大约过了 60 年，人们才能够直接探测石墨烯中的狄拉克费米子 [3]。Semenoff [4] 和 Haldane [5] 通过将石墨烯与 (2 + 1) 维量子电动力学 (Quantum Electrodynamics, QED) 进行类比，进一步探讨了石墨烯和相对论效应之间的对应。

单层石墨—石墨烯，在 1962 年就已经被 Boehm 等人 [6] 观测到。Boehm 获得了还原氧化石墨的薄石墨碎片，将其中的一些鉴定为石墨烯（后来在 1986 年引入了单层石墨烯的名称 [7]）。在 1999 年，Ruoff 等人 [8] 发展出了一种利用原子力显微镜探针对石墨结构进行操纵的“机械剥离”的方法。由于连续层之间的范德华力较弱，碳层可以分层。在 2004 年，Geim 小组使用透明胶带实现了机械剥离方法 [9]。剥离样品的特点是载流子迁移率高，超过  $10,000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 。高迁移率对于观察亚微米尺度上的弹道传输至关重要。实验结果还表明，即使在电荷载流子的浓度趋于零的情况下，石墨烯的电导率也不会低于对应单位量子电导的最小值 [9, 10]，这是因为最小电导率是狄拉克方程描述的电子系统的固有属性。Geim 组的实验中 [9] 最令人惊讶的或许不是观察和分离出了石墨烯，而是测量了石墨烯的高电导率 [11]，这意味着即使暴露在空气中，碳原子组成的平面也能保持连续和导电。

从基本物理的角度看，石墨烯中载流子的相对论性特征也十分的有趣。接近

费米能级的电子像光子一样移动，没有静止质量，速度比光速小 300 倍 [12]。因此，人们可以借此探测固体中的电动力学现象。相对论性粒子的特征效应之一是 Klein 隧穿 [13, 14]，即相对论粒子在某些情况下有 100% 的概率可以穿过高势垒的现象。这是因为电子的势垒对于空穴来说是势阱，因此导致了空穴的束缚态，使得电子和空穴波函数的匹配增加了电子隧穿通过势垒的概率 [13]。石墨烯中的 Klein 隧穿在 2009 年被实验证实 [15, 16]。此外，石墨烯中准粒子的相对论性特征在石墨烯中的多体效应中也起着重要作用，Kotov 等人 [17] 对此进行了广泛的论述。通过拓展蒙特卡罗方法计算蜂窝格点上的 Hubbard 模型 [18, 19]，结果表明石墨烯格点在弱相互作用有稳定的半金属相而在强相互作用具有 Mott 绝缘相。

近年来，随着人们对以石墨烯为代表的 Dirac 材料的研究兴趣的增长，兴起了一个在基础物理层面的新领域：相对性量子混沌（Relativistic Quantum Chaos, RQC），该领域旨在揭示、理解和利用包括混沌在内的经典非线性动力学行为的相对论性量子表现，具体参见最近相关综述 [20–22]。与本论文密切相关的 RQC 课题有相对论性疤痕态 [23–26]，石墨烯系统中的能间距统计 [27–30] 以及混沌型石墨烯弹球中的多体相互作用 [31, 32] 等。

经典和量子粒子在具有复杂边界的空间中运动可以分别用波和波函数来表示，在诸如经典（量子）弹球或微波谐振器中被广泛的研究 [33–39]。其中，人们对经典-量子对应的问题特别感兴趣。对于具有潜在经典可积行为的量子系统，Bohr-Sommerfeld 量子化是对基于经典周期轨道的量子动力学有效的研究方法。对于经典混沌系统（例如 Bunimovich 运动场弹球）的量子动力学，已经观察到短周期、不稳定的周期轨道在波函数的空间分布中会留下印记 [34, 40, 41]。一般来说，在半经典机制下，波函数可以局部地被视为许多平面波的叠加。对于经典动力学为混沌的系统的量子系统，这些平面波的方向是随机的。直观的来说，人们可以预期波函数在位置空间中的分布是均匀的。然而，波函数高度不均匀分布的特征于 1979 年由 McDonald 和 Kaufman [42, 43] 发现，并且 Heller 在 1984 年指出这是一种“疤痕”现象。这是因为波函数倾向于集中在对应于经典极限为不稳定周期轨道的路径上，而且与不同特征值相关的特征波函数可以集中在不同的周期轨道上，从而使得波函数看起来如疤痕一样。在固态电子器件的输运中，与环境进行退相干并能保留下的局域态密度被称为“指针态”，它们一般对应于相应闭合器件中的周期轨道，并对量子输运产生巨大影响。石墨烯中的相对论性疤痕态在 2009 年被发现 [23]，并且一类特别的相对论性量子疤痕，即手性疤痕，在 2013 年被证实 [25]。

接下来我们分别对石墨烯中的波函数的探测、其对输运的影响以及其与多体能谱统计之间的关系进行叙述。

## 1.2 石墨烯中局域态密度的探测

介观处于微观和宏观之间，其研究对象在尺寸上是宏观的，但是因为电子运动的相干性，也会表现出量子性。因为粒子在介观几何构型中呈现波动特性，所以介观器件中的量子效应主要对应于局部电子特性的改变。当电子系统位于样品的自由表面时，可以使用相对于样品极化的金属尖端通过扫描隧道显微镜（Scanning Tunneling Microscopy, STM）直接测量局部电子特性，通过隧穿电流反映出局域电子态密度。另一方面，当电子系统，如二维电子气（2-Dimensional Gas, 2DEG），埋入绝缘异质结构中时，低偏压下的隧穿电流呈指数型衰减，导致 STM 无法应用。为了解决这种难题，实验上引入了扫描门显微镜（Scanning Gate Microscopy, SGM）技术。

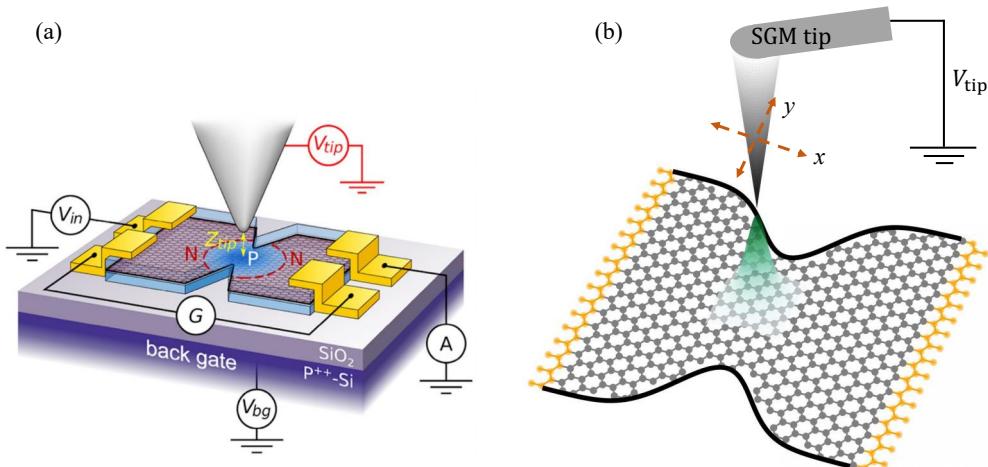


图 1-1: SGM 石墨烯实验装置和工作原理示意图。（a）SGM 石墨烯实验装置示意图（图片来源于文献 [44]）。图示探针与石墨烯样品之间的距离为  $Z_{tip}$ ，其携带的电压  $V_{tip}$  在石墨烯中形成局部的 N-P-N 结。（b）SGM 的工作原理示意图。施加于 SGM 探针上的电压  $V_{tip}$  对样品形成了等效的势分布，如图中绿色波包示意。SGM 探针可以沿着虚线所示方向进行上下左右移动，从而给出探针在不同位置时的电导。

SGM 是一种扫描探针显微镜技术，允许以纳米级空间分辨率对样品的局部电子特性进行成像和操作。SGM 基于半导体或金属的电阻取决于局部电荷载流子密度的原理，通过移动靠近样品表面的探针，从而对局部载流子密度进行成

像和调制。具体来说，将带电探针放置于样品上方距离样品  $Z_{\text{tip}}$  的某个位置，如图1-1 (a) 的实验装置所示。在 SGM 中，通过将尖锐的金属探针在样品表面进行扫描，同时对靠近探针的栅电极施加电压。电压对样品中的电子形成等效的势，从而局部调制样品中的载流子密度，导致了样品中电阻的变化，如图1-1 (b) 的 SGM 工作原理图所示。通过收集探针在许多不同位置的电导值，创建电导  $G(\mathbf{r}_0)$  的空间分布图——其中  $\mathbf{r}_0$  是探针的位置，或者以没有探针时电导值为参考创建电导变化  $\Delta G(\mathbf{r}_0)$  的空间分布图。相比于 STM，SGM 利用局域门效应微调电子波函数的分布，通过记录这种局域扰动对器件电导的影响从而间接的探测局域电子的性质。图 1-2 直观展示了 SGM 的工作流程。

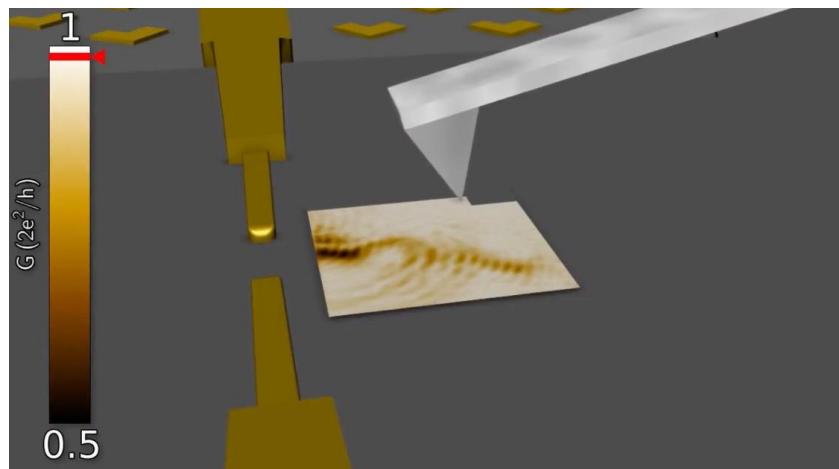


图 1-2：量子点接触器件的 SGM 实验的艺术性示意图（摘自 Boris Brun 在他博士期间制作的视频动画）。极化的探针在量子点接触分离电极后的 2DEG 上进行扫描，并记录随着探针位置变化的电导。图示操作产生的是探针诱导的电导变化图，表现了 2DEG 中的分岔电子流和探针诱导的干涉条纹。

从关于 SGM 的工作原理的介绍可以知道，该技术可用于两个不同的目的：(1) 探测介观器件中电子流或电子态密度的空间分布，或者 (2) 通过局部改变势能场来调控样品的量子性质。事实上，在同一实验中总是将这两种效应组合起来，因为探测效应是通过局部调节局部电势获得的。在这个意义上，SGM 也可以说是一种对受控扰动电子性质的间接探测方法。

1996 年，R. Westervelt 小组首次报告了 SGM 技术的使用 [45]。随后 SGM 技术便逐渐被用于对 2DEGs 中包括量子点接触 (Quantum Point Contact, QPC)、量子点 (Quantum Dot, QD) 等在内的量子器件的输运测量，并对介观器件中的电子流 [45]、电导量子化 [46, 47]、干涉效应 [48–53]、外部电子束的准直现象 [54]、电导异常 [55–57]、量子霍尔效应 [58–65]、库伦阻塞效应 [66–69]、杂质

效应 [70, 71] 以及电荷聚集 [72] 等现象进行了广泛深入的研究。

随着石墨烯的成功分离, SGM 也开始被广泛的应用于石墨烯实验。R. Westervelt 小组利用 SGM 研究了石墨烯器件中的电导涨落 [73]、磁聚焦和准直 [74, 75] 以及超导接触的 Andreev 反射 [76]。D. Goldhaber-Gordon 组研究了石墨烯收缩结构中潜在的不均匀性 [77] 以及对拓扑绝缘体中的边缘态进行成像 [78]。D. Ritchie 组研究了石墨烯器件中电荷中性点的不均匀性 [79, 80] 并通过磁聚焦实验对高迁移率石墨烯中的弹道轨迹进行 SGM 成像 [81]。K. Ensslin 组利用 SGM 研究了石墨烯纳米结构的局域态 [82]、石墨烯中霍尔边缘通道的反向散射 [83] 以及门控双层石墨烯纳米器件中的局域效应 [84], 并发现了其中的相干喷射现象 [85]。Y. Ochiai 组研究了石墨烯结构中的弱局域化效应 [86]。B. Hackens 组对石墨烯量子环中的相干输运 [87] 以及石墨烯结构中由探针诱导的折射现象 [88] 进行了研究。

由于 SGM 是一种扰动技术, 探针对 2DEG 的影响是从系统上提取信息的来源, 因此可以从理论上分析测量的 SGM 信号与不加探针时 2DEG 特性之间的联系。多年来, 几个小组对 SGM 进行了理论探究, 以帮助实验者进行数据分析或提出新的 SGM 实验来研究其他的物理问题。

在关于传统 2DEGs 的 SGM 研究中, E. Heller 组研究了 SGM 实验揭示的分岔电子流的特性和模式稳定性 [89]。他们还强调了表面波在海洋中波传播的相似性 [90]。M. Pala 组和 B. Hackens 实验组有着紧密的合作关系, 解释了实验结果并预测了新的物理效应。他们研究了 SGM 信号与局域态密度之间的关系 [91], 缺陷和磁场对记录在量子环上的 SGM 图像的影响 [92], 并且证明了双环纳米结构中存在反直觉的介观 Braess 效应 [93]。J-L. Pichard 组研究了 QPCs 中电子相互作用对 SGM 探针诱导的干涉图案的影响 [94], 这项工作是关于 QPC 电导量子化异常的实验工作的起源。他们还研究了温度对于干涉能见度的影响 [95] 以及平行磁场下自旋分裂效应 [96]。B. Szafran 组研究了 SGM 在量子环 [97, 98]、量子点 [99]、量子霍尔机制下的 QPCs [100]、双缝干涉仪 [101] 以及具有杂质的 2DEG [102] 等系统上的应用。R. Jalabert 和 D. Weinmann 组和 J-L. Pichard 研究组合作研究了 QPCs 中的相互作用效应, 之后研究了 SGM 信号与未加探针的电子性质之间的一般关系 [103, 104], 同时也探讨了有限偏压效应 [105]。近期, 他们研究了 SGM 信号在混沌腔中的起源以便于解释 K. Ensslin 组相关的实验结果 [106]。

而对 SGM 技术在石墨烯器件中的理论研究, B. Szafran 组研究了探针诱导的量子霍尔干涉仪的形成 [107] 以及在数值上研究了石墨烯 p-n 结中的蛇形轨道的成像 [108] 等。R. Jalabert 和 D. Weinmann 组研究了石墨烯器件中关于 SGM 探

针的电导响应的一般关系 [109]，从而构成了本论文内容的一部分。

### 1.3 石墨烯中指针态与磁性输运

宏观导体的电导  $G$  可以表示为  $G = \sigma A / L_{\text{con}}$ ，其中  $\sigma$  为电导率（导电材料的本征特性）， $A$  是导体的横截面积， $L_{\text{con}}$  是导体的长度（可作为样品尺度参考量）。因此电导会随着导体横截面积的减少而减少，但随着导体长度的减少而增加。可以猜测，当导体的长度十分小时，电导会变得无限大。但是实际情况却并非如此。上述提到的简单的标度关系（或者欧姆定律）在介观尺度上失效了。电导并不会变得无限大，而是会达到一个有限的  $G_0$ 。为了理解欧姆定律失效的原因，我们必须考虑电子的量子特性。这时，电子并不是一个经典的微型带电粒子，而是具有波粒二象性的波粒子。介观尺度（普遍为亚微米）下电子的波动特性对电导有一定的影响，这时电导不再是单调的变化，而是表现出以  $G_0 = 2e^2/h$  为单位的“跳动”或“台阶”性质，这种性质与样品的材料无关。

当 (i) 与电子相关的德布罗意波长、(ii) 平均自由程  $l_m$ ，即电子在其初始动量被破坏之前行进的距离以及 (iii) 相位弛豫 (phase relaxation) 长度  $l_p$ ，即电子在其初始相位被破坏之前行进的距离，与样品具有相当的量级时，此时的电子输运为介观输运。在这种机制下，我们对电子输运的经典直觉会被打破，新的有趣的效果出现。比如上面提到的电导量子化、普适的电导涨落、介观环中的干涉效应和 Aharonov-Bohm 振荡等，以及驱动量子点中的有趣现象，如库仑阻塞效应、Kondo 效应、非平衡 Kondo 效应和 Kondo 云的量子动力学等。大体上，可以将这些介观效应分平衡和非平衡两大类。

电子输运的早期量子理论本质上是半经典的，可以简述为电子被外力加速穿过布洛赫态，然后被杂质或声子散射，进而分散在布洛赫态之间。其中对平衡过程使用简单的占据概率处理，不考虑任何相干过程。所有的相位信息被认为是丢失在散射过程中，即电子的相弛豫长度变为样品或器件尺寸的数量级导致了这种半经典方法在介观导体中的电子输运中的失败。因此需要一种全新的方法来理解介观导体中的相干输运。朝着这个方向迈出的第一步的是 Landauer [110] 和 Büttiker [111]，并由 Imry [112] 进一步重新定义和分类。他们的量子传输理论可以概括为“将电导视为传导系数”。

一般来说，介观样品的量子输运可以被分为三种不同的机制：扩散、弹道和绝热输运。

#### 1. 扩散输运

常见的介观输运实验的样品为在 GaAs/GaAlAs 异质结中的异质结界面形成的 2DEG。该 2DEG 相比于金属薄膜具有许多突出的特性，比如它具有十分低的电子密度 ( $\sim 10^{12}/\text{cm}^2$ )，因此可以利用门电极进行外部控制。同时也意味着具有相对纳米样品而言很大的费米波长 ( $\sim 40 \text{ nm}$ ) 以及在低温下 ( $\sim 1K$ ) 非常大的平均自由程 ( $\sim 10\mu\text{m}$ )，并且其中量子干涉效应可以延伸到样品的长度。在这种情况下，仅存在弹性散射机制，并且散射过程不会破坏相位相干性。由于静电杂质导致弹性散射，杂质样品的电导在很大程度上受到杂质在样品中的分布方式的影响，从而使得电导随样品而变。

样品尺度  $L_{\text{con}}$  比电子的平均自由程  $l_m$  大的很多是扩散输运的特点。一个重要的长度为局域化长度  $l_{\text{loc}}$ ，即对于一个足够大的杂质，由于背向散射和量子干涉效应，电子会形成局域态（局域点随着指数衰减的波包），波包局域的典型长度被称为局域化长度。该现象由 Anderson 首次提出 [113]。在该机制下， $L_{\text{con}} \gg l_{\text{loc}} \gg l_m$ ，在零温下，样品变为绝缘体。而在有限温度下，可能发生亚扩散输运，此时，输运以热激活机制为主，比如跳跃到附近的局域态。不同维度的样品，其局域化机制十分的不同。一维情况下，即使对于一个微不足道的小杂质，所有的态都会是局域的。但是在二维情况下，态仅在弱杂质的边缘进行局域化。

## 2. 弹道输运

假设样品十分小  $L_{\text{con}} \sim l_m$ ，因为电子路径中的杂质很少，因此杂质对电子的弹性散射几乎可以忽略不计，此时我们称其为弹道输运。样品的输运特性在很大程度上取决于样品的形状。利用 Landauer 公式 [110] 可以对弹道输运有着非常好的理解，其定义为

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{a,b=1}^N |t_{ab}|^2 = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}[tt^\dagger], \quad (1.1)$$

其中  $t$  为透射矩阵， $t_{ab}$  为其矩阵元，为从模式  $b$  到  $a$  的透射幅度。Büttiker 将二端口 Landauer 公式拓展到了多端口 [111]。

## 3. 绝热输运

第三类称为绝热输运的情况发生在强垂直磁场的二维系统中。在这种情况下，费米能级周围的电子壳分裂形成朗道能级。电子的磁性长度  $l_{\text{mag}}$  为该机制下的特征长度。如果磁长度与样本大小相当，那么处于朗道能级的电子间散射就会受到抑制，即将这种机制称为绝热输运机制。

## 石墨烯量子点中的量子输运

量子输运的第一个特征是弱局域化。在包含石墨烯的二维扩散输运中，干涉效应可以被忽略，因此可以应用爱因斯坦关系  $\sigma_0 = e^2 \zeta(E) \mathcal{D}$  计算未加杂质的电导率  $\sigma_0$ ，其中  $\zeta(E)$  为费米能为  $E$  时的态密度， $\mathcal{D}$  为扩散常数 [114]。这对应于电子在扩散随机行走散射中不依赖于杂质形式的经典运动。由于杂质电势通常可以使用量子力学的 Born 近似来处理，取对电导率有主要贡献的近似项的方法被称为半经典输运理论。扰动理论中高阶项给出了电导率修正，如  $\sigma = \sigma_0 + \delta\sigma$ ，其中  $\delta\sigma \ll \sigma$ 。在某些情况下，上述修正可能是发散的，意味着微扰理论不再适用以及暗示着微扰不可处理的基态发生了相变。例如 Anderson 金属到绝缘体转变，其微观机制普遍被认为是正向和反向电子轨迹之间的量子干涉 [115]。由于这个原因，对电导率的主要量子修正被称为“弱局域化”，并被认为是发生 Anderson 局域化的前兆。通过磁场破坏前向和背向轨迹之间的对称性会导致电阻发生变化，实验上据此可以测量弱局域化。在该情况下， $\sigma(B=0) = \sigma_0 + \delta\sigma$ ，而  $\sigma(B > B^*) = \sigma_0$  只有半经典的贡献，其中  $B^*$  大约为一个量子磁通量通过样品区域所需的磁场。

量子输运的第二个标志是介观电导涨落 (conductance fluctuation)。通过对样品进行低温输运测量，观察到磁阻的波动看起来像是随机噪声。然而，与噪声不同的是，其中有些波动是可以重复出现的，这种现象被称为磁指纹 (magneto-fingerprints)。这些磁指纹取决于随机杂质的位置，通过对样品进行退火会重新定位杂质，并会使得磁指纹发生改变。电导涨落的显著特征是电导的幅度是随机分布的（仅取决于系统的全局对称性），并且完全独立于任何微观参数，如材料特性或杂质类型。

尽管对于弱局域化和普适电导涨落的一般理论早就形成了 [116]。但是，对于石墨烯，其“金属性”特征导致了几个有趣和独特的性质，包括不能对狄拉克电子进行 Anderson 局域化和以及由原子尺度的尖锐杂质导致的金属到绝缘体的转变等。

量子点 (Quantum Dot, QD) 是一种人工制造的器件。通常，量子点在半导体材料中被定义的大小为  $\sim 100 \text{ nm}$  量级的小区域。自八十年代后期到现在，量子点物理学都是一个非常活跃且成果丰硕的研究课题。石墨烯的平均自由程约为  $\sim 100 \text{ nm}$  [117]，因此，对于小于其平均自由程的石墨烯器件中，如石墨烯量子点，其中的输运机制为弹道输运。开放量子点，即由小的空腔中的二维电子气通过两个 QPCs 连接导线的装置，其与外部环境之间的耦合从而影响输运特性，是对量子点研究中的一个重要的分支 [118, 119]。通常假设这种耦合的存在完全消除了能谱的所有细节 [120]。然而，正如许多研究已经确定的那样，开放量子

点的传输特性只能通过假设封闭系统本征态的一些子集在引入耦合时被保留了下来从而进行解释 [121–126]。具体来说，当量子点中保留了量子的特性，可以发现量子点中的波函数会出现很明显的疤痕态。这些“疤痕”是经典轨道的印记，称这种态为指针态，与闭合系统一些本征态对应。指针态与经典轨道的对应可以由量子力学的 Zurek 退相干理论进行解释 [127, 128]。

我们的研究关注石墨烯量子点 (Graphene Quantum Dot, GQD) 中的指针态的磁性输运特征，尤其关注小磁场下指针态对应的经典磁性轨道，并对由杂质导致的扩散和弹道输运机制下的指针态及其输运特征进行了研究。

## 1.4 石墨烯中波函数与多体能谱统计

量子混沌通常指研究相应经典系统中非线性动力学和混沌行为的量子表现或特征，是一个活跃了大约四十年的跨学科领域 [129–131]。量子混沌系统中的能谱统计一直是非相对论量子混沌研究的“传统”课题 [129, 130, 132]。一个基本的结果是，对于没有任何几何对称性的经典混沌系统，在相应的量子系统中，既没有能级简并也没有能级之间的校正，因此能谱统计可以用随机矩阵来描述 [133–135]。特别地，对于具有时间反演对称性的系统，由于正交变换，哈密顿矩阵是实对称的。对于此类系统，能级间距统计遵循高斯正交系综 (Gaussian Orthogonal Ensemble, GOE) 分布 [129]。如果系统除了时间反演对称性还具有半整数自旋相互作用，那么哈密顿量可以用辛变换下不变的四元数实矩阵表示。这种情况下，能间距统计遵循高斯辛系综 (Gaussian Symplectic Ensemble, GSE)。当时间反演对称性被破坏时，例如，在系统中加入磁场，哈密顿量在酉变换下是不变的，因此能级间距统计由高斯酉系综 (Gaussian Unitary Ensemble, GUE) 描述。

在现有的大量关于量子混沌的文献中，能级间距统计主要在非相对论性量子系统中进行研究。一个自然的问题是，与不同对称类型不同的统计行为是否在相对论性量子系统中依然存在。该问题十分重要，因为相对论性量子系统中存在的一些基本特征，如自旋、线性色散关系、Klein 隧穿效应以及手性等，在非相对论系统中的薛定谔方程中并不包含。早期对该问题的担忧是相对论性系统是否具有物理对应，因为从实验的角度看，由于 Klein 隧穿效应的存在，相对论粒子无法被限制在设计的区域内 [13, 136]。尤其是，在规则系统中，隧穿概率可能很低，因为它只是发生在区域边界上的一组特定的入射角度，而在混沌系统中，可能会出现广泛的可隧穿的角度范围。二维狄拉克材料在过去约二十年的巨大发展消除了这种担忧，因为在石墨烯或拓扑绝缘体的实验系统中确实可以限

制狄拉克特性的准粒子。特别是，具有混沌几何形状限制的石墨烯弹球表示了在相对论性量子体系中研究能级间距统计的潜在实验可能性。

具有受限的赝狄拉克粒子的石墨烯弹球和二维无质量的狄拉克弹球有一些差异。对于石墨烯，单个狄拉克点的赝粒子遵循相同的狄拉克方程，但是却具有不同的边界条件。虽然在开放的石墨烯系统中，与两个谷相关的电子可以单独考虑 [137–139]，但是对于边界处的闭合石墨烯弹球散射等效地将两个谷进行了“耦合”，从而更可能产生对应于两个耦合的狄拉克费米子系统的现象。因此，石墨烯系统可以表现出非相对论性量子或纯相对论性量子系统中所不具备的物理特性，并且其能间距统计可能与基于石墨烯的器件（例如开放量子点 [140–142]，一种“开放”的弹球结构）中的输运性质有关联。

## 能级间距统计的表征

表征能级间距统计的主要物理量是最近邻能级间距的概率分布函数。假设一个闭合量子系统的能谱为  $\{\epsilon_n\}$ ，并按照  $\epsilon_1 < \dots < \epsilon_n < \epsilon_{n+1} < \dots$  进行排序。对于不同的系统，甚至是同一系统的不同能量范围，态密度都可能是不同的。因此可以对能谱进行展开，使得由于态密度导致的统计的波动不依赖于系统的细节。可以引入态密度的加和  $N(\epsilon_n)$ ，即低于能量  $\epsilon_n$  的能级数量，因此可以将展开的能谱表示为  $x_n \equiv \langle N(\epsilon_n) \rangle$ ，其中  $\langle N(\epsilon_n) \rangle$  为  $N(\epsilon_n)$  的平滑形式。按照上述对  $x_n$  的定义，能间距为  $S_n = x_{n+1} - x_n$ 。让  $P(S)$  为  $S_n$  的分布，并且满足归一化条件  $\int P(S)dS = 1$ ，那么展开能谱的平均间距自动为 1，即  $\int SP(S)dS = 1$ 。对于非相对论性的量子弹球，根据相应的经典动力学的性质和系统对称性，展开能级间距的分布遵循许多通用分类。尤其是，对于经典可积系统，对应柏松分布 [143]：

$$P(S) = e^{-S}. \quad (1.2)$$

如果系统在经典极限内表现出完全混沌，并且它不具有任何几何对称性但保留了时间反演对称性，则能级间距分布遵循 GOE 统计 [144]：

$$P(S) = \frac{\pi}{2} S e^{-\pi S^2/4}. \quad (1.3)$$

当时间反演对称性被打破，会出现 GUE 统计：

$$P(S) = \frac{32}{\pi} S^2 e^{-(4/\pi)S^2}. \quad (1.4)$$

累积能级间距分布为

$$I(S) = \int_0^S P(S')dS'. \quad (1.5)$$

另外一个经常用到的刻画展平后的能级在  $L$  范围内的平均关联程度的表征量  $\Delta_3(L)$ ，其定义为

$$\Delta_3(L) = \left\langle L^{-1} \min_{a,b} \int_{\epsilon-L/2}^{\epsilon+L/2} [N(\epsilon) - a - b\epsilon]^2 d\epsilon \right\rangle, \quad (1.6)$$

其中  $a, b$  为能级  $E$  与  $N(\epsilon)$  在  $\pm L/2$  范围内最小二乘法拟合的系数，最外层是对不同能量  $E$  处求取的平均值。

### 多体相互对能谱统计的影响

量子混沌的研究大多数集中在对单粒子问题的探索，但现实世界的量子系统中，多体相互作用无处不在，因此研究量子混沌中的多体相互作用十分的有意义。Hubbard 模型常用来描述系统中的电子-电子相互作用 [145]。在非相对论性量子领域，早在 1990s，一维和二维 Hubbard 模型的能谱统计就已经被研究了 [146–150]。在 21 世纪初，一维 Bose-Hubbard 模型以及相应的拓展模型中的能谱统计也被研究了 [151–155]。Hubbard 模型及其拓展证实了一个直接易懂的现象，即这些强关联的系统随着施加相互作用强度的增大，系统遵循从规则到混沌的能谱统计变化，并且发现量子混沌是复杂的强关联系统的一个普遍特性。还有一些零星的工作 [31, 156] 通过对多体相互作用进行平均场化处理研究了量子弹球系统，揭示了经典轨道在能谱统计中有着非平庸的作用。尽管有这些工作，但是多体相互作用对相对论性量子混沌领域中的基本量的影响仍然缺乏理解。

理论和实验对石墨烯中的 Hubbard 模型的研究根据研究系统的维度可以分为：(1) 有限的石墨烯纳米碎片，(2) 一维石墨烯边界或石墨烯纳米条带、二维石墨烯和具有点缺陷引起的磁性石墨。其中磁性石墨烯边缘和纳米条带持续受到科学界的关注 [157]。我们的研究主要关注特定形状的二维石墨烯弹球的多体能谱统计，从而理解多体相互作用、相对论性量子力学以及经典动力学三者之间的关系。

## 1.5 论文的研究目的和研究内容

以上对本论文涉及的背景知识和基本概念做了适当的介绍。对石墨烯中波函数或局域态密度的探测和研究是一个基础的研究课题。本论文的研究目的是从理论和数值角度对石墨烯中与波函数相关的量子输运和多体效应进行系统全面的理解。

本论文研究的课题主要集中在三个方面：其一，石墨烯中的局域态密度的探测；其二，局域态密度对石墨烯量子点磁性输运的影响；其三，多粒子条件下石墨烯弹球中的波函数表现及相应的能谱统计。本论文按照以下方式组织。第二章对本文的研究对象，包括石墨烯、石墨烯纳米条带、石墨烯量子点以及石墨烯弹球进行了简单介绍；第三章以扶手椅形石墨烯为例，推导了石墨烯中的输运理论，并介绍了本论文所用到的数值计算方法；第四章研究了在扫描门显微镜探针作用下石墨烯条带和收缩结构的电导修正，对课题一进行了系统的论证；第五章以小磁场下的多边形量子点为例对课题二进行了研究；第六章考虑多体相互作用，在平均场近似下，以扇形石墨烯弹球为例对课题三进行了探究；最后在第七章对本论文做了总结，并给出展望。

## 第二章 石墨烯简介

石墨烯是由碳原子组成的具有单原子厚度的二维晶体。通过滚动和折叠石墨烯可以构造富勒烯和碳纳米管 [158]。由于单层石墨烯的成功分离及其所展示的优良的导电性和光学性质 [9, 10, 12, 159]，因此旨在确定石墨烯的电子性质和潜在应用的研究迅速发展起来。多数研究集中在对石墨烯的电子特性 [160]、电输运特性 [114] 以及多体效应 [17, 161, 162] 的探讨。对石墨烯的更加广泛的介绍可以参阅 Katsnelson、Aoki、Güçlü 以及 Torres 等人的书籍 [163–166]。本章首先介绍石墨烯的电子特性，如晶格结构、能带结构和狄拉克费米子，之后介绍本论文的主要研究对象，如石墨烯纳米条带、石墨烯量子子弹球和石墨烯量子点。

### 2.1 石墨烯的电子性质

#### 2.1.1 石墨烯格点

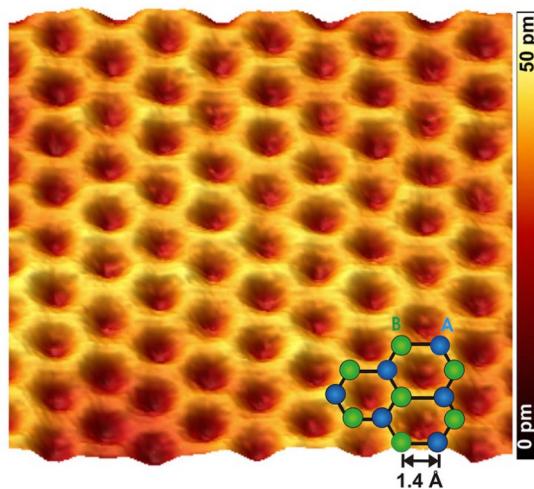


图 2-1: 原子分辨的石墨烯晶格的 STM 图。蓝色和绿色球体分别表示由 A 和 B 标记的晶胞内的两个碳原子。图片来自 R. Wiesendanger 组。

图 2-1 为原子分辨的石墨烯晶格的 STM 图，从中可知石墨烯是由碳原子按照正六边形排列组成的二维晶体，其晶胞由不等价的 A 和 B 原子组成。在重复晶胞后，这些原子形成两个三角形晶格，称为 A 晶格和 B 晶格，其位置使得每个 A 原子与三个 B 原子直接相邻，如图 2-2 (a) 所示。如果我们用  $a_{NN} \approx 0.142$

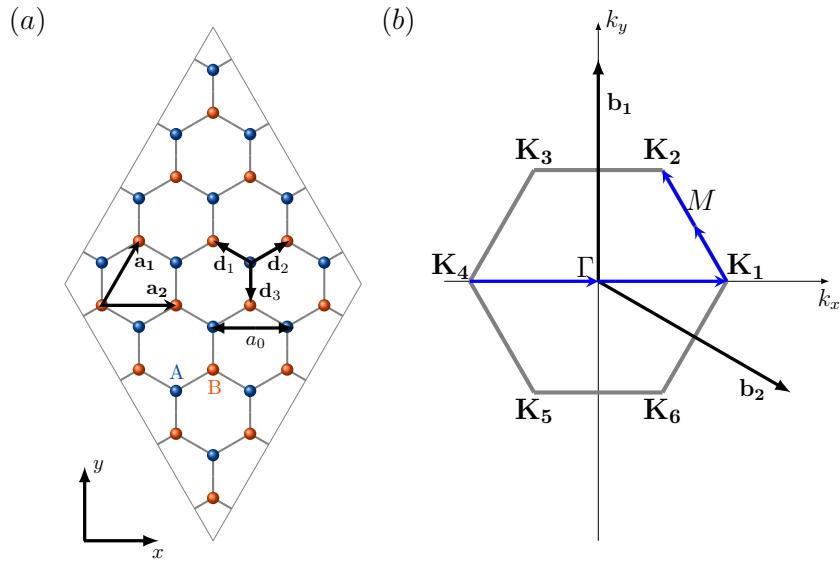


图 2-2: (a) 石墨烯格点示意图。蓝点和红点分别表示晶格元胞内的 A 和 B 原子。蜂窝状格点的基矢为  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$ , 其中  $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a_0$ 。A 原子通过  $\mathbf{d}_i$  与附近的三个近邻 B 原子进行联系。(b) 石墨烯的倒晶格。 $\mathbf{K}_i$  为第一布里渊区的六个顶角 (狄拉克点),  $\mathbf{b}_1$  和  $\mathbf{b}_2$  为倒格矢。图中蓝线为计算能带结构遵循的石墨烯倒空间中的路径  $\mathbf{K}_4 \rightarrow \Gamma \rightarrow \mathbf{K}_1 \rightarrow M \rightarrow \mathbf{K}_2$ , 其中  $\Gamma$  和  $M$  为高对称点。

$\text{nm}$  表示两个相邻碳原子之间的间隔, 也引入晶格常数  $a_0$ , 定义为  $a_0 = \sqrt{3}a_{\text{NN}}$ 。则 A 原子的三个相邻 B 原子的相邻向量  $\mathbf{d}_i$  可定义为

$$\begin{aligned}\mathbf{d}_1 &= \frac{a_{\text{NN}}}{2}(-\sqrt{3}, 1), \\ \mathbf{d}_2 &= \frac{a_{\text{NN}}}{2}(\sqrt{3}, 1), \\ \mathbf{d}_3 &= a_{\text{NN}}(0, -1).\end{aligned}\quad (2.1)$$

并且我们定义格点的两个基向量

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_1 &= \mathbf{d}_2 - \mathbf{d}_3 = \frac{a_{\text{NN}}}{2}(\sqrt{3}, 3) = \frac{a_0}{2}(1, \sqrt{3}), \\ \mathbf{a}_2 &= \mathbf{d}_2 - \mathbf{d}_1 = a_{\text{NN}}(\sqrt{3}, 0) = a_0(1, 0).\end{aligned}\quad (2.2)$$

A 类型的原子位于

$$\mathbf{A}_i = m_i \mathbf{a}_1 + n_i \mathbf{a}_2, \quad (2.3)$$

并且 B 类型的原子位于

$$\mathbf{B}_i = m_i \mathbf{a}_1 + n_i \mathbf{a}_2 + \mathbf{d}_1 = \mathbf{A}_i + \mathbf{d}_1, \quad (2.4)$$

其中  $m_i$  和  $n_i$  是整数索引。单元晶胞的面积为  $\Omega_{\text{u.c.}} = \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 = \sqrt{3}a_0^2/2$ 。

定义倒格矢为  $\mathbf{b}_i$ , 可以通过  $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$  的关系得到, 为

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a_0} \left(0, \frac{2}{\sqrt{3}}\right), \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{a_0} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right).\end{aligned}\quad (2.5)$$

这些倒格矢构成一个六边形倒易点阵 (如图 2-2 (b) 所示)。第一布里渊区 (First Brillouin Zone, 1BZ) 顶点标记为  $\mathbf{K}_i$ , 具体的  $\mathbf{K}_1 = K_0(1, 0), \mathbf{K}_2 = K_0(1/2, \sqrt{3}/2)$ , 其中  $K_0 = 4\pi/3a_0$ , 其他  $\mathbf{K}_i$  点可以根据  $\mathbf{b}_i$  依次得到。1BZ 的面积为  $\Omega_{\text{1BZ}} = (2\pi)^2 2/\sqrt{3}a_0^2 = (2\pi)^2/\Omega_{\text{u.c.}}$ 。

### 2.1.2 石墨烯色散关系：紧束缚模型

对于无相互作用的单电子情况, 石墨烯的基本物理性质可由紧束缚哈密顿量描述

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left( c_{1,i}^\dagger c_{2,j} + c_{2,j}^\dagger c_{1,i} \right), \quad (2.6)$$

其中算符  $c_{1,i}$  和  $c_{2,i}$  ( $c_{1,i}^\dagger$  和  $c_{2,i}^\dagger$ ) 分别是在格点  $\mathbf{A}_i$  和  $\mathbf{B}_i$  湮灭 (产生) 电子。 $t$  是耦合能并且仅对最近邻的格点  $i$  和  $j$  进行求和。为了得到能带结构, 我们首先将湮灭算符在动量空间进行展开

$$\begin{aligned}c_{1,i} &= \frac{1}{\sqrt{N_{\text{u.c.}}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_i} c_{1,\mathbf{k}}, \\ c_{2,i} &= \frac{1}{\sqrt{N_{\text{u.c.}}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{B}_i} c_{2,\mathbf{k}},\end{aligned}\quad (2.7)$$

其中  $N_{\text{u.c.}}$  是系统中单元晶胞的数目并且  $c_{1,\mathbf{k}}$  和  $c_{2,\mathbf{k}}$  产生具有动量  $\mathbf{k}$  的电子, 代入到方程 (2.6) 可得

$$H = -t \frac{1}{N_{\text{u.c.}}} \sum_i \sum_{j=1}^3 \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(-\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{A}_i} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{d}_j} c_{1,\mathbf{k}}^\dagger c_{2,\mathbf{k}'} + e^{i(-\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{A}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{d}_j} c_{2,\mathbf{k}}^\dagger c_{1,\mathbf{k}'}.\quad (2.8)$$

利用  $\sum_{\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{A}_i} f(\mathbf{k}') = f(\mathbf{k})$ , 可简化为

$$\begin{aligned}H &= -t \frac{1}{N_{\text{u.c.}}} \sum_i \sum_{j=1}^3 \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_j} c_{1,\mathbf{k}}^\dagger c_{2,\mathbf{k}} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_j} c_{2,\mathbf{k}}^\dagger c_{1,\mathbf{k}} \\ &= -t \sum_{j=1}^3 \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_j} c_{1,\mathbf{k}}^\dagger c_{2,\mathbf{k}} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_j} c_{2,\mathbf{k}}^\dagger c_{1,\mathbf{k}},\end{aligned}\quad (2.9)$$

或者，写成矩阵形式

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{1,\mathbf{k}}^\dagger & c_{2,\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \phi(\mathbf{k}) \\ \phi^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1,\mathbf{k}} \\ c_{2,\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

其中  $\phi(\mathbf{k}) = -t \sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_j}$ 。为了进一步简化，可以将  $\phi(\mathbf{k})$  写成具有相位的振幅  $\Phi(\mathbf{k}) = |\phi(\mathbf{k})|e^{i\theta_{\mathbf{k}}}$ ，其中  $\theta_{\mathbf{k}} = \arg(k_x + ik_y)$  是  $\mathbf{k}$  和正  $k_x$  轴的夹角。定义矢量  $\mathbf{c}_{\mathbf{k}}^\dagger = (c_{1,\mathbf{k}}^\dagger, c_{2,\mathbf{k}}^\dagger)$ ，可得

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{c}_{\mathbf{k}}^\dagger h(\mathbf{k}) \mathbf{c}_{\mathbf{k}}, \quad (2.11)$$

其中

$$h(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \Phi(\mathbf{k}) \\ \Phi^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} = |\phi(\mathbf{k})| \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \\ e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

矩阵  $h(\mathbf{k})$  的本征值为  $\pm|\Phi(\mathbf{k})|$ ，并且本征矢量是

$$\mathbf{g}_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

通过酉变换  $U(\mathbf{k})$ ，可以对角化  $h(\mathbf{k})$  并且得到色散关系，

$$U(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathbf{g}_+(\mathbf{k}) & \mathbf{g}_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} & -e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

$$V(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} |\Phi(\mathbf{k})| & 0 \\ 0 & -|\Phi(\mathbf{k})| \end{pmatrix} = |\Phi(\mathbf{k})| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

其中  $h(\mathbf{k}) = U(\mathbf{k})V(\mathbf{k})U^\dagger(\mathbf{k})$ ，或者

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{c}_{\mathbf{k}}^\dagger U(\mathbf{k}) V(\mathbf{k}) U^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{c}_{\mathbf{k}}. \quad (2.15)$$

由于

$$U^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{c}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \\ 1 & -e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1,\mathbf{k}} \\ c_{2,\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} c_{1,\mathbf{k}} + e^{i\theta_{\mathbf{k}}} c_{2,\mathbf{k}} \\ c_{1,\mathbf{k}} - e^{i\theta_{\mathbf{k}}} c_{2,\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_+(\mathbf{k}) \\ \gamma_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

其中  $\gamma_\lambda(\mathbf{k}) = 1/\sqrt{2} (c_{1,\mathbf{k}} + \lambda e^{i\theta_{\mathbf{k}}} b_{\mathbf{k}})$ ,  $\lambda = \pm 1$ ，我们可得对角化的哈密顿量

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\mathbf{k}} |\Phi(\mathbf{k})| \begin{pmatrix} \gamma_+^\dagger(\mathbf{k}) & \gamma_-^\dagger(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_+(\mathbf{k}) \\ \gamma_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} |\Phi(\mathbf{k})| \left( \gamma_+^\dagger(\mathbf{k}) \gamma_+(\mathbf{k}) - \gamma_-^\dagger(\mathbf{k}) \gamma_-(\mathbf{k}) \right) \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=\pm 1} \epsilon_\lambda(\mathbf{k}) \gamma_\lambda^\dagger(\mathbf{k}) \gamma_\lambda(\mathbf{k}),
\end{aligned} \tag{2.17}$$

其中色散关系为  $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \lambda |\Phi(\mathbf{k})| = \lambda |\phi(\mathbf{k})|$ , 相应的准粒子 (由  $\gamma_\lambda^\dagger(\mathbf{k})$  产生) 是电子在 A 和 B 格点上激发的线性组合。因此, 色散关系的形式为

$$\begin{aligned}
\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) &= \lambda |\phi(\mathbf{k})| = \lambda \left| -t \sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_j} \right| = \dots \\
&= \lambda |t| \sqrt{3 + 4 \cos\left(\frac{1}{2}k_x a_0\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a_0\right) + 2 \cos(k_x a_0)}.
\end{aligned} \tag{2.18}$$

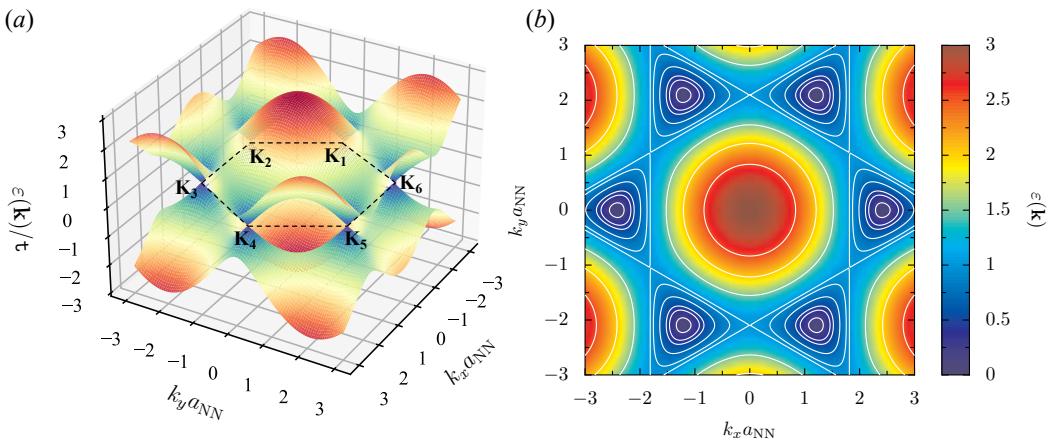


图 2-3: 石墨烯的三维色散图 (a) 及其在  $k_x - k_y$  平面上的映射 (b)。

我们发现两个色散能带 ( $\lambda = \pm 1$ ) 在点  $\mathbf{K}_i$  接触, 此时  $\Phi(\mathbf{k})$  为 0, 我们将其称为  $\mathbf{K}$  点或者狄拉克点, 如图 2-3 (a) 所示。当能量较小时, 色散关系的等能面是圆形的, 能量较大时, 等能面被扭曲成三角形, 称为三角翘曲 (trigonal-warping), 如图 2-3 (b) 所示。我们注意到对于集合  $\{\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_3, \mathbf{K}_5\}$  中的任何一个点, 我们可以通过一个由倒格矢  $\mathbf{b}_1$  和  $\mathbf{b}_2$  的线性组合平移得到。对于集合  $\{\mathbf{K}_2, \mathbf{K}_4, \mathbf{K}_6\}$  中的任意一个点也是如此。因此, 即使有六个  $\mathbf{K}$  点, 也只有其中两个 (属于不同的集合) 是不等价的。此外, 沿着石墨烯 1BZ 中如图 2-2 (b) 中蓝线所示的路径计算的能带能量如图 2-4 所示, 其中  $\mathbf{K}_4(\mathbf{K}_2)$  和  $\mathbf{K}_1$  虽然属于不同集合, 但是其能带结构是相似的, 而高对称点  $\Gamma$  和  $M$  处的能带结构和  $\mathbf{K}$  点的差异很大。

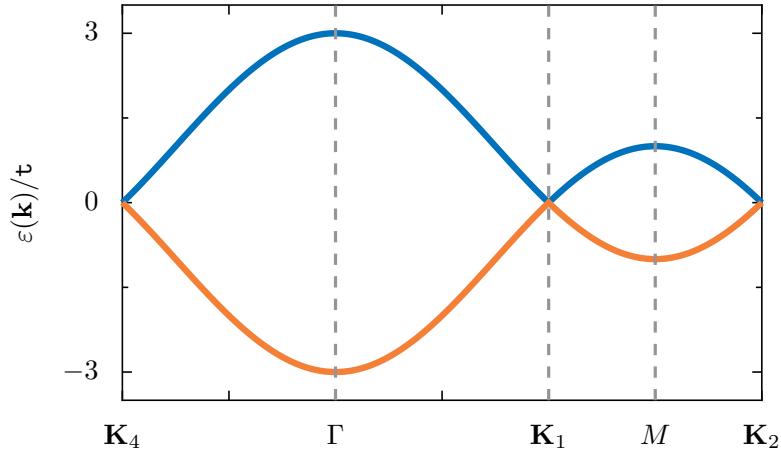


图 2-4: 图 2-2 (b) 中电子在倒空间中的行走路径对应的能带结构, 蓝线和橘黄色线分别对应  $\lambda = 1$  和  $\lambda = -1$ 。

### 2.1.3 低能近似: 狄拉克费米子

如图 2-3 (a) 和 2-4 所示, 我们发现两个能带在点  $\mathbf{K}_i$  接触, 并且靠近  $\mathbf{K}_i$  的色散关系是线性的 ( $\varepsilon \propto |\mathbf{k}|$ ), 该关系可通过对色散关系进行低能近似得到。

由于六个  $\mathbf{K}_i$  点中只有两个不等价, 因此研究一对这样的不等价点就足够了。我们选择  $\mathbf{K}^\nu = \nu \mathbf{K}_1 = 4\pi/3a_0(\nu, 0)$ ,  $\nu = \pm 1$ , 并重新定义动量  $\mathbf{k} = \mathbf{K}^\nu + \boldsymbol{\kappa}$ , 其中  $\boldsymbol{\kappa}$  比  $\mathbf{K}^\nu$  小。由于  $\boldsymbol{\kappa}$  很小, 我们可以围绕  $\mathbf{k} = \mathbf{K}^\nu$  展开  $\Phi(\mathbf{k})$ , 可得

$$\Phi(\mathbf{k}) = \Phi(\mathbf{K}^\nu + \boldsymbol{\kappa}) \approx \frac{\sqrt{3}}{2}a_0 t(\nu \kappa_x - i \kappa_y). \quad (2.19)$$

代入上述方程到哈密顿量 (2.12), 我们得到低能近似

$$h^\nu(\boldsymbol{\kappa}) = \hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & \nu \kappa_x - i \kappa_y \\ \nu \kappa_x + i \kappa_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_f |\boldsymbol{\kappa}| \begin{pmatrix} 0 & \nu e^{-i\nu\theta_\kappa} \\ \nu e^{i\nu\theta_\kappa} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

其中  $v_F = \sqrt{3}/2a_0|t|/\hbar$  是费米速度 ( $\approx 10^6$  m/s), 并且  $\theta_\kappa = \arg(\kappa_x + i \kappa_y)$ 。低能近似下的本征值和本征矢量是

$$\epsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \lambda |\Phi(\boldsymbol{\kappa})| = \lambda \hbar v_F |\boldsymbol{\kappa}|, \quad (2.21)$$

并且

$$\mathbf{g}_\lambda^\nu(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda \nu e^{i\nu\theta_\kappa} \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

## 2.2 石墨烯纳米带

石墨烯纳米带是通过将一片石墨烯切割成带状而制成的。这样做时，条带的边缘将具有不同的边界，具体取决于切割条带的方向。就像我们定义的石墨烯格点（图 2-2 (a)），沿着  $x-$  方向切割将会产生具有锯齿形（Zigzag）边界的石墨烯条带，沿着  $y-$  方向切割会产生具有扶手椅形（Armchair）边界的石墨烯条带。接下来我们对两种石墨烯条带的电子特性和色散关系进行讨论。低能量近似下，石墨烯带的总波函数为围绕  $\mathbf{K}^\pm$  附近的波函数的组合 [167, 168]：

$$\Phi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{K}^+ \cdot \mathbf{r})\phi^+(\mathbf{r}) + \exp(i\mathbf{K}^- \cdot \mathbf{r})\phi^-(\mathbf{r}), \quad (2.23)$$

其中  $\mathbf{K}^\pm = K_0(\pm, 0)$ ，且

$$\phi^\pm(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \phi_A^\pm(\mathbf{r}) \\ \phi_B^\pm(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

包含来自两个子晶格 A 和 B 的贡献的赝自旋子。为了得到波函数以及相应的色散关系/能带结构，我们必须求解如下本征方程：

$$h^\nu(\boldsymbol{\kappa})\Phi^\nu(\mathbf{r}) = \varepsilon(\boldsymbol{\kappa})\Phi^\nu(\mathbf{r}). \quad (2.25)$$

根据选择的石墨烯条带的边缘类型，需要施加不同的边界条件并对  $\boldsymbol{\kappa}$  进行量子化。

### 2.2.1 锯齿形石墨烯纳米条带

图 2-5 所示的是一个典型的锯齿形石墨烯纳米带。其中  $N_{zz}$  是竖直方向碳原子链的数目（图中条带的  $N_{zz} = 6$ ），条带的单元层（图中的长方形阴影区域）包含了  $2N_{zz}$  个原子。边界原子（蓝色和红色叉号表示）之间的距离，或者条带的宽度为

$$W = (3N_{zz} + 2)\frac{a_{NN}}{2}. \quad (2.26)$$

如图 2-5 所示，在其中一条边界上，所有的原子属于同一种子晶格。因此锯齿形石墨烯条带的边界条件为

$$\Phi_A(x, y = 0) = \Phi_B(x, y = W) = 0. \quad (2.27)$$

通过将该边界条件代入到方程(2.25)中，我们发现（详细推导过程见附录 A.1），横向动量  $\kappa_n$  和传输方向动量  $\kappa_x$  是耦合的，两者关系为

$$\nu\kappa_x = -\frac{\kappa_n}{\tan(\kappa_n W)}. \quad (2.28)$$

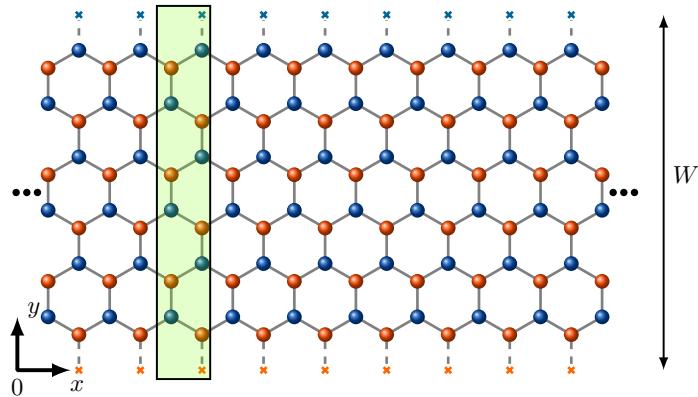


图 2-5:  $N_{zz} = 6$  的锯齿形石墨烯条带。单元层（绿色阴影区域）包含  $2N_{zz}$  个原子。波函数在边界（虚拟的蓝色和红色叉号）为零，即波函数的 A 和 B 格点的波函数分别在  $y = W$  和  $y = 0$  处为零。

如果允许  $\kappa_n$  为虚数，如  $\kappa_n = iq_n$ ，有解为

$$\nu\kappa_x = -\frac{q_n}{\tanh(q_n W)}. \quad (2.29)$$

这些方程中的任何一个都不是解析可解的，但是我们可以利用数值去找出色散关系， $\varepsilon_{\lambda n}(\kappa_x) = \lambda\hbar v_F \sqrt{\kappa_x^2 + \kappa_n^2}$ 。

波函数的两个分量为（推导详见附录 A.1）

$$\Phi_A(\mathbf{r}) = 4iC_A^\nu e^{i\kappa_x x} \cos(K_0 x) \sin(\kappa_n y) \quad (2.30)$$

以及

$$\Phi_B(\mathbf{r}) = 2i\lambda C_A^\nu e^{i\kappa_x x} [e^{-iK_0 x} \sin(\kappa_n y + \theta_+(\kappa)) + e^{iK_0 x} \sin(\kappa_n + \theta_-(\kappa))], \quad (2.31)$$

其中  $\theta_\nu(\kappa) = \arg(\nu\kappa_x + i\kappa_n)$  并且归一化的常数为

$$C_A^\nu = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\kappa_n}{2\kappa_n W - \sin(2\kappa_n W)}}. \quad (2.32)$$

## 2.2.2 扶手椅形石墨烯纳米条带

图 2-6所示的为扶手椅形石墨烯纳米带。在本图中，坐标轴已翻转。如果将单元层（绿色阴影矩形）内的全碳环数设为为  $N_{ac}$ （图中的条带  $N_{ac} = 5$ ），则晶胞将包含  $4N_{ac} + 2$  个原子，并且条带的宽度将是

$$W = (N_{ac} + 1)a_0. \quad (2.33)$$

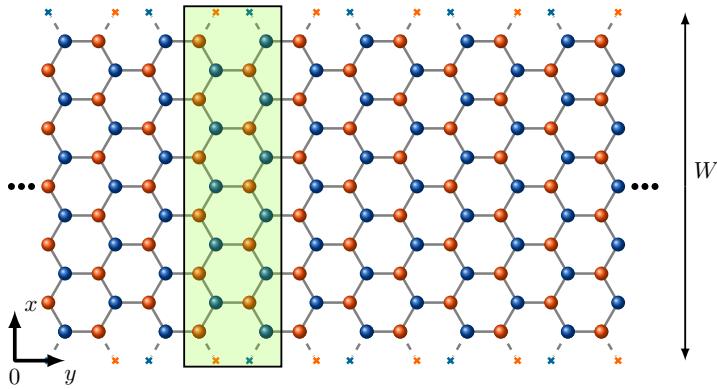


图 2-6:  $N_{ac} = 5$  的扶手椅形石墨烯条带。单元层（绿色阴影区域）包含  $4N_{ac} + 2$  个原子。波函数在边界（虚拟的蓝色和红色叉号）为零。

可以观察到边界条件现在是两个子晶格上的波函数在两个边上都为零（因为每个边上都有 A 和 B 原子），即

$$\Phi(x=0, y) = \Phi(x=W, y) = 0. \quad (2.34)$$

如附录 A.2 中所示，代入方程 (2.25) 可得到

$$\kappa_n = \frac{n\pi}{W} - K_0 = \frac{n\pi}{W} - \frac{4\pi}{3a_0}, \quad (2.35)$$

并且传输方向动量  $\kappa_y$  和横向动量  $\kappa_n$  不耦合（此处和锯齿形石墨烯不一样）。该色散关系是  $\varepsilon_{\lambda n}(\kappa_y) = \lambda \hbar v_F \sqrt{\kappa_n^2 + \kappa_y^2}$ ，只要  $\kappa_n \neq 0$ ，就会在  $\kappa_y = 0$  处有间隙，此时扶手椅形石墨烯纳米条带是半导体性的。另一方面，对于  $N_{ac}$  的某些值，可得  $\kappa_n = 0$ ，此时色散关系是金属性的，发生这种情况的条件是存在方程的整数解  $n$

$$n = \frac{4(N_{ac} + 1)}{3}. \quad (2.36)$$

只有当  $N_{ac} + 1$  为 3 的倍数的时候才成立，比如，当  $N_{ac} = 3m - 1$ ,  $m$  为整数。因此，扶手椅形石墨烯条带将会根据其宽度的不同而表现出金属性或者半导体性。

波函数为（详细推导见附录 A.2）

$$\Phi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} i \\ \lambda e^{i\theta(\kappa)} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{W}} \sin\left(\frac{n\pi}{W}x\right) e^{i\kappa_y y}, \quad (2.37)$$

其中  $\theta(\kappa) = \arg(\kappa_y - i\kappa_n)$ 。与锯齿形石墨烯条带不同，其中并无边界态。

## 2.3 石墨烯量子弹球和石墨烯量子点

本论文的第五章和第六章的研究对象分别是石墨烯量子点和石墨烯弹球，这一小节对它们进行简单的介绍。

### 量子弹球

在欧几里得空间中，经典弹球系统由点粒子在有界域  $\Omega$  中的自由运动给出。在边界处，粒子发生镜像反射，即入射角和反射角相同。因此，边界决定了系统的可积、过渡混沌或者完全混沌的动力学行为，对应的代表性的弹球系统分别为圆形、蘑菇型以及运动场型。与经典弹球系统对应的量子弹球由具有（比如）狄利克雷边界条件的稳态薛定谔方程给出：

$$-\Delta\Phi_n(\mathbf{r}) = \epsilon_n\Phi_n(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Omega, \quad (2.38)$$

其中，对于  $\mathbf{r} \in \partial\Omega$  有  $\Phi_n(\mathbf{r}) = 0$ 。这里  $\Delta$  表示拉普拉斯算符，其二维形式为

$$\Delta = \left( \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} \right). \quad (2.39)$$

在薛定谔表示中，粒子的状态在构型空间由波函数  $\Phi$  描述。其中  $\int_D |\Phi(\mathbf{r})|^2 d^2r$  是发现粒子在区域  $D$  中的概率。

方程 (2.38) 定义的数学问题是著名的亥姆霍兹的本征值问题，例如，它可以描述振动膜或者扁平的微波腔。对于一些简单的有限域  $\Omega$ ，我们可以得到解析解。举例来说，对于一个长和宽分别为  $l_L$  和  $l_W$  的长方形弹球，其本征函数是

$$\Phi_{n_1,n_2}(\mathbf{r}) \propto \sin(\pi n_1 r_1 / l_L) \sin(\pi n_2 r_2 / l_W), \quad (2.40)$$

以及本征值

$$\epsilon_{n_1,n_2} = \pi^2 (n_1^2 / l_L^2 + n_2^2 / l_W^2), \quad (2.41)$$

其中  $(n_1, n_2) \in \mathbb{N}^2$ 。而对于圆形弹球，其本征波函数的极坐标表示为

$$\Phi_{m,n}(r, \theta) \propto J_m(j_{m,n}r) \exp(im\theta), \quad (2.42)$$

其中  $j_{m,n}$  为贝塞尔函数  $J_m(x)$  的第  $n$  个零点，并且  $m \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}$ 。一般来说方程 (2.38) 没有解析解，因此需要利用数值方法去计算本征值和本征函数。

## 石墨烯弹球

石墨烯弹球代表了研究经典混沌的相对论性量子表现的范式设置 [23, 27, 169]。石墨烯弹球或石墨烯薄片具有边界突然终止的限制结构。理想情况下，它相当于一个具有一定几何形状的二维无限势阱：在限制区域内势能为零，在限制区域外势能无限大。可以通过控制该区域的形状以产生独特的包括混沌在内的经典动力学。在低能量下，石墨烯中准粒子运动服从相对论性狄拉克方程。要求解任意二维域中的狄拉克方程，边界条件至关重要。因此，检查石墨烯域的边界条件是很有必要的，石墨烯晶格可以在任意方向终止（见文献 [137] 中的方程 (3.8) 和 (3.9)）。在方程文献 [137] (3.10) 的求和形式中，只有  $\lambda_{\pm} = 1$  的项形成狄拉克方程中的四分量旋量，其余项描述边界模式如何从边缘衰减。通过如上的分析，文献 [137] 作者发现，大多数的边界类型是锯齿形的。石墨烯中的交错边界势可用于模拟狄拉克粒子的质量限制。没有磁场的石墨烯系统保持时间反演对称性，这是文献 [137] 推导边界条件的起点。特别是，交错晶格势打破了子晶格的赝自旋对称性，类似自旋系统的辛对称性，但保留了真正的时间反演对称性。

石墨烯系统的一个独特特征是赝自旋，这是由于晶胞中的 A 和 B 原子分别构成两个相互错位的三角形晶格。这是描述单个相对论量子粒子行为的传统狄拉克方程所没有反映的特征。因此，对于由狄拉克方程描述的相对论量子系统，质量项（不一定无穷大）打破了真实的时间反演对称性。石墨烯系统和狄拉克费米子系统之间的这种差异可以在经典混沌弹球中的能间距统计中体现出来，其中混沌石墨烯表现出 GOE [27, 30, 137]，然而像中微子弹球这样的混沌狄拉克弹球表现 GUE [170]。

## 石墨烯量子点

量子点是一种人工制造的器件，在半导体材料中被定义为  $\sim 100 \text{ nm}$  的小区域。因量子点可用于形成自旋量子比特，这引起了许多科学家的兴趣 [171–175]，然而，自旋退相干效应极大地限制了它们在自旋量子比特上的进一步应用。石墨烯作为一种碳基材料成为自旋量子比特的极佳候选者，因为其弱自旋轨道耦合和弱超精细相互作用，有效削弱了自旋退相干效应 [176]。因此，石墨烯量子点（Graphene Quantum Dots, GQDs）多年来备受关注。除了在自旋量子比特上的潜在应用外，GQD 作为一种较新的材料，它具有光致发光和电化学发光的非凡化学、结构学、电学和可调光学特性。其新颖的特性，可以用来制造高灵敏度传感器。从物理学角度看，大量实验和理论工作发现 GQDs 为研究狄拉克费米

子的基本性质如克莱因隧道效应 [177–179]、量子光电子学 [180, 181]、Berry 相位 [182, 183]、电子-电子相互作用 [184] 以及量子混沌 [20–23, 27, 30, 185] 提供了一个重要的平台。目前，GQDs 中的量子限制研究仍然是凝聚态物理中最热门的课题之一。

### 第三章 石墨烯中的输运理论

本章以扶手椅形石墨烯为例，利用散射方法推导了石墨烯中的输运理论，并介绍了迭代格林函数的数值计算方法。石墨烯中的输运理论是进行第四章研究的必要前置部分。本文一般使用基于波函数散射理论的 Kwant 软件对量子输运问题进行数值计算 [186]。根据 Fisher-Lee 关系，非平衡态格林函数在数学形式上等同于波函数方法，因此这两种数值方法是等效的。由于早期的时候，我们使用格林函数方法对第五章中的实验数据进行了数值拟合，因此我们也对其进行简单介绍。

## 3.1 完美扶手椅形石墨烯纳米条带中的电子态

因为完美扶手椅形石墨烯纳米条带的横向动量和传输方向动量是可分解的，因此其波函数可以作为石墨烯输运器件的导线态。在讨论散射方法前，我们先对构成散射态的导线态进行详细介绍。

### 3.1.1 哈密顿量和本征波函数

石墨烯的空间单元晶胞由两个原子组成，因此其波函数是双分量（赝自旋）的。使用泡利矩阵

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

可以将石墨烯的低能哈密顿量写成

$$H = \frac{\hbar v}{i} \begin{pmatrix} \sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y & 0 \\ 0 & -\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

考虑两个谷的贡献，等效狄拉克方程可写为

$$H \phi(\mathbf{r}) = \varepsilon \phi(\mathbf{r}), \quad (3.3)$$

其中

$$\phi(\mathbf{r}) = [\phi_{\mathbf{K}^+}(\mathbf{r}), \phi_{\mathbf{K}^-}(\mathbf{r})]^T = [\phi_A^+(\mathbf{r}), \phi_B^+(\mathbf{r}), \phi_A^-(\mathbf{r}), \phi_B^-(\mathbf{r})]^T, \quad (3.4)$$

这里,  $\phi_{\mathbf{K}^+}$  和  $\phi_{\mathbf{K}^-}$  是具有两个分量的自旋波函数, 分别对应谷  $\mathbf{K}^+$  和  $\mathbf{K}^-$ , 其中  $\mathbf{K}^\pm = K_0(\pm, 0)$ 。标量波函数  $\phi_{A/B}^+$  和  $\phi_{A/B}^-$  的角标  $A$  和  $B$  分别对应着两个子晶格。

在低能近似下, 任何带状的波函数都可以描述为围绕两个不同  $\mathbf{K}$  点 (或狄拉克点)  $\mathbf{K}^\pm$ , 的快速振荡的波函数的组合, 具体形式见(2.23), 能量色散关系为

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \lambda \hbar v_F \sqrt{\kappa_{y,a}^2 + \kappa_{x,a}^2}, \quad (3.5)$$

其中纵向波数为  $\kappa_{y,a}$ , 它与自由传播有关, 因此是连续的。并且  $\lambda = \pm$ , 其中 + 对应的是导带, - 对应的是价带。由于  $x-$  方向受限, 横向波数为  $\kappa_{x,a}$ , 其中  $a$  为横向模式。

为了书写的简洁同时避免造成歧义, 我们规定:

$$\kappa_{y,a}(\varepsilon) := k_a, \quad \kappa_{y,a}(\varepsilon') := k'_a, \quad \kappa_{x,a}(\varepsilon) := q_a, \quad (3.6)$$

并且用  $s = \pm$  将传播方向进行仔细的区分, + 代表正向传播, - 代表反向传输, 因此波数  $k$  始终保持为正。这样一来, 我们可以用  $(k_a, a, s)$  或  $(\varepsilon, a, s)$  来指定唯一的导线态。在大多数情况下, 我们用后者, 并将导线态写成  $\psi_{\varepsilon,a,s}$ 。

扶手椅形石墨烯的横向波数的表达式可从附录A中方程 (A.28) 得到

$$q_a = \frac{a\pi}{W} - K_0, \quad (3.7)$$

导线宽度  $W = (M + 1)a_0$ , 其中  $M$  是  $x-$  方向  $a_0$  的数目。扶手椅石墨烯纳米带有两种情况: 金属性纳米带和半导体纳米带。前者当  $a^* = 4(M + 1)/3$  时, 为非简并的零能横向模式, 此时能量为  $\varepsilon = \lambda \hbar v_F k_{a^*}$ , 但是其他的模式都是双重简并的 (比如, 对于  $\bar{a} = 8(M + 1)/3 - a$  有  $q_{\bar{a}} = q_a$ )。对于后者, 都是非简并的模式。

### 3.1.2 导线态

扶手椅形石墨烯纳米条带中电子的本征波函数由方程(2.37)给出 [或可见附录A中(A.29)-(A.30)], 根据上述定义, 重写为

$$\varphi_{\varepsilon,a,s}^c(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_F}} \chi_{\varepsilon,a,s}^c(x) e^{isk_a y}, \quad (3.8)$$

其中

$$\chi_{\varepsilon,a,s}^c(x) = \frac{1}{\sqrt{W}} \left( \frac{|\xi|}{k_a} \right)^{1/2} \sin \left( \frac{a\pi}{W} x \right) \mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s}, \quad (3.9)$$

以及

$$\mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s} = \begin{pmatrix} (q_a - isk_a)/\xi \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

并且  $\xi = \varepsilon/(\hbar v_F)$ , 需要注意的是导线态  $\varphi_{\varepsilon,a,s}^c$  的上指标  $c$  代表的是连续形式, 我们实际用到的是将在下文进行介绍的导线态的离散形式。

## 归一化

传播方向波函数可以利用流密度进行归一化。电流密度为

$$\mathbf{j}\{\varphi_{\varepsilon,a,s}^c; \mathbf{r}\} = ev_F \varphi_{\varepsilon,a,s}^{c\dagger} \alpha \varphi_{\varepsilon,a,s}^c, \quad (3.11)$$

其中  $\alpha = (\sigma_x, \sigma_y)$ 。只有流的  $y$ -分量有意义 (因为  $\chi^c(x)$  并没有携带流) :

$$j^{(y)}\{\varphi_{\varepsilon,a,s}^c; \mathbf{r}\} = ev_F \varphi_{\varepsilon,a,s}^{c\dagger} \sigma_y \varphi_{\varepsilon,a,s}^c. \quad (3.12)$$

我们对  $y$  方向进行积分得到沿着导线的流, 可以观察到每一个导线态  $(\varepsilon, a, s)$  携带的流为

$$J^{(y)}\{\varphi_{\varepsilon,a,s}^c; y\} = \int_0^W dx j^{(y)}\{\varphi_{\varepsilon,a,s}^c; \mathbf{r}\} = \frac{e}{h} s \lambda. \quad (3.13)$$

导线态的电子流方向由谷指数以及传播方向  $s$  决定。这里, 我们将正向流定义为  $\lambda s = 1$ , 反向流定义为  $\lambda s = -1$ 。

## 导线态的正交性

验证导线态的正交性,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} \varphi_{\varepsilon,a,s}^{c\dagger}(\mathbf{r}) \varphi_{\varepsilon',a',s'}^c(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar v_F W} \left( \frac{|\xi||\xi'|}{k_a k'_{a'}} \right)^{1/2} \left( \frac{q_a + isk_a}{\xi} \frac{q_{a'} - is'k'_{a'}}{\xi'} + 1 \right) \\ & \quad \times \int_0^W \sin\left(\frac{a\pi}{W}x\right) \sin\left(\frac{a'\pi}{W}x\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(s k_a - s' k'_{a'}) y} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar v_F W} \left( \frac{|\xi||\xi'|}{k_a k'_{a'}} \right)^{1/2} \left( \frac{q_a + isk_a}{\xi} \frac{q_{a'} - is'k'_{a'}}{\xi'} + 1 \right) \\ & \quad \times \frac{W}{2} (\delta_{a,a'} - \delta_{a,-a'}) 2\pi \delta_{ss'} \delta(k_a - k'_{a'}) \\ &= \frac{1}{2} \frac{\sqrt{q_a^2 + k_a^2}}{\hbar v_F k_a} \left( \frac{1}{\lambda \lambda'} + 1 \right) \delta_{aa'} \delta_{ss'} \delta(k_a - k'_{a'}) \\ &= \delta_{aa'} \delta_{ss'} \delta(\varepsilon - \varepsilon'), \end{aligned} \quad (3.14)$$

其中我们用到了狄拉克  $\delta$ - 函数的傅立叶展开

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(\pm ikx), \quad (3.15)$$

以及

$$\int_0^W dx \sin\left(\frac{a\pi}{W}x\right) \sin\left(\frac{a'\pi}{W}x\right) = \frac{W}{2} (\delta_{aa'} - \delta_{a,-a'}), \quad (3.16)$$

这里需要注意的是,  $\delta'_{a,-a}$  被略去了, 因为横向模式为  $a$  和  $-a$  的导线态要求  $k_a = k'_{-a}$ , 因此对应不同的能量, 导致

$$\frac{1}{\hbar v_F} \left( \frac{\varepsilon}{\lambda} - \frac{\varepsilon'}{\lambda'} \right) = -\frac{16\pi}{3a_0 W}. \quad (3.17)$$

和  $\delta(k_a - k'_a) = 0$  有冲突。此外, 通过应用

$$\delta(f(x) - f(x')) = \delta(f'(x)(x - x')) = \sum_{x'} \frac{\delta(x - x')}{|f'(x')|}, \quad (3.18)$$

我们得到

$$\delta_{aa'} \delta(\varepsilon - \varepsilon') = \frac{\sqrt{k_a^2 + q_a^2}}{\lambda \hbar v_F k_a} \delta_{aa'} [\delta(k_a - k'_a) + \delta(k_a + k'_a)], \quad (3.19)$$

这里  $\delta(k_a + k'_a)$  被省略是因为  $\delta_{ss'}$  规定了导线态需要传输方向一致。

## 导线态的完备性

验证导线态的完备性

$$\begin{aligned} & \sum_{s=\pm} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \sum_a \varphi_{\varepsilon,a,s}^c(\mathbf{r}) \varphi_{\varepsilon,a,s}^c(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{\pi \hbar v_F W} \sum_{s=\pm} \sum_{a=-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\sqrt{q_a^2 + k_a^2}}{k_a} \\ & \quad \times \sin\left(\frac{a\pi}{W}x\right) \sin\left(\frac{a\pi}{W}x'\right) e^{-isk_a(y-y')} \\ &= \frac{1}{\pi \hbar v_F} \delta(x - x') \left( \int_{-\infty}^{-\varepsilon_a^\perp} d\varepsilon_{\lambda=-} + \int_{\varepsilon_a^\perp}^{+\infty} d\varepsilon_{\lambda=+} \right) \\ & \quad \times \frac{\sqrt{q_a^2 + k_a^2}}{k_a} (e^{-ik_a(y-y')} + e^{ik_a(y-y')}) \\ &= \frac{1}{\pi \hbar v_F} \delta(x - x') 2\hbar v_F \int_0^{\infty} dk_a e^{ik_a(y'-y)} \\ &= 4\delta(x - x')\delta(y - y'), \end{aligned} \quad (3.20)$$

其中用到了

$$\sum_{a=1}^{\infty} \sin\left(\frac{a\pi}{W}x\right) \sin\left(\frac{a\pi}{W}x'\right) = \frac{W}{2} \delta(x - x'), \quad (3.21)$$

以及

$$\begin{aligned} & \left( \int_{-\infty}^{+\varepsilon_a^\perp} d\varepsilon_{\lambda=-} + \int_{\varepsilon_a^\perp}^{+\infty} d\varepsilon_{\lambda=+} \right) \frac{\sqrt{q_a^2 + k_a^2}}{k_a} = \\ & = \left( \int_{-\infty}^0 \frac{-\hbar v_F k_a dk_a}{\sqrt{k_a^2 + q_a^2}} + \int_0^{+\infty} \frac{\hbar v_F k_a dk_a}{\sqrt{k_a^2 + q_a^2}} \right) \frac{\sqrt{q_a^2 + k_a^2}}{k_a} \\ & = 2 \int_0^{+\infty} dk_a, \end{aligned} \quad (3.22)$$

和方程 (3.15)。需要注意的是，系数 4 来源于导线态  $\varphi_{\varepsilon,a,s}^c$  具有两个子晶格和两个谷的自由度。

### 3.1.3 导线态的离散表示

对于连续模型来说，当模式  $a < 0$  的时候是满足既定假设的，因为满足模式  $a$  和  $-a$  的横向波函数的正交性。然而，对于实际的金属性扶手椅石墨烯，其横向能量的对称中心是  $a = a^*$ ，并不是  $a = 0$ ，即对具有  $a$  和  $-a$  的横向模式的能量并不是相等的，对于  $a$  值较大的情况，两个能量的差别会更大，因此原则上，连续模型的导线态在扶手椅形石墨烯纳米条带的应用是受到限制的。

由于石墨烯条带的横向模式的数目是有限的，连续模型不再适用实际的石墨烯模型，因此利用横向波函数的离散形式更加接近真实的石墨烯格点系统。横向波函数 (3.9) 的一部分

$$\sin\left(\frac{a\pi}{W}x\right) = \sin\left(\tilde{K}_a x\right), \quad (3.23)$$

其中

$$\begin{aligned} \tilde{K}_a &= \frac{a\pi}{W} = \frac{a\pi}{a_0(M+1)}, \\ \tilde{K}_a a_0 &= \frac{a\pi}{M+1}, \quad a = 1, 2, \dots, M. \end{aligned}$$

对于模式  $a$  取不同的值（从 0 到  $2a^*$ ），可以得到  $\tilde{K}$  和以  $a = a^*$  为参考点的实际动量  $K_a$  的值

$$\begin{cases} a = 0 \rightarrow \tilde{K}_a \approx 0 \rightarrow K_a \approx -K_{a=0}, \\ a = a^* \rightarrow \tilde{K}_a \approx K_{a=0} \rightarrow K_a \approx 0, \\ a = 2a^* \rightarrow \tilde{K}_a \approx 2K_{a=0} \rightarrow K_a \approx K_{a=0}. \end{cases} \quad (3.24)$$

可以得到  $\tilde{K}_{a=2a^*} - \tilde{K}_{a=0} \approx 2K_{a=0}$ , 其大小为倒格矢空间在  $k_x$  方向上的距离。此前, 连续模型中  $a$  的取值区间为  $(0, +\infty)$ 。然而, 对于真实的格点系统, 如果  $a > 2a^*$ , 那么说明横向波函数的波长将会小于  $2\pi/2K_{a=0} = 3a_0/4$ , 即意味着波函数将会在相同的格点间进行振荡, 这种情况不会发生, 因为与布洛赫理论冲突,  $\psi_{A/B}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} \psi_{A/B}(\mathbf{r})$ , 其中  $\mathbf{R}_n$  为晶格周期矢量, 其最小值为晶格常数  $a_0$ 。因此对于石墨烯条带, 横向模式  $a$  的范围限制为区间  $(0, 2a^*)$ , 在我们的工作中, 设定石墨烯条带的最大传输模式数目为  $M$ 。

相比于采用标准的波函数的连续形式, 我们采用混合形式, 即保持在波函数横向上的离散化, 从而固定之后采用微扰方法的模式总数。对于沿  $y-$  方向传输且横向具有  $M$  个模式的扶手椅石墨烯纳米带, 通过将 (3.8) 中的  $\vartheta(x)$  替换为离散的  $\chi(m)$ , 我们得到离散导线态

$$\varphi_{\varepsilon,a,s}(m, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_F}} \chi_{\varepsilon,a,s}(m) e^{isk_a y}, \quad (3.25)$$

其中

$$\chi_{\varepsilon,a,s}(m) = \frac{1}{\sqrt{M+1}} \left( \frac{|\xi|}{k_a} \right)^{1/2} \sin \left( \frac{\pi a m}{M+1} \right) \mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s}, \quad (3.26)$$

以及

$$\mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s} = \begin{pmatrix} (q_a - isk_a)/\xi \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

并且  $-\infty < y < \infty$ ,  $m = 0, 1, \dots, M+1$ 。虚拟格点 (如图2-6中的交叉符号)  $m = 0$  和  $m = M+1$  的加入并不会对纳米带的实际宽度  $Ma_0$  造成影响, 因为波函数在这些格点上值为 0。

每一个导线态承载的电流和 (3.13) 一致

$$\begin{aligned} J^y \{ \varphi_{\varepsilon,a,s}; y \} &= ev_F \sum_m \chi_{\varepsilon,a,s}^\dagger(m) \sigma_y \chi_{\varepsilon,a,s}(m) \\ &= \frac{ev_F}{2\pi(M+1)\hbar v_F} \frac{|\xi|}{k_a} \frac{2sk_a}{\xi} \sum_m \sin^2 \left( \frac{a\pi}{M+1} m \right) \\ &= \lambda s \frac{e}{h}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

首先，我们验证离散导线态的正交性

$$\begin{aligned}
& \sum_{m=1}^{M+1} \int_{-\infty}^{\infty} dy \varphi_{\varepsilon,a,s}^{\dagger}(m, y) \varphi_{\varepsilon',a',s'}(m, y) \\
&= \frac{1}{2\pi(M+1)\hbar v_F} \left(\frac{|\xi|}{k_a}\right)^{1/2} \left(\frac{|\xi'|}{k'_{a'}}\right)^{1/2} 2\pi \delta_{s,s'} \delta(k'_{a'} - k_a) \times \\
&\quad \left(\frac{M+1}{2}\right) \delta_{aa'} \mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s}^{\dagger} \mathcal{Z}_{\varepsilon',a',s'} \\
&= \frac{1}{2\hbar v_F} \delta_{s,s'} \delta_{a,a'} \frac{|\xi|}{k_y} \delta(k'_y - k_y) \mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s}^{\dagger} \mathcal{Z}_{\varepsilon',a',s'} \\
&= \delta_{ss'} \delta_{aa'} \delta(\varepsilon - \varepsilon'),
\end{aligned} \tag{3.29}$$

用到了横向部分的加和，详细的推导见附录C，

$$\sum_{m=0}^{M+1} \sin\left(\frac{a\pi}{M+1}m\right) \sin\left(\frac{a'\pi}{M+1}m\right) = \frac{M+1}{2} \delta_{aa'}, \tag{3.30}$$

以及 (3.18) 和 (3.19)。

其次，我们验证离散导线态的完备性，这次，我们将导线态写成自由度分辨的形式

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s}^{(A)*} \mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s}^{(A)} &= \frac{q_a^2 + k_a^2}{\xi^2} = 1, \\
\mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s}^{(B)*} \mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s}^{(B)} &= 1, \\
\mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s}^{(B)*} \mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s}^{(A)} &= \frac{q_a + isk_a}{\xi}, \\
\mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s}^{(A)*} \mathcal{Z}_{\varepsilon,a,s}^{(B)} &= \frac{q_a - isk_a}{\xi}.
\end{aligned} \tag{3.31}$$

那么，A (B) 原子的完备性为

$$\begin{aligned}
& \sum_{\varepsilon,a,s} \varphi_{\varepsilon,a,s}^{(A)*}(m, y) \varphi_{\varepsilon,a,s}^{(A)}(m', y') = \sum_{\varepsilon,a,s} \varphi_{\varepsilon,a,s}^{(B)*}(m, y) \varphi_{\varepsilon,a,s}^{(B)}(m', y') \\
&= \frac{1}{2\pi(M+1)\hbar v_F} \sum_{\varepsilon,a,s} \frac{|\xi|}{k_a} e^{isk_a(y'-y)} \sin\left(\frac{a\pi}{M+1}m\right) \sin\left(\frac{a\pi}{M+1}m'\right) \\
&= \frac{1}{2\pi(M+1)\hbar v_F} \sum_{s,a} \sin\left(\frac{a\pi}{M+1}m\right) \sin\left(\frac{a\pi}{M+1}m'\right) \times \\
&\quad \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\sqrt{q_a^2 + k_a^2}}{k_a} e^{isk_a(y'-y)} \\
&= \frac{2}{M+1} \delta(y' - y) \sum_a \sin\left(\frac{a\pi}{N+1}m\right) \sin\left(\frac{a\pi}{N+1}m'\right) \\
&= \delta_{mm'} \delta(y' - y),
\end{aligned} \tag{3.32}$$

以及 A 和 B 原子交叠波函数的完备性为

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\varepsilon,a,s} \varphi_{\varepsilon,a,s}^{(A)*}(m, y) \varphi_{\varepsilon,a,s}^{(B)}(m', y') + \sum_{\varepsilon,a,s} \varphi_{\varepsilon,a,s}^{(B)*}(m, y) \varphi_{\varepsilon,a,s}^{(A)}(m', y') \\
 &= \frac{1}{2\pi(M+1)\hbar v_F} \sum_{\varepsilon,a,s} \frac{|\xi|}{k_a} e^{isk_a(y'-y)} \times \\
 & \quad \sin\left(\frac{a\pi}{N+1}m\right) \sin\left(\frac{a\pi}{N+1}m'\right) \left(\frac{q_a + isk_a}{\xi} + \frac{q_a - isk_{y,a}}{\xi}\right) \quad (3.33) \\
 &= \frac{1}{2\pi(M+1)\hbar v_F} \sum_{s,\varepsilon,a} \lambda \frac{q_a}{k_a} \sin\left(\frac{a\pi}{M+1}m\right) \sin\left(\frac{a\pi}{M+1}m'\right) e^{isk_a(y'-y)} \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

这样一来，全部波函数的完备性为

$$\begin{aligned}
 \sum_{\varepsilon,a,s} \varphi_{\varepsilon,a,s}^\dagger(m, y) \varphi_{\varepsilon,a,s}(m', y') &= \sum_{j=A,B} \sum_{\varepsilon,a,s} \varphi_{\varepsilon,a,s}^{(j)*}(m, y) \varphi_{\varepsilon,a,s}^{(j)}(m', y') \\
 &= 2\delta_{mm'}\delta(y' - y). \quad (3.34)
 \end{aligned}$$

需要注意的是离散导线态因缺乏负的横向模式导致其完备性系数是连续导线完备性 (3.20) 系数的一半。

## 3.2 散射矩阵求解电导

我们定义角标：(+) 代表波的出射部分，(-) 代表波的入射部分，并利用它们代表向左和右的标签  $s = \pm$ 。同时用  $l$  标记导线：1 代表左导线，2 代表右导线。我们首先用新的角标来表示导线态：

$$\varphi_{l,\varepsilon,a}^{(\mp)}(m, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_F}} \chi_{\varepsilon,a,s}(m) e^{isk_a^{(\mp)}y}, \quad (3.35)$$

其中  $k_a^{(\mp)} = k_a \mp i\eta\lambda$ , 并且  $\lambda s$  为

$$\begin{array}{ccc}
 \hline
 & l=1 & l=2 \\
 (-) & 1 & -1 \\
 (+) & -1 & 1 \\
 \hline
 \end{array}$$

如果能量  $\varepsilon$  不变，横向波函数的正交性为

$$\sum_m \chi_{\varepsilon,a,s}^\dagger(m) \sigma_y \chi_{\varepsilon,a',s'}(m) = \frac{1}{2} \delta_{aa'} \left(\frac{\xi}{k_y}\right) \left(\frac{(s+s')k_y}{\xi}\right) = \lambda s \delta_{aa'} \delta_{ss'}, \quad (3.36)$$

这样一来，我们可以得到导线态的另一种形式

$$\sum_m \varphi_{l,\varepsilon,a}^{(\mp)\dagger}(m,y) \sigma_y \varphi_{l,\varepsilon,a'}^{(\mp)}(m,y) = \frac{1}{2\pi\hbar v_F} \lambda s \delta_{aa'} \delta_{ss'}, \quad (3.37)$$

其中

$$\sum_m \varphi_{l,\varepsilon,a}^{(\mp)\dagger}(m,y) \sigma_y \varphi_{l,\varepsilon,a'}^{(\pm)}(m,y) = 0. \quad (3.38)$$

### 3.2.1 散射态

我们利用导线态去构建散射态

$$\Psi_{1,\varepsilon,a}(m,y) = \begin{cases} \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(m,y) + \sum_{b=1} r_{ba} \varphi_{1,\varepsilon,b}^{(+)}(m,y), & y < 0 \\ \sum_{b=1} t_{ba} \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)}(m,y), & y > 0 \end{cases} \quad (3.39)$$

$$\Psi_{2,\varepsilon,a}(m,y) = \begin{cases} \sum_{b=1} t'_{ba} \varphi_{1,\varepsilon,b}^{(+)}(m,y), & y < 0 \\ \varphi_{2,\varepsilon,a}^{(-)}(m,y) + \sum_{b=1} r'_{ba} \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)}(m,y), & y > 0 \end{cases} \quad (3.40)$$

需要注意的是传输/反射系数  $t(t')/r(r')$  是一个简化的形式，比如

$$t = t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

表示传输/反射系数对 A 和 B 格点是一致的。可以得到  $t^\dagger = t^*$ 。

### 3.2.2 石墨烯中的 Fisher-Lee 关系

我们利用出射散射态构建一组基矢。因此，散射态的格林函数可以展开为

$$\mathcal{G}(m,y,m',y',\varepsilon) = \sum_{\bar{l}}^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{\varepsilon} \sum_{\bar{a}} \frac{\Psi_{\bar{l},\bar{\varepsilon},\bar{a}}(m,y) \Psi_{\bar{l},\bar{\varepsilon},\bar{a}}^\dagger(m',y')}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}}. \quad (3.42)$$

设定  $y' < 0$  和  $y > 0$ , 通过计算

$$\begin{aligned}
\mathcal{U} &= \sum_m \sum_{m'} \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)\dagger}(m, y) \sigma_y \mathcal{G}(m, y, m', y', \varepsilon) \sigma_y \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(m', y') \\
&= \sum_{m,m'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \sum_{\bar{c}} \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)\dagger}(m, y) \sigma_y \times \\
&\quad \left\{ \left( \sum_{\bar{d}} t_{\bar{d}\bar{c}} \varphi_{2,\bar{\varepsilon},\bar{d}}^{(+)}(m, y) \right) \left( \varphi_{1,\bar{\varepsilon},\bar{c}}^{(-)}(m', y') + \sum_{\bar{d}'} r_{\bar{d}'\bar{c}} \varphi_{1,\bar{\varepsilon},\bar{d}'}^{(+)}(m', y') \right)^\dagger + \right. \\
&\quad \left. \left( \varphi_{2,\bar{\varepsilon},\bar{c}}^{(-)}(m, y) + \sum_{\bar{d}} r'_{\bar{d}\bar{c}} \varphi_{2,\bar{\varepsilon},\bar{d}}^{(+)}(m, y) \right) \left( \sum_{\bar{d}'} t'_{\bar{d}'\bar{c}} \varphi_{1,\bar{\varepsilon},\bar{d}'}^{(+)}(m', y') \right)^\dagger \right\} \sigma_y \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(m', y') \\
&= \left( \frac{1}{2\pi\hbar v_F} \right)^2 \sum_{m,m'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \left( \left[ e^{isk_b^{(+)}y} \chi_{\varepsilon,b,s}(m) \right]_{\lambda s=1} \right)^\dagger \sigma_y \sum_{\bar{c}} \\
&\quad \left\{ \left( \sum_{\bar{d}} t_{\bar{d}\bar{c}} \left[ e^{i\bar{s}\bar{k}_{\bar{d}}^{(+)}y} \chi_{\bar{\varepsilon},\bar{d},\bar{s}}(m) \right]_{\bar{\lambda}\bar{s}=1} \right) \times \right. \\
&\quad \left( \left[ e^{i\bar{s}\bar{k}_{\bar{c}}^{(-)}y'} \chi_{\bar{\varepsilon},\bar{c},\bar{s}}(m') \right]_{\bar{\lambda}\bar{s}=1} + \sum_{\bar{d}'} r'_{\bar{d}'\bar{c}} \left[ e^{i\bar{s}'\bar{k}_{\bar{d}'}^{(+)}y'} \chi_{\bar{\varepsilon},\bar{d},\bar{s}'}(m') \right]_{\bar{\lambda}\bar{s}'=-1} \right)^\dagger + \\
&\quad \left. \left( \left[ e^{i\bar{s}'\bar{k}_{\bar{c}}^{(-)}y} \chi_{\bar{\varepsilon},\bar{c},\bar{s}'}(m) \right]_{\bar{\lambda}\bar{s}'=-1} + \sum_{\bar{d}} r'_{\bar{d}\bar{c}} \left[ e^{i\bar{s}\bar{k}_{\bar{d}}^{(+)}y} \chi_{\bar{\varepsilon},\bar{d},\bar{s}}(m) \right]_{\bar{\lambda}\bar{s}=1} \right) \times \right. \\
&\quad \left. \left( \sum_{\bar{d}'} t'_{\bar{d}'\bar{c}} \left[ e^{i\bar{s}'\bar{k}_{\bar{d}'}^{(+)}y'} \chi_{\bar{\varepsilon},\bar{d}',\bar{s}'}(m') \right]_{\bar{\lambda}\bar{s}'=-1} \right)^\dagger \right\} \sigma_y \left[ e^{isk_a^{(-)}y'} \chi_{s,\varepsilon,a}(m') \right]_{\lambda s=1}, 
\end{aligned} \tag{3.43}$$

其中, 我们定义

$$\begin{aligned}
\lambda &= \text{sgn}(\varepsilon), \quad \varepsilon = \lambda \hbar v_F \sqrt{\bar{k}_..^2 + q_..^2}, \\
\bar{\lambda} &= \text{sgn}(\bar{\varepsilon}), \quad \bar{\varepsilon} = \bar{\lambda} \hbar v_F \sqrt{\bar{k}_..^2 + \bar{q}_..^2}.
\end{aligned} \tag{3.44}$$

并应用附录B.1中的能量积分, 可以得到

$$U = \frac{-2\pi i}{(2\pi\hbar v_F)^2} \sum_{\bar{c}} t_{b\bar{c}} \lambda s \delta_{\bar{c}a} \lambda s = \frac{-i}{2\pi\hbar^2 v_F^2} t_{ba}. \tag{3.45}$$

这样一来我们得到石墨烯中的 Fisher-Lee 关系

$$t_{ba} = 2\pi i (\hbar v_F)^2 \sum_{m,m'} \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)\dagger}(m, y) \sigma_y G(m, y, m', y'; \varepsilon) \sigma_y \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(m', y'). \tag{3.46}$$

### 3.2.3 散射态的流

对于  $y < 0$ ,

$$\begin{aligned}
 J^y\{\Psi_{1,\varepsilon,a}; y\} &= ev_F \sum_m \Psi_{1,\varepsilon,a}^\dagger(m, y) \sigma_y \Psi_{1,\varepsilon,a}(m, y) \\
 &= \frac{e}{2\pi\hbar} \left\{ e^{-isk_a^{(-)*}y + isk_a^{(-)}y} \sum_m \chi_{\varepsilon,a,s}^\dagger(m) \sigma_y \chi_{\varepsilon,a,s}(m) + \right. \\
 &\quad \left. + \sum_b \sum_{b'} r_{ba}^* r_{b'a} e^{-is'k_b^{(+)*}y + is'k_{b'}^{(+)}y} \chi_{\varepsilon,b,s'}(m) \sigma_y \chi_{\varepsilon,b',s'}(m) \right\} \\
 &= \frac{e}{2h} \left( 1\lambda s - \sum_b r_{ba}^* r_{ba} \delta_{bb'} \lambda s' \right) \\
 &= \frac{e\lambda}{2h} [1 - (r^\dagger r)_{aa}],
 \end{aligned} \tag{3.47}$$

其中运用了 (3.36)。相似的处理可以得到

$$\begin{cases} J^{(y)}\{\Psi_{1,\varepsilon,a}; y\} = \frac{e\lambda}{2h} [1 - (r^\dagger r)_{aa}], & y < 0, \\ J^{(y)}\{\Psi_{1,\varepsilon,a}; y\} = \frac{e\lambda}{h} (t^\dagger t)_{aa}, & y > 0, \\ J^{(y)}\{\Psi_{2,\varepsilon,a}; y\} = \frac{e\lambda}{h} (t'^\dagger t')_{aa}, & y < 0, \\ J^{(y)}\{\Psi_{2,\varepsilon,a}; y\} = \frac{e\lambda}{h} [1 - (r'^\dagger r')_{aa}], & y > 0. \end{cases} \tag{3.48}$$

### 3.2.4 电导

散射态的平均占据可以由费米-狄拉克分布

$$f(E) = \left( 1 + \exp\left(\frac{E - \mu_l}{k_B\tau_l}\right) \right)^{-1}, \tag{3.49}$$

给出, 其中  $\tau_l$  是温度,  $\mu_l$  是化学势,  $l = 1$  表示左电子池,  $l = 2$  表示右电子池。因为我们不研究热电子效应, 所以我们将两个电子池设定为相同的温度:  $\tau_1 = \tau_2 = \tau$ 。施加的偏压为  $\lambda eV_{SD} = (\mu_1 - \mu_2)$ 。

从左导线中传播的散射态的平均占据为  $f_1$ 。我们知道每一个散射态携带  $e\lambda/h$  进入右导线, 并且都到达了右电子池。从左到右的总电流是通过加和所有

的  $(1, \varepsilon, a)$  的态与占据概率的积,

$$\begin{aligned} I_{1 \rightarrow 2} &= \sum_{\{1, \varepsilon, a\}} f_1(\varepsilon) J^{(y)} \{\Psi_{1, \varepsilon, a}; y\} \\ &= 2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \sum_a^{N(\varepsilon)} f_1(\varepsilon) \frac{e\lambda}{h} \\ &= \frac{2e\lambda}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f_1 \text{Tr}(t^\dagger t), \end{aligned} \quad (3.50)$$

额外的系数 2 来源于无磁场时谷的双重简并。相似的, 从右到左的总电流为

$$I_{2 \rightarrow 1} = \frac{2e\lambda}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f_2 \text{Tr}(t^\dagger t). \quad (3.51)$$

因此通过器件的总共电流为

$$I = I_{1 \rightarrow 2} - I_{2 \rightarrow 1} = \frac{e\lambda}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon (f_1 - f_2) \text{Tr}(t^\dagger t). \quad (3.52)$$

因为  $\mu_1$  和  $\mu_2$  的绝对值都远大于  $|\pm \varepsilon_0^{(\perp)}|$ , 可以得到

$$I \approx \frac{e\lambda}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon (f_1 - f_2) t^\dagger t = \frac{2e\lambda}{h} (\mu_1 - \mu_2) = \frac{2e^2 \lambda^2}{h} \text{Tr}(t^\dagger t) V_{SD}, \quad (3.53)$$

可得电流对施加的偏压为线性的。但是, 如果  $t^\dagger t$  变化的比较剧烈, 对于偏压远比热力学能量小的情况, 比如,  $\mu_1 - \mu_2 = |e|V_{SD} \ll k_B\tau$ , 可以通过微分约化得到

$$f_1 - f_2 \approx (\mu_1 - \mu_2) \frac{\partial f_1}{\partial \mu_1} \Big|_{\mu_1=\mu_2}, \quad (3.54)$$

仍得到线性响应

$$I \approx \frac{2e^2}{h} V_{SD} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon F_{th} \text{Tr}(t^\dagger t), \quad (3.55)$$

其中  $F_{th}$  是热力学展宽函数 (对于小的偏压  $\mu_1 \approx \mu_2 \approx E$ ):

$$F_{th}(\varepsilon) = -\frac{\partial f_l}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial f}{\partial \mu_l} = \frac{(1/k_B\tau) \exp(\frac{\varepsilon-E}{k_B\tau})}{(1 + \exp(\frac{\varepsilon-E}{k_B\tau}))^2}. \quad (3.56)$$

在零温度限制下  $F_{th}$  变成狄拉克  $\delta$  函数  $\delta(\varepsilon - E)$  并且重新得到 (3.53)。总而言之, 条件

$$eV_{SD} \ll k_B\tau + \Delta\varepsilon_c \quad (3.57)$$

其中  $\Delta\varepsilon_c$  是传输的变化尺度 (比如, 关联能量), 我们将以上过程称为电导的线性响应机制。我们定义电导

$$G^{(0)} = \frac{\partial I}{\partial V_{SD}} = \frac{2e^2}{h} T, \quad (3.58)$$

其中传输系数  $T$  被定义为

$$T = \sum_{a,b} t_{ba}^* t_{ba} = \text{Tr}(t^\dagger t). \quad (3.59)$$

这就是二端口的 Landauer 公式。

### 3.3 求解量子输运的数值方法

#### 3.3.1 格林函数方法

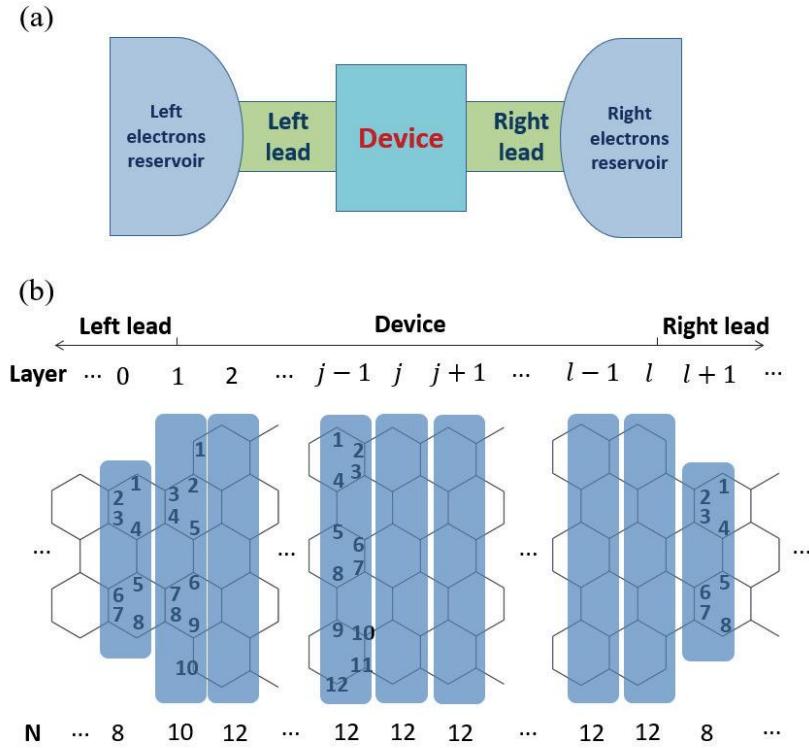


图 3-1: (a) 器件和电子池的示意图。(b) 用于计算格林函数的紧束缚哈密顿量构造示意图。该结构由第 1 层到第  $l$  层组成。左导线从第  $-\infty$  层到第 0 层组成，右导线从  $l + 1$  层到第  $\infty$  层。图底部的数字表示每层中的碳原子数。

为了测量石墨烯器件的输运特性，其电导通过 Landauer-Büttiker 公式 (3.58) 计算。在低温下， $-\partial f / \partial E \approx \delta(E - E_F)$ ，那么  $T_G(E_F) = T(E_F)$ ，由此可得  $G(E_F) = (2e^2/h)T(E_F)$ 。在这项工作中，我们专注于低温输运的研究，或者等效地研究低温传输系数  $T$ 。

我们应用格林函数计算石墨烯器件的传输系数  $T(E)$ [187, 188]。石墨烯中电子的包括跳跃项到第三近邻原子的紧束缚哈密顿量的形式 [189, 190]，

$$H = t \sum_{i,j \in \text{n.n.}} c_i^\dagger c_j + t' \sum_{i,j \in \text{n.n.n.}} c_i^\dagger c_j + t'' \sum_{i,j \in \text{t.n.n.}} c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}, \quad (3.60)$$

其中  $t, t', t''$  分别代表最近邻 (n.n.)，次近邻 (n.n.n.) 和三近邻 (t.n.n.) 耦合能量分别取 2.8 eV, 0.28 eV 和 0.07 eV [189–191]。需要注意的是，当考虑次近邻

相互作用的时候，狄拉克点将偏移至  $3t'$ [30, 189]。

通常，输运中的器件被看作一个散射区域连接通过左右导线连接两个大的电子池 [图 3-1 (a) ]。在我们的模型中，为了消除无意义的散射，假定导线是半无限长的，并且系统可以分成三个部分：左导线，器件和右导线。器件包括了所有不规则的部分，以便左右导线的宽度一致，

$$H = \begin{pmatrix} H_L & H_{LD} & 0 \\ H_{DL} & H_D & H_{DR} \\ 0 & H_{RD} & H_R \end{pmatrix}. \quad (3.61)$$

在上面的哈密顿量中， $H_D$  是维度为  $N_D \times N_D$  的有限大小的方阵，其中  $N_D$  是器件中原子的数目， $H_{L,R}$  分别是左右导线的哈密顿量。器件和导线之间的耦合由矩阵  $H_{LD}, H_{DL}, H_{DR}$ , 和  $H_{RD}$  表示。

使用层索引作为下标，哈密顿量可以用层哈密顿量来写。例如，对于在图 3-1 (b)，有

$$H_D = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & 0 & 0 & 0 \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \ddots & \dots & 0 \\ 0 & H_{j-1,j-2} & H_{j-1,j-1} & H_{j,j-1} & 0 \\ 0 & H_{j,j-1} & H_{j,j} & H_{j+1,j} & 0 \\ 0 & H_{j+1,j} & H_{j+1,j+1} & H_{j+2,j+1} & 0 \\ 0 & \dots & \ddots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & H_{l-1,l-2} & H_{l-1,l-1} & H_{l-1,l} \\ 0 & 0 & 0 & H_{l,l-1} & H_{l,l} \end{pmatrix},$$

其中，比如

$$H_{11} = \begin{pmatrix} 0 & t & t' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t & 0 & t & t' & t'' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t' & t & 0 & t & t' & t'' & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t' & t & 0 & t & t' & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t'' & t' & t & 0 & t & t' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t' & t & 0 & t & t' & t'' & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t'' & t' & t & 0 & t & t' & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t' & t & 0 & t & t' \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t'' & t' & t & 0 & t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t' & t & 0 \end{pmatrix},$$

是层 1 的哈密顿量矩阵，其大小为  $N_1 \times N_1 = 10 \times 10$ ，并且

$$H_{01} = \begin{pmatrix} t'' & t' & t & t' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t' & t'' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t'' & t' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t' & t & t' & t'' & t' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t' & t'' & t' & t & t' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t' & t'' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t'' & t' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t' & t & t' & t'' \end{pmatrix},$$

是层 1 到层 0 的耦合矩阵，其大小为  $N_0 \times N_1 = 8 \times 10$ 。注意到  $H_{00} = H_{-1,-1} = H_{-2,-2} = \dots = H_{l+1,l+1} = H_{l+2,l+2} = \dots$ 。在该哈密顿量， $t$  是仅有的参数 ( $t'$  和  $t''$  可以写成以  $t$  单位的量)。

格林  $G(E)$  定义为

$$(E^\dagger I - H)G(E) = I, \quad (3.62)$$

其中  $I$  为单位矩阵， $E^\dagger = E + i\eta$ ，其中 ( $\eta \rightarrow 0^+$ )。这样一来， $G(E) = (E^\dagger I - H)^{-1}$ 。这里需要注意的是  $G$  和  $H$  分别是整个系统的格林函数和哈密顿量，并且是无限的。在包括了导线和器件耦合后，格林函数可以写为

$$G_D(E) = (E^\dagger I - H_D - \Sigma_L - \Sigma_R)^{-1}, \quad (3.63)$$

其中  $\Sigma_L$  和  $\Sigma_R$  分别是由耦合到左右导线导致的自能，

$$\Sigma_L \equiv H_{DL}G_LH_{LD},$$

$$\Sigma_R \equiv H_{DR}G_RH_{RD},$$

其中  $G_{L,R}$  分别为左右导线的格林函数。需要注意的是自能仅在与导线相邻的器件中的原子上添加非零元素 [192]，比如

$$\Sigma_L = \begin{pmatrix} \Sigma_{L,1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \Sigma_R = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \Sigma_{R,l} \end{pmatrix},$$

其中  $\Sigma_{L,l}$  和  $\Sigma_{R,l}$  分别对应于层 1 和层  $l$  的自能，并且可以通过标准的步骤进行计算 [188, 193]。

现在，方程 (3.63) 中的所有矩阵都具有  $N_D \times N_D$  的大小，其中  $N_D$  是器件的大小 (原子的数目)。左右导线和器件的耦合矩阵  $\Gamma_{L,R}$  是相应的延迟和超前自能的差：

$$\Gamma_{L,R} = i[\Sigma_{L,R} - (\Sigma_{L,R})^\dagger].$$

系统的输运系数为

$$T(E) = \text{Tr}(\Gamma_L G_D \Gamma_R G_D^\dagger). \quad (3.64)$$

器件的局域态密度 (Local Density of States, LDOS) 是一个  $N_D$  大小的矢量, 为

$$\rho = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\text{diag}(G_D)]. \quad (3.65)$$

在紧束缚方法中, LDOS 矢量的元素给出了器件区域中的波函数的概率分布。

流密度分布可以从相邻格点  $i$  和  $j$  的局域流中得到 [194],

$$J_{i \rightarrow j} = \frac{4e}{h} \text{Im}[H_{D,ij} C_{ji}^n(E)], \quad (3.66)$$

其中  $C^n = G_D \Gamma^L G_D^\dagger$  是电子关联函数,  $H_{ji}$  是哈密顿量的矩阵元素。

尽管上述计算机制的物理图像很清楚, 但是计算效率很低, 因为运用了很多  $N_D \times N_D$  矩阵的求逆运算。因此, 一个高效的迭代方法应用在了本论文的计算中。尤其是, 可以将每一层  $l$  看作是“器件”, 而其他的层可以看作是模式数不一致的导线。举例来说, 对于第 1 层, 由于其从左导线的自能  $\Sigma_{L,1}$  是知道的, 利用迭代方法,

$$\Sigma_{L,j+1} = H_{j+1,j} (E^\dagger I - H_{j,j} - \Sigma_{L,j})^{-1} H_{j,j+1},$$

由于与左侧晶格耦合而产生的自能,  $\Sigma_{L,j}$ , 对于每一层  $j$  都可以被计算。相似的, 由于  $\Sigma_{R,l}$  是知道的, 可得

$$\Sigma_{R,j-1} = H_{j-1,j} (E^\dagger I - H_{j,j} - \Sigma_{L,j})^{-1} H_{j,j-1},$$

由于与右侧晶格耦合而产生的自能,  $\Sigma_{R,j}$ , 对于每一层  $l$  也是可以被计算的。这样一来, 对每一层  $j$ , 由于左右边的耦合而产生的自能  $\Sigma_{L,j}$  和  $\Sigma_{R,j}$  都是知道的。那么, 和方程 (3.63) 相似, 可以计算出该层的完整格林函数 (将此层视为器件),

$$G_j(E) = (E^\dagger I - H_{j,j} - \Sigma_{L,j} - \Sigma_{R,j})^{-1}. \quad (3.67)$$

耦合矩阵为:

$$\Gamma_{L,j} = i[\Sigma_{L,j} - (\Sigma_{L,j})^\dagger],$$

$$\Gamma_{R,j} = i[\Sigma_{R,j} - (\Sigma_{R,j})^\dagger].$$

因此, 传输系数为

$$T_j(E) = \text{Tr}(\Gamma_{L,j} G_j \Gamma_{R,j} G_j^\dagger). \quad (3.68)$$

层  $l$  的波函数的概率分布（LDOS 矢量）为

$$\rho_j = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\text{diag}(G_j)]. \quad (3.69)$$

流密度分布为

$$J_{i \rightarrow k} = \frac{4e}{h} \text{Im}[H_{jj,ik} C_{j,ki}^n(E)], \quad (3.70)$$

其中  $C_j^n = G_j \Gamma^{L,j} G_j^\dagger$  是电子关联函数， $H_{jj,ki}$  是具有角标  $i$  和  $k$  的哈密顿矩阵元素。

### 3.3.2 简介 Kwant 和 Pybinding

**Kwant** 是一个开源的 Python 软件包，可用于计算凝聚态物理系统的电子结构和输运性质 [186]。kwant 应用的是基于波函数散射理论的数值方法，结合紧束缚模型从而可以模拟包括石墨烯、拓扑绝缘体和超导体等材料的性质。

**Kwant** 的计算原理可以简单的概括为以下几个步骤：

- 定义晶格结构：Kwant 允许用户使用 Python 脚本来描述所研究材料的晶格结构和几何形状。用户可以定义晶格的基元、格点坐标、相邻格点之间的距离和跳跃能等信息。
- 构建哈密顿算符：根据紧束缚模型，Kwant 使用定义好的晶格结构来构建系统的哈密顿算符。这个算符描述了电子在晶格中的行为，并且它是一个矩阵形式的表达式。
- 计算输运：Kwant 采用散射矩阵方法来计算材料的电子传输性质，例如电导、散射波函数、电子态密度等。
- 分析结果：Kwant 提供了各种分析工具，用户可以使用这些工具来分析计算结果，例如绘制能带图、局域电子态密度分布图等。

Kwant 已经成为了一个十分流行的计算量子输运及其相关物理量的实用工具，已被用于众多的研究领域。该软件现在得到了学术界的认可和好评，并被广泛使用。

**Pybinding** 也是一个基于 Python 的开源软件包，旨提供一个快速且灵活的模拟平台 [195]。它的主要功能是使用紧束缚模型对晶体结构进行建模，并可以通过 Kwant 软件接口计算模型的电子结构和输运性质。



## 第四章 石墨烯中扫描门显微镜的理论和数值研究

第三章中，我们推导了石墨烯中基于散射方法的输运理论。通过将扶手椅形石墨烯条带的波函数作为导线态，既而利用导线态构建散射态。利用出射散射态构建格林函数，结合石墨烯中的 Fisher-Lee 关系可得到透射矩阵，最后通过 Landauer 公式得到电导。由于 SGM 实际上是一种扰动技术，其探针对系统的影响可以利用戴森方程将其包含在散射态的格林函数内，既而结合石墨烯中的 Fisher-Lee 关系就可以得到加入探针后的透射矩阵，扣除了未加扰动时系统的电导就可以得到 SGM 探针影响下的电导修正。由于扶手椅形石墨烯条带的电导平台上的 SGM 电导修正为零，因此我们将电导修正展开到了二阶项。对于扶手椅形纳米条带，我们能更进一步的发展该理论，比如给定探针诱导电势的具体形式，我们可以得到能够进行数值验证的结果。但是，研究通过对石墨烯条带进行形状限制导致的收缩结构时，因为其中并没有解析的描述，我们只能对其进行数值研究从而验证 SGM 电导修正理论对该类结构的一般理论。此外，因为收缩结构由收缩宽度、收缩长度以及导线宽度来定义，而诱导电势由多种参数决定，比如势的强度、宽度以及位置，因此对该类系统的数值研究必定是一个系统庞杂的任务。为此，我们研究的主体内容紧紧围绕着 SGM 电导修正理论的主要结果，并对其中有趣的现象进行适当展开。因为 SGM 技术最常用于对二维系统的调制和成像，因此我们最后也讨论了其成像适用的条件。由于锯齿形石墨烯条带的横向和传输方向动量不可分解，因此并不能对其应用上述 SGM 电导修正的解析方法。但出于对工作完整性的考虑，我们也对其进行了数值计算，并和扶手椅形石墨烯结果进行了比较。总之，本章的工作比较系统且全面的探索了与 SGM 电导修正有关的问题，对当前 SGM 在石墨烯中的理论和实验研究都有一定的价值。

### 4.1 简介

石墨烯自被发现以来，因为其电子的赝相对论性色散关系及其特殊的高迁移率已成为一个揭示新物理特性的独特的平台 [9, 10]。它的二维碳原子晶格导致低能下的无间隙的线性色散关系，对应的电子，即无质量狄拉克费米子，可以用低能下的二维狄拉克方程描述 [160]。了解量子相干态下高迁移率石墨烯纳米结构的电子传输特性的基本原理具有重要的基础研究意义，并且对未来的纳米电子学器件的应用至关重要 [196]。各种实验技术被运用到了对此问题的探索之中，

比如，扫描门显微镜，最初是应用于对半导体异质结上的 QPC 附近的 2DEG 的研究 [46]。

在 SGM 技术中，由极化的金属原子力显微镜尖端组成的探针扰动样品的局部静电势，同时测量电子输运。相较于标准的相干输运测量，SGM 提供的与探针位置相关的电导的空间分布给出了额外的输运信息 [197]。在石墨烯固有的二维结构中形成的 2DEG 尤其适用于扫描探针技术。一些研究小组利用 SGM 技术探测了石墨烯样品中的局域电荷态 [77, 82, 198] 和不均匀电荷分布 [199]。此外，石墨烯中的回旋轨道 [74] 和疤痕态波函数 [200] 也可以通过 SGM 技术进行观测。

对石墨烯薄片中狭窄收缩结构的早期研究 [201] 表明 SGM 可用于研究石墨烯纳米结构，结果表明当探针位于狭窄位置时电导会受到相当大的影响。最近关于微米尺寸收缩结构的系统实验 [88, 202] 表明克莱因隧穿现象大大改变了探针的效应，并且可能导致在探针尖端电位存在的情况下出现的 n-p-n 势分布引起的 Veselago 透镜化。SGM 还被用来研究石墨烯收缩结构边缘量子霍尔效应的拓扑失效 [203, 204]。

石墨烯纳米收缩结构 (Graphene Nanoconstriction, GNC) 中的 Veselago 效应的理论研究已通过光线追踪方法和紧束缚模型数值计算得到解决 [202, 204]。具有不同几何特征的石墨烯纳米带 (GNR) 和 GNCs 中的 SGM 响应在数值上进行了非常深入的研究 [205, 206]。在这种情况下，为了解决实验中可能遇到的参数和几何特征的多样性，开发一种 SGM 响应的理论方法十分重要。因此，在这项工作中，我们系统的研究了探针诱导的电位对有无额外形状限制的石墨烯纳米条带电导修正。特别是，我们将在非侵入性探针 [103, 104] 中有效的扰动理论推广到石墨烯的情况，并推导出关于探针强度的低阶近似下的电导修正。此外，我们使用紧束缚方法在数值上验证了上述理论并研究了侵入性探针的机制。

我们在小节 4.2 系统介绍了电子输运并在小节 4.2.2 描述了探针诱导的势能。小节 4.3 展示了低探针强度的微扰方法，并且在小节 4.4.1 和 4.4.2 中结合数值结果讨论了扶手椅形边缘的 GNRs 和 GNCs 在加入探针后的电导响应，同时也讨论了高强度探针的数值结果。锯齿形边界的结果在小节 4.4.3 中被讨论。最后给出了本章的小结（小节 4.5）。

## 4.2 石墨烯纳米结构中的电子输运

该小节主要介绍本章节所需的量子输运的基本知识，并介绍本论文研究的模型的定义，探针诱导的势的定义。首先，我们介绍研究模型在不加 SGM 扰动

的量子输运情况，分析与其相关的电导量子化、电导传输本征模式分解等问题。随后，我们对其施加了 SGM 扰动，并以一个单层石墨烯条带的 SGM 扫描图为例，用以说明本文研究的内容以及研究方法。

#### 4.2.1 没有 SGM 探针的情况

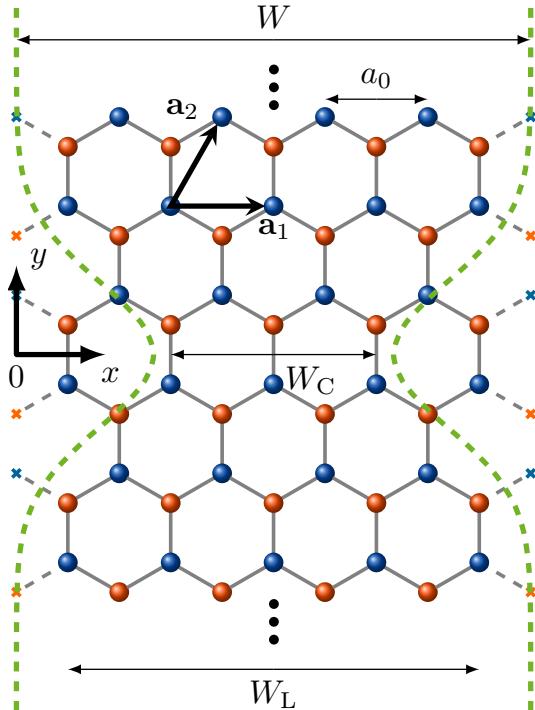


图 4-1: 扶手椅形 GNR 沿着竖直方向 ( $y$ ) 传播，宽度为  $W_L$ 。红点和蓝点分别表示蜂窝状晶格元胞内两个不同亚晶格的碳原子。交叉符号代表条带外的辅助格点，其中施加了波函数为零的边界条件，并定义了有效宽度  $W = W_L + a_0$ 。蜂窝状格点的基矢 ( $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ )，其中  $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a_0$ 。坐标系  $x - y$  的选择使得布里渊区具有两个不等价顶角  $\mathbf{K} = (4\pi/3a_0)(1, 0)$ ，其中  $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$ 。石墨烯纳米收缩结构几何形状通过方程式 (4.2) 确定，在图中绿色虚线外施加波函数为零的条件来定义，其中  $W_C$  是 GNC 中最窄的宽度。

我们选择矢量  $\mathbf{a}_1 = a_0(1, 0)$  和  $\mathbf{a}_2 = a_0(1/2, \sqrt{3}/2)$  来描述石墨烯蜂窝状结构的特征，其中  $a_0 = \sqrt{3}a_{NN}$  并且  $a_{NN} \simeq 0.142 \text{ nm}$  是最近邻原子的间距。根据图 4-1 中的约定，元胞中的两个碳原子（图中用红色和蓝色的点表示）分别位于  $(0, 0)$  和  $a_0(0, 1/\sqrt{3})$ 。相应的第一布里渊区，由倒格矢  $\mathbf{b}_1 = (2\pi/a_0)(1, -1/\sqrt{3})$

和  $\mathbf{b}_2 = (4\pi/\sqrt{3}a_0)(0, 1)$  定义，在  $\mathbf{K} = (4\pi/3a_0)(1, 0)$  具有两个不相等的顶角，并且  $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$ 。

我们通过最近邻紧束缚模型描述  $x - y$  平面上碳原子  $2p_z$  轨道中电子的运动。在这样的模型中，低能态的物理性质由哈密顿量算符和两个位于第一布里渊区的  $\mathbf{K}$  和  $\mathbf{K}'$  的狄拉克点描述，其中赝旋量的两个分量分别对应于两个亚晶格处的波函数值。这两个谷（狄拉克锥），具有线性的赝相对论性的色散关系并且其（费米）速度为  $v_F = \sqrt{3}a_0t/2\hbar \simeq 10^8 \text{ cm/s}$ ，在块状石墨烯中是独立的，但它们通过有限尺寸样品中的边界条件进行耦合。在本章的工作中，我们使用 Kwant 程序包 [186] 进行数值计算，采用紧束缚模型去约束几何形状，并且我们使用的解析方法的研究对象是低能近似下的赝相对论性电子。

研究石墨烯中相干电子输运的最简单结构为准一维条带，即连接到电子储池（源极和漏极）的 GNR。对制造原子尺度上精确的 GNR 的研究 [207–212] 是在单层石墨烯成功分离后不久开始的 [9]，而对石墨的理论表征 [213]，早于以往的实验成果。特别是，完美 GNR 的电子和输运特性已被证明取决于带边缘的原子排列 [168, 214–219]，并且会被缺陷强烈的干扰 [187, 188, 220–222]。自从最初表现出次带量子化形成迹象的扩散条纹出现以来，制备程序已经取得了可观的进展 [207, 209]，并且现在有可能制造非常窄（宽度为 1 nm 的量级）的具有原子精度和特定的扶手椅或锯齿形边缘的 GNR [223, 224]（尽管目前对非常小的样品的量子输运测量似乎仍具有挑战性）。有关最近关于 GNRs 的进展的综述，请参阅文献 [225]。

在图 4-1 的约定中，沿着  $y$  方向切割条带的边缘可以产生扶手椅形 GNR（如图 2-6），沿着  $x$  方向切割会产生锯齿形 GNR（如图 2-5）。对于扶手椅形 GNR，波函数会在边界处的两种子晶格上消失，而锯齿形 GNR 则在每一个边上的一种类型的子晶格上消失。这里  $W_L$  是石墨烯条带的宽度，为了简单，我们定义等效宽度为  $W = W_L + a_0$ 。在章节 3.1 中，我们展示了扶手椅形 GNRs 的电子本征态，这为通过石墨烯纳米结构进行量子输运的散射方法以及 SGM 响应的扰动方法的发展提供了有用的基础。

在我们的研究中，我们考虑线性响应的量子输运机制，其中施加的小的源-漏极上的偏压  $V_{SD}$  导致小的电流  $I$ ，并且我们研究的是零温下的线性电导  $G = I/V_{SD}$ 。假设散射体连接两个导线，这些导线可以被认为是具有  $N$  个传输模式的半无限长的纳米带，传输通道用指标  $a$  表示，二端口 Landauer 公式为

$$G = G_0 \operatorname{Tr}[t^\dagger t], \quad (4.1)$$

其中  $G_0 = 2e^2/h$  为量子电导，并且  $t_{ba}$  是费米能  $E$  下的  $N \times N$  透射矩阵  $t$  的矩

阵元。

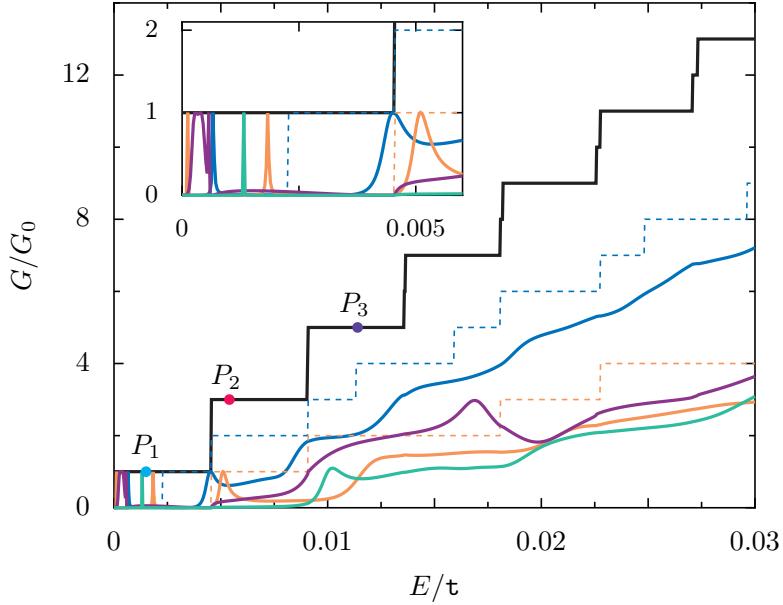


图 4-2: 对于不同的扶手椅 GNRs 和 GNCs 的以费米能量 (用跳跃能  $t = 2\hbar v_F / \sqrt{3}a_0$  进行标度) 为函数的电导 (以量子电导  $G_0 = 2e^2/h$  为单位)。粗的黑色实线对应于宽度  $W_L = 599 a_0 \simeq 147.3$  nm 的金属性扶手椅 GNR。粗的各种颜色的实线表示定义在方程式(4.2)不同形状的 GNCs 的电导, 分别为  $W_C = 399 a_0$ ,  $C = 25$  nm (深蓝色);  $W_C = 199 a_0$ ,  $C = 40$  nm (绿色);  $W_C = 199 a_0$ ,  $C = 25$  nm (橘黄色);  $W_C = 199 a_0$ ,  $C = 10$  nm (紫色)。细虚线代表宽度为  $W_C$  的虚拟 GNR 电导, 与相应颜色的 GNC 对应。宽度的两个值  $W_C$  对应于半导体形扶手椅 GNR。不同的点  $P_i$  表示选择的不同参数, 之后用来计算 GNRs 对 SGM 的响应, 见小节 4.4.1。插图: 对主图低能部分的放大。

无限长的 GNR 提供了一个完美散射的例子, 所有的传输模式都具有单一的传输。这样一来,  $G$  是关于费米能  $E$  的台阶形函数。在图 4-2 中, 我们展示了具有宽度  $W_L = 599 a_0$  的金属性扶手椅 GNR 在不同费米能下的电导 (粗的黑色实线)。零横向能量模式的非简并性, 决定了第一个电导平台为  $G = G_0$ 。随着费米能  $E$  的增加, 其他的模式逐步被电子填充。狄拉克方程预测这些模式是双重简并的, 因此电导平台由  $2G_0$  的步长隔开。数值结果与  $E$  较小的时候预期一致, 但是随着  $E$  的增加, 晶格效应开始表现出来, 模态简并逐渐被破坏, 差值为  $G_0$  电导平台开始出现。

如上所述, 可以在完美的 GNR 中得到电导量子化, 但是如图 4-2 所示, 电导量子化并不是很稳定, 这是因为适量的粗糙边界就会抑制电导并且会导致边缘

局域态的出现 [187, 188, 220, 221]。这种现象在 GNC 中间点处最为敏感，因为其中传输的模式数很少。出于同样的原因，GNR 中纳米收缩结构的定义大大恶化了电导量子化。事实上，介观物理学的一个标志是，在通过基于半导体的 QPC 输运中观察到了关于  $G_0$  整数倍的电导平台的电导量子化现象 [226, 227]。然而在 GNC 中，尤其是对于急剧收缩的情况，通常却没有观察到明确的电导量子化。

在高质量悬停 [228] 的或者六方氮化硼封装 [229] 的器件中观察到的电导量子化特征，是电导测量中可重现的调制（扭结），电导平台间距在 2 到  $4e^2/h$  的范围内变化。与半导体 QPC 的清晰量子化特性的差异归因于器件粗糙边缘导致的强短程散射更加利于电导平台之间的耦合 [230]。使用纳米蚀刻技术可以高精度的定义 GNC，并降低边缘粗糙度，从而实现更加稳定的电导量子化 [231]。几何形状和边缘的平滑度的不同，可能会导致与有限收缩长度相关的共振，从而出现电导峰值 [232]。

半导体 QPC 的电导量子化可以从绝热电子输运的角度理解，即在横向维度缓慢变化的平滑收缩结构 [233]，或者可以认为在突然出现几何形状变化的器件中，由于导线中的传输特征模态与传播通道在交接处的微小不匹配 [234]。绝热性和微小不匹配在 GNC 中都会导致观察到的电导量子化不佳。对于锯齿形边缘的情况，绝热近似无法描述收缩区域，因为沿传播方向运动的电子和沿着垂直方向运动的电子强烈耦合，而对于扶手椅形边缘的 GNC，沿收缩的边缘的形状变化是其中电子散射的来源 [14]。与半导体 QPC 不同，GNC 的边缘为短程散射体，与其他可能的缺陷一起降低了电导量子化。

对百万级原子的平滑收缩结构的模拟结果显示了以  $2e^2/h$  为单位的微弱电导量子化，可用电导关于费米能的导数  $dG/dE$  的最小值来进行判定的 [235]。如文献 [232] 中的几何形状可以得到电导尖峰，和收缩结构的有限性导致的传输方向上的量子化有关系 [236]。

我们的数值计算中用到的模型是具有平滑边界的 GNC，定义为

$$\left| x - \frac{W}{2} \right| < \frac{1}{2} \left[ W - (W - W_C) \exp \left( -\frac{y^2}{C^2} \right) \right], \quad (4.2)$$

其形式在图 4-1 中用绿色虚线表示，其中  $W_C$  是 GNC 中最窄处的宽度并且  $C$  表示的是收缩结构的长度。电子波函数的非零值仅在满足条件(4.2)的晶格位点上允许存在。收缩几何形状的细节是其传输性质的决定性因素。取决于制造工艺，我们可以获得 W 型结构 [229] 或者平滑的收缩结构 [228]。SGM 计算中选择(4.2)定义的平滑 GNC 是考虑到该结构的简单性，通过调节参数  $W_C$  和  $C$ ，可以控制收缩结构的平滑程度。

和文献 [235] 中的结果一致，图 4-2 表明收缩结构的存在减少了条带的传输系数并破坏了电导平台。粗的彩色实线表示收缩结构在不同宽度 ( $W_C$ ) 和长度 ( $C$ ) 下的 GNCs 的电导。对每一种情况，我们选择两种不同的  $W_C$ ，其中对应着 GNR 的宽度的电导由具有相应颜色的较细虚线表示，比如，深蓝色（橘黄色）的虚线对应的  $W_C = 399 a_0$  ( $199 a_0$ )。这些值表示具有特征宽度为  $W_C$  的绝热收缩的电导。由于两种宽度都定义了半导体性扶手椅 GNR，因此在低能量时会出现零电导区域，对于较大的  $E$ ，电导平台以  $G_0$  的步长分隔。只有对于非常短的 GNCs ( $C = 10 \text{ nm}$ , 紫色线)，隧穿通过收缩结构的电导允许在特定能量下超过相应虚构 GNR 设定的传输模式极限。在低费米能量下出现的电导共振，在图 4-2 插图中可以更加清晰的观察到，在其他的数值模拟中也观察到同样的结果 [205, 235–237]，这些共振态的出现可归因于 GNC 中的束缚态 [238, 239]。

通过分解传输特征模态  $t^\dagger t$  [240] 的特征向量，可以深入了解 GNC 微小电导平台的起源，其中 Landauer 公式(4.1)可以写成对角线的和，

$$G = G_0 \sum_{n=1}^N T_n^2, \quad (4.3)$$

其中  $T_n$  为与传输本征模式  $n$  相关联的传输本征值。在图 4-3 的上面板中，我们重现了图 4-2 中对参数为  $W_C = 399 a_0$  和  $C = 25 \text{ nm}$  (细的深蓝色) 的收缩结构的以费米能为函数的电导分布，并根据不同传输特征模态 (细彩色线) 对传输系数的贡献进行分解。我们看到，随着  $E$  的增加，不同的传输特征模态逐渐打开，并且在某个时候它们接近单一传输，这有利于具有近似量子化的微弱电导平台的出现。

图 4-3 的下面板显示了图 4-2 中考虑的另一个 GNC 的情况的特征模式态分解，其中  $W_C = 199 a_0$  和  $C = 25 \text{ nm}$  (粗橘黄色线)，比上面板的图中数据更加的陡峭。传输特征模态也在  $E$  增加时开始打开，当它们达到近似恒定值时，电导呈现出微弱的平台状态。然而，这种收缩的陡峭度导致传输特征值对  $E$  具有一些非单调依赖性，而没有达到酉极限。因此，电导平台的定义不如前一种情况那么明确，并且离量子化值更远。上面第二个例子的另一个特点是  $n = 2$  和  $n = 3$  特征模态退化到  $E/\tau \simeq 0.01$ ，具有相同的传输特征值。

正如我们将在下文看到的，传输本征值的表示将极大地有助于理解 SGM 电导响应。而后者强烈依赖于微扰动电导的值。用于详细研究 SGM 电导响应的参数在图 4-2 和 4-3 中分别用 GNR 和 GNC 的点  $P_i$  和  $Q_i$  ( $S_i$ ) 进行了标记。

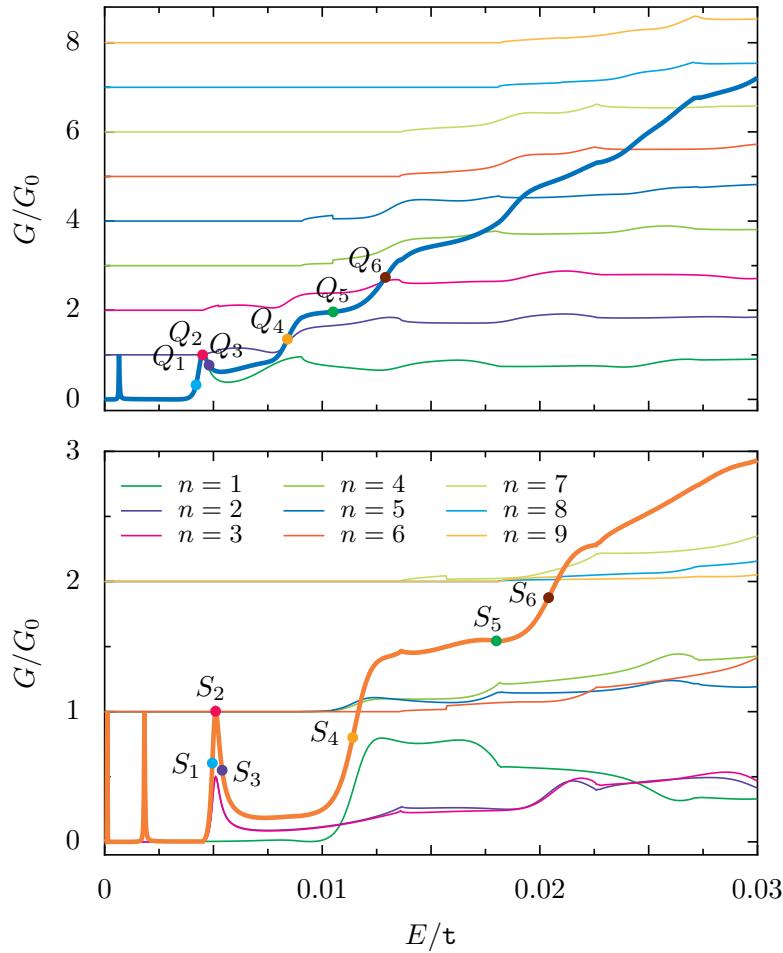


图 4-3: 图 4-2 所示的两个 GNC 的电导(粗曲线)的分解, 以传输特征模态(用  $n$  标记, 为带有相应图例的不同颜色的细曲线)。上子图:  $W_C = 399 a_0$  和  $C = 25 \text{ nm}$  (深蓝色)。下子图:  $W_C = 199 a_0$  和  $C = 25 \text{ nm}$  (橘黄色)。为了更好的可见性, 传输特征值在上子图中被排序并连续向上移位, 下子图中以三个传输特征值为一组, 并向上移位。不同的点  $Q_i$  和  $S_i$  是在章节 4.4.2 中关于对不同 GNCs 的 SGM 计算中所选择的参数。

#### 4.2.2 石墨烯纳米结构中的 SGM

在 SGM 的装置中, 用 AFM 的带电探针扫描样品从而测量电导。带电探针在二维石墨烯中诱导的静电势可以被近似为洛伦兹函数 [88, 108, 204, 241], 因此我们将相应的势能写成

$$U_T(\mathbf{r}) = \frac{u_T}{1 + (\mathbf{r} - \mathbf{r}_T)^2 / d^2}, \quad (4.4)$$

其中  $\mathbf{r}_T$  代表探针位置在石墨烯平面上的投影, 而势能强度  $u_T$  和扰动宽度  $d$  分别与施加到探针的电压以及探针与石墨烯片之间的距离有关。由于  $d$  通常比格

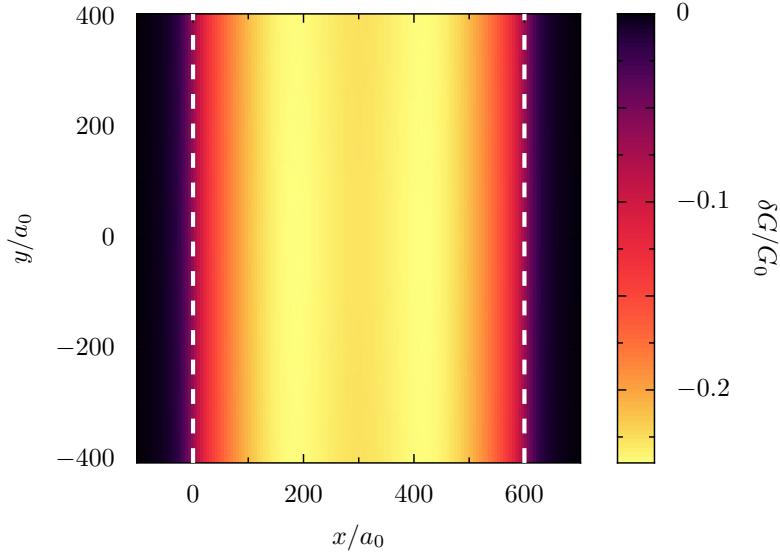


图 4-4: 白色虚线 ( $W = 600 a_0$ ) 定义的金属性扶手椅 GNR 的 SGM 扫描的电导修正的色阶图, 对应的未扰动的电导为图 4-2 的  $P_2$ 。势能由 (4.4) 给出, 其中  $u_T = 0.02 t$ ,  $d = 20 a_0$ 。

间距  $a_0$  大得多, 因此扰动势  $U_T$  可以作为标量 (即, 两个子晶格相同, 并且不会在它们之间诱导耦合)。在实验中,  $d$  的值受到探针到石墨烯片的距离限制, 通常是 100 nm 的数量级 [88]。为了限制由于探针电位超出系统延伸到导线而导致的技术问题, 我们在理论方法中选择较小的值, 但至少会比  $a_0$  大一个数量级。我们将在小节 4.4.1 中展示, 零横向能量模式对 SGM 没有响应。图 4-4 展示了一个典型的 SGM 扫描图, 以量子电导  $G_0$  为单位绘制数值上得到的 SGM 响应  $\delta G$  (定义为带有探针的样品的电导减去没有探针的样品的电导), 作为扶手椅金属性纳米带 ( $W = 600 a_0$ ) 关于探针位置的函数, 对应的费米能位于未扰动电导的第二个电导平台 (图 4-2 中的  $P_2$ )。

图 4-4 的 SGM 扫描图在传播方向上表现为平移不变性, 尽管会有两个效应打破这种对称性。一方面, 晶格诱导的  $y$  方向对称性破坏会产生在所选尺度内难以察觉的电导调制。另一方面, 在导线处切割探针电位尾部会产生有限尺寸效应, 我们通过在数值上计算比所示区域长七倍以上的条带来最小化这种效应。

虽然通过石墨烯纳米结构的量子输运的许多特征可以从扫描图中推断出来, 如图 4-4 所示, 但涉及的大量物理参数表明必须采用系统的方法去研究。在下一节中, 我们开发了一种扰动方法, 用于解释石墨烯中狄拉克电子对非侵入性探针电位的 SGM 响应, 这将指导我们讨论不同条件下的 SGM 结果。

### 4.3 非侵入探针的扰动方法

#### 4.3.1 扰动方法：一阶修正

非侵入探针的响应可以从扰动理论中得到，遵循与二维电子气中相同的处理过程 [103, 104]。我们将在本节中介绍该方法的主要步骤。

总体格林函数  $\mathcal{G}_T$ （包括探针的影响）的戴森方程可以写成无扰动的格林函数  $\mathcal{G}$  和探针诱导的势  $U_T$  的组合形式

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_T(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \varepsilon) &= \mathcal{G}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \varepsilon) + \int d\mathbf{r}'' \mathcal{G}(\mathbf{r}; \mathbf{r}''; \varepsilon) U_T \mathcal{G}_T(\mathbf{r}''; \mathbf{r}'; \varepsilon) \\ &\approx \mathcal{G}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \varepsilon) + \int d\mathbf{r}'' \mathcal{G}(\mathbf{r}; \mathbf{r}''; \varepsilon) U_T \mathcal{G}(\mathbf{r}''; \mathbf{r}'; \varepsilon),\end{aligned}\quad (4.5)$$

之后，保持  $U_T$  的一阶项，格林函数的修正为

$$\delta \mathcal{G}^{(1)} = \mathcal{G}_T - \mathcal{G} = \int dy \mathcal{G} V \mathcal{G}. \quad (4.6)$$

我们设置  $y > 0$  以及  $y' < 0$ ，通过应用 Fisher-Lee 关系(3.46)，那么传输系数的一阶修正可以写成

$$\begin{aligned}\delta t_{ba}^{(1)} &= 2\pi i (\hbar v_F)^2 \sum_{m,m'=0}^{M+1} \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)\dagger}(m, y) \sigma_y \sum_{m''} \int dy'' \mathcal{G}(m, y, m'', y''; \varepsilon) \\ &\quad \times U_T(m'' a_0, y'') \mathcal{G}(m'', y'', m', y', \varepsilon) \sigma_y \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(m', y') \\ &= 2\pi i (\hbar v_F)^2 \sum_{m,m'=0}^{M+1} \sum_{m''=0}^{M+1} \int dy'' \sum_{\bar{l}, \bar{l}'}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}'}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}'} \sum_{\bar{c}, \bar{c}'} \\ &\quad \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)}(m, y) \sigma_y \Psi_{\bar{l}, \bar{\varepsilon}, \bar{c}}(m, y) \Psi_{\bar{l}, \bar{\varepsilon}, \bar{c}}^\dagger(m'', y'') U_T(m'' a_0, y'') \\ &\quad \times \Psi_{\bar{l}', \bar{\varepsilon}', \bar{c}'}(m'', y'') \Psi_{\bar{l}', \bar{\varepsilon}', \bar{c}'}^\dagger(m, y) \sigma_y \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(m', y') \\ &= 2\pi i (\hbar v_F)^2 \sum_{m,m'=0}^{M+1} \sum_{l,l'}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}'}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}'} \sum_{\bar{c}, \bar{c}'} \mathcal{U}_{\bar{c}, \bar{c}'}^{\bar{l}, \bar{l}'}(\bar{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}') \\ &\quad \times \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)\dagger}(m, y) \sigma_y \Psi_{\bar{l}, \bar{\varepsilon}, \bar{c}}(m, y) \Psi_{\bar{l}', \bar{\varepsilon}', \bar{c}'}^\dagger(m', y') \sigma_y \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(m', y'),\end{aligned}\quad (4.7)$$

其中，我们定义了散射态之间探针电位的矩阵元：

$$\mathcal{U}_{\bar{c}\bar{c}'}^{\bar{l}\bar{l}'}(\bar{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}') = \sum_{m''=0}^{M+1} \int dy'' \Psi_{\bar{l}, \bar{\varepsilon}, \bar{c}}^\dagger(m'', y'') U_T(m'' a_0, y'') \Psi_{\bar{l}', \bar{\varepsilon}', \bar{c}'}(m'', y''). \quad (4.8)$$

我们分别单独考虑  $\sum_{l,l'}$  的每一个情况。假设探针势矩阵元平滑依赖于  $\bar{\varepsilon}$  和  $\bar{\varepsilon}'$ ，用模式  $\varphi^{(\mp)}$  表示散射态  $\Psi$ ，并且利用(B.21)，得到

$$\sum_{m=0}^{M+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)\dagger}(m, y) \sigma_y \Psi_{\bar{l}, \bar{\varepsilon}, \bar{c}}(m, y) \mathcal{U}_{\bar{c}, \bar{c}'}^{\bar{l}, \bar{l}'} \quad (4.9a)$$

$$= -\frac{i}{\hbar v_F} (t_{b\bar{c}} \delta_{\bar{l},1} + r'_{b\bar{c}} \delta_{\bar{l},2}) \mathcal{U}_{\bar{c},\bar{c}'}^{\bar{l},\bar{l}'}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}'), \quad (4.9b)$$

$$\sum_{m'=0}^{M+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \Psi_{\bar{l}',\bar{\varepsilon}',\bar{c}'}^\dagger(m', y') \sigma_y \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(m', y') \mathcal{U}_{\bar{c},\bar{c}'}^{\bar{l},\bar{l}'}(\bar{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}') \quad (4.9c)$$

$$= -\frac{i}{\hbar v_F} \delta_{\bar{c}',a} \delta_{\bar{l}',1} \mathcal{U}_{\bar{c},\bar{c}'}^{\bar{l},\bar{l}'}(\bar{\varepsilon}, \varepsilon). \quad (4.9d)$$

然后我们得到传输系数的一阶修正为

$$\begin{aligned} \delta t_{ba}^{(1)} &= -2\pi i \sum_{\bar{c}} [t_{b\bar{c}} \mathcal{U}_{\bar{c}\bar{c}'}^{11}(\varepsilon, \varepsilon) \delta_{\bar{c}',a} \delta_{1,1} + t_{b\bar{c}} \mathcal{U}_{\bar{c},\bar{c}'}^{12}(\varepsilon, \varepsilon) \times \delta_{\bar{c}',a} \delta_{2,1} + \\ &\quad r'_{b\bar{c}} \mathcal{U}_{\bar{c}\bar{c}'}^{21}(\varepsilon, \varepsilon) \times \delta_{\bar{c}',a} \delta_{1,1} + r'_{b\bar{c}} \mathcal{U}_{\bar{c}\bar{c}'}^{21}(\varepsilon, \varepsilon) \times \delta_{\bar{c}',a} \delta_{2,1}] \quad (4.10) \\ &= -2\pi i \sum_{\bar{c}} [t_{b\bar{c}} \mathcal{U}_{\bar{c}a}^{11}(\varepsilon, \varepsilon) + r'_{b\bar{c}} \mathcal{U}_{\bar{c}a}^{21}(\varepsilon, \varepsilon)] \end{aligned}$$

我们知道，在不加探针的情况下，从(3.59)可知传输系数为

$$T^{(0)} = \sum_{a,b} t_{ba} t_{ba}^* = \sum_{a,b} |t_{ba}|^2, \quad (4.11)$$

因此，我们得到一阶修正的传输系数为

$$\begin{aligned} \delta T^{(1)} &= \sum_{a,b} |t_{ba} + \delta t_{ba}^{(1)}|^2 - T^{(0)} \\ &= 2 \sum_{a,b} \operatorname{Re} \{t_{ba}^* \delta t_{ba}\} \\ &= 4\pi \operatorname{Im} \sum_{a,b,c} t_{ba}^* (t_{bc} \mathcal{U}_{c,a}^{1,1} + r'_{bc} \mathcal{U}_{c,a}^{2,1}) \quad (4.12) \\ &= 4\pi \operatorname{Im} \{ \operatorname{Tr} [t^\dagger t \mathcal{U}^{1,1} + t^\dagger r' \mathcal{U}^{2,1}] \} \\ &= 4\pi \operatorname{Im} \{ \operatorname{Tr} [t^\dagger r' \mathcal{U}^{2,1}] \} \end{aligned}$$

通过在传输系数中加入量子电导单位  $G_0 = 2e^2/h$ ，我们得到一阶电导修正

$$\frac{\delta G^{(1)}}{G_0} = 2\pi \operatorname{Im} \{ \operatorname{Tr} [t^\dagger r' \mathcal{U}^{2,1}] \}, \quad (4.13)$$

该表达式具有和 2DEG 相同的形式 [103, 104]。将电导修正表示为迹，类似 Landauer 公式(3.59)，使其明显不依赖于电导态的选择。传输本征模式的基矢（对角化  $t^\dagger t$  和  $t'^\dagger t'$ ）是非常有用的，因为方程(4.13) 的迹变成对传播本征模式的单重求和 [104]。

$$\frac{\delta G^{(1)}}{G_0} = 4\pi \sum_{n=1}^N \mathcal{T}_n \mathcal{R}_n \operatorname{Im} \{ \mathcal{U}_{n,n}^{2,1} \}, \quad (4.14)$$

其中,  $\mathcal{T}_n$  ( $\mathcal{R}_n$ ) 是传输系数 (反射系数) 本征值, 并且  $\mathcal{U}_{n,n}^{2,1}$  为以传输系数本征模态为基矢的探针势的对角矩阵元。条带的情况特别简单, 因为导线模式为传输系数本征模式。

如果直接从(4.13)得到的完美传输模式则没有一阶修正。因此对于 GNR, 我们需要超越一阶近似, 以解决 SGM 响应问题。

### 4.3.2 扰动方法: 二阶修正

将传输系数拓展到二阶扰动,

$$T = \sum_{a,b} \left( t_{ba} + \delta t_{ba}^{(1)} + \delta t_{ba}^{(2)} \right) \left( t_{ba} + \delta t_{ba}^{(1)} + \delta t_{ba}^{(2)} \right)^*, \quad (4.15)$$

仅考虑二阶项, 可得

$$\begin{aligned} \delta T^{(2)} &= 2 \sum_{a,b} \operatorname{Re} \left\{ t_{ba}^* \delta t_{ba}^{(2)} \right\} + \sum_{ba} |\delta t_{ba}^{(1)}|^2 \\ &= \delta T^{(2)\alpha} + \delta T^{(2)\beta}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

第二项电导修正可以被分解成两个部分,  $\delta T^{(2)\alpha}$  和  $\delta T^{(2)\beta}$ , 我们首先考虑  $\beta$  项, 因为我们已经知道了  $\delta t_{ba}^{(1)}$  的形式。

#### 4.3.2.1 $\beta$ -项

$$\begin{aligned} \delta T^{(2)\beta} &= (2\pi)^2 \sum_{a,b} \sum_{c',c''} (t_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{11} + r'_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{21}) (t_{bc''} \mathcal{U}_{c''a}^{11} + r'_{bc''} \mathcal{U}_{c''a}^{21})^* \\ &= (2\pi)^2 \sum_{a,b} \sum_{c',c''} (t_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{11} t_{bc''}^* \mathcal{U}_{c''a}^{11*} + t_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{11} r'_{bc''}^* \mathcal{U}_{c''a}^{21*} + \\ &\quad + r'_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{21} t_{bc''}^* \mathcal{U}_{c''a}^{11*} + r'_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{21} r'_{bc''}^* \mathcal{U}_{c''a}^{21*}) \\ &= (2\pi)^2 \sum_{a,b} \sum_{c',c''} \left( t_{c''b}^\dagger t_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{11} \mathcal{U}_{ac''}^{11\dagger} + r_{c''b}^\dagger t_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{11} \mathcal{U}_{ac''}^{12\dagger} + \right. \\ &\quad \left. + t_{c''b}^\dagger r'_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{21} \mathcal{U}_{ac''}^{11\dagger} + r_{c''b}^\dagger r'_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{21} \mathcal{U}_{ac''}^{12\dagger} \right) \\ &= (2\pi)^2 \operatorname{Tr} [t^\dagger t \mathcal{U}^{11} \mathcal{U}^{11} + r'^\dagger t \mathcal{U}^{11} \mathcal{U}^{12} + \\ &\quad + t^\dagger r' \mathcal{V}^{21} \mathcal{V}^{11} + r'^\dagger r' \mathcal{V}^{21} \mathcal{V}^{12}]. \end{aligned} \quad (4.17)$$

第一项和最后一项是实数, 意味着

$$\sum_{a,b,c',c''} (t_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{11} t_{bc''}^* \mathcal{U}_{c''a}^{11*})^* = \sum_{a,b,c',c''} t_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{11} t_{bc''}^* \mathcal{U}_{c''a}^{11*}, \quad (4.18)$$

以及

$$\sum_{a,b,c',c''} (r'_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{21} r'^*_{bc''} \mathcal{U}_{c''a}^{21*})^* = \sum_{a,b,c',c''} r'_{bc'} \mathcal{U}_{c'a}^{21} r'^*_{bc''} \mathcal{U}_{c''a}^{21*}, \quad (4.19)$$

其中可将  $c'$  替换为  $c''$ , 意味着两个交叉项是复共轭的。因此, 我们可以得到二阶传输系数修正的  $\beta$  项

$$\delta T^{(2)\beta} = (2\pi)^2 \text{Tr} [t^\dagger t \mathcal{U}^{11} \mathcal{U}^{11} + r'^\dagger r' \mathcal{U}^{21} \mathcal{U}^{12} + 2\text{Re} \{ r'^\dagger t \mathcal{U}^{11} \mathcal{U}^{12} \}], \quad (4.20)$$

并且二阶  $\beta$  项的电导修正为

$$\frac{\delta G^{(2)\beta}}{G_0} = 4\pi^2 \text{Tr} [t^\dagger t \mathcal{U}^{11} \mathcal{U}^{11} + r'^\dagger r' \mathcal{U}^{21} \mathcal{U}^{12} + 2\text{Re} \{ r'^\dagger t \mathcal{U}^{11} \mathcal{U}^{12} \}]. \quad (4.21)$$

### 4.3.2.2 $\alpha-$ 项

我们将格林函数拓展到二阶扰动,

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_T &= \mathcal{G} + \int dy'' \mathcal{G} U_T \mathcal{G} + \int \int dy'' y''' \mathcal{G} U_T \mathcal{G} U_T \mathcal{G}_T \\ &\approx \mathcal{G} + \int dy'' \mathcal{G} U_T \mathcal{G} + \int \int dy'' dy''' \mathcal{G} U_T \mathcal{G} U_T \mathcal{G}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

那么, 格林函数的二阶扰动为

$$\delta \mathcal{G}^{(2)} = \mathcal{G}_T - \mathcal{G} - \int dy'' \mathcal{G} U_T \mathcal{G} = \int \int dy'' dy''' \mathcal{G} U_T \mathcal{G} U_T \mathcal{G}. \quad (4.23)$$

通过将格林函数的二阶扰动代入石墨烯的 Fisher-Lee 关系, 我们得到了传输系数幅度值的二阶修正

$$\begin{aligned} \delta t_{ba}^{(2)} &= 2\pi i (\hbar v_F)^2 \sum_{m,m'}^{M+1} \sum_{\bar{l},\bar{l}',\bar{l}''=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}'}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}''}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}''} \sum_{\bar{c},\bar{c}',\bar{c}''} \\ &\quad \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)\dagger}(m, y) \sigma_y \Psi_{\bar{l},\bar{\varepsilon},\bar{c}}(m, y) \mathcal{U}_{\bar{c},\bar{c}'}^{\bar{l},\bar{l}'}(\bar{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}') \mathcal{U}_{\bar{c}',\bar{c}''}^{\bar{l}'',\bar{l}''}(\bar{\varepsilon}', \bar{\varepsilon}'') \\ &\quad \times \Psi_{\bar{l}'',\bar{\varepsilon}'',\bar{c}''}(m', y') \sigma_y \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(m', y'), \end{aligned} \quad (4.24)$$

其中用到了定义在(4.8)的矩阵元。上述方程中的  $m-$  求和和  $\bar{\varepsilon}-$  积分可以根据(4.9a)得到, 并且近似的, (4.9c)中的  $m'-$  求和和  $\bar{\varepsilon}''-$  积分, 可得

$$\begin{aligned} \delta t_{ba}^{(2)} &= -2\pi i \sum_{\bar{l}'=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}'}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}'} \sum_{\bar{c},\bar{c}'} \left[ t_{bc} \mathcal{U}_{\bar{c},\bar{c}'}^{1\bar{l}'}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}') \mathcal{U}_{\bar{c}',a}^{\bar{l}'1}(\bar{\varepsilon}', \varepsilon) + \right. \\ &\quad \left. + r'_{bc} \mathcal{U}_{\bar{c},\bar{c}'}^{2\bar{l}'}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}') \mathcal{U}_{\bar{c}',a}^{\bar{l}'1}(\bar{\varepsilon}', \varepsilon) \right]. \end{aligned} \quad (4.25)$$

遵循在(4.12)中的步骤, 我们得到了  $\alpha$  项的二阶传输系数的修正

$$\begin{aligned}
\delta T^{(2)\alpha} &= 2 \sum_{a,b} \operatorname{Re} \left\{ t_{ba}^* \delta t_{ba}^{(2)} \right\} \\
&= 4\pi \sum_{a,b} \sum_{\bar{l}=1}^2 \operatorname{Im} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE'}{\varepsilon^+ - E'} \sum_{c,c'} \right. \\
&\quad \left[ t_{ab}^\dagger t_{bc} \mathcal{U}_{c,c'}^{1,\bar{l}}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}') \mathcal{U}_{c',a}^{\bar{l},1}(\bar{\varepsilon}', \varepsilon) + t_{ab}^\dagger r'_{bc} \mathcal{U}_{c,c'}^{2,\bar{l}}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}') \mathcal{U}_{c',a}^{\bar{l},1}(\bar{\varepsilon}', \varepsilon) \right] \} \\
&= 4\pi \sum_{\bar{l}=1}^2 \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}'}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}'} \\
&\quad \operatorname{Tr} \left[ t^\dagger t \mathcal{U}^{1,\bar{l}}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}') \mathcal{U}^{\bar{l},1}(\bar{\varepsilon}', \varepsilon) + t^\dagger r' \mathcal{U}^{2,\bar{l}}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}') \mathcal{U}^{\bar{l},1}(\bar{\varepsilon}', \varepsilon) \right] \\
&= -4\pi^2 \sum_{\bar{l}=1}^2 \operatorname{Tr} \left[ t^\dagger t \mathcal{U}^{1,\bar{l}} \mathcal{U}^{\bar{l},1} \right] \\
&\quad + 4\pi \sum_{l'=1}^2 \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}'}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}'} \operatorname{Tr} \left[ t^\dagger r' \mathcal{U}^{2,l'}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}') \mathcal{U}^{l',1}(\bar{\varepsilon}', \varepsilon) \right], \tag{4.26}
\end{aligned}$$

其中我们用到了  $\operatorname{Tr} [t^\dagger t \mathcal{U}^{1,\bar{l}} \mathcal{U}^{\bar{l},1}]$  是实数的条件。

根据  $\delta T^{(2)\alpha}$  和  $\delta T^{(2)\beta}$ , 我们可以得到二阶传输系数修正

$$\begin{aligned}
\delta T^{(2)} &= 4\pi \sum_{\bar{l}=1}^2 \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}'}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}'} \operatorname{Tr} \left[ t^\dagger r' \mathcal{U}^{2,\bar{l}}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}') \mathcal{U}^{\bar{l},1}(\bar{\varepsilon}', \varepsilon) \right] + \\
&\quad + 4\pi^2 \operatorname{Tr} \left[ t^\dagger t \mathcal{U}^{1,1} \mathcal{U}^{1,1} - t^\dagger t \mathcal{U}^{1,1} \mathcal{U}^{1,1} + \right. \\
&\quad \left. + r'^\dagger r' \mathcal{U}^{2,1} \mathcal{U}^{1,2} - t^\dagger t \mathcal{U}^{1,2} \mathcal{U}^{1,2} + 2\operatorname{Re} \{ r'^\dagger t \mathcal{U}^{11} \mathcal{U}^{12} \} \right] \tag{4.27} \\
&= 4\pi \sum_{\bar{l}=1}^2 \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}'}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}'} \sum_{l'=1}^2 \operatorname{Tr} \left[ t^\dagger r' \mathcal{U}^{2,\bar{l}}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}') \mathcal{U}^{\bar{l},1}(\bar{\varepsilon}', \varepsilon) \right] + \\
&\quad + 4\pi^2 \operatorname{Tr} \left[ r'^\dagger r' \mathcal{U}^{2,1} \mathcal{U}^{1,2} - t^\dagger t \mathcal{U}^{1,2} \mathcal{U}^{2,1} + 2\operatorname{Re} \{ r'^\dagger t \mathcal{U}^{1,1} \mathcal{U}^{1,2} \} \right],
\end{aligned}$$

那么, 二阶电导修正为

$$\begin{aligned}
\frac{\delta G^{(2)}}{G_0} &= -4\pi^2 \operatorname{Tr} \left[ t^\dagger t \mathcal{U}^{1,2} \mathcal{U}^{2,1} - r'^\dagger r' \mathcal{U}^{2,1} \mathcal{U}^{1,2} - 2\operatorname{Re} \{ r'^\dagger t \mathcal{U}^{1,1} \mathcal{U}^{1,2} \} \right] \\
&\quad + 4\pi \sum_{\bar{l}=1}^2 \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}'}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}'} \operatorname{Tr} \left[ t^\dagger r' \mathcal{U}^{2,\bar{l}}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}') \mathcal{U}^{\bar{l},1}(\bar{\varepsilon}', \varepsilon) \right]. \tag{4.28}
\end{aligned}$$

在完美传输系数本征模式的情况下,  $\delta G^{(2)}$  的表达式相对来说比较简单, 尤其是, 当所有传输本征模态都完美传输时, 例如 GNRs, (4.28) 退化为

$$\frac{\delta G^{(2)}}{G_0} = -4\pi^2 \operatorname{Tr} [\mathcal{U}^{1,2} \mathcal{U}^{2,1}]. \tag{4.29}$$

在完美传输的情况下，对电导的二阶修正正是可忽略的负值（或零），只是由于探针的存在不能在导线中打开额外的电导通道，而只会减少现有通道的传输。在本章接下来的内容中，(4.13)和(4.28)是我们分析在 GNR 和 GNC 中非侵入性探针的 SGM 响应的基础，并将指导我们讨论在不同条件下获得的 SGM 结果。

## 4.4 结果

### 4.4.1 金属性扶手椅石墨烯条带中的 SGM 响应

我们首先解决 GNR 的 SGM 电导响应，这十分简单，因为传输通道的完美传输导致一阶电导修正消失，比如(4.13) 中的  $\delta G^{(1)} = 0$ 。这样一来，(4.28) 的二阶项  $\delta G^{(2)}$ ，为非侵入探针修正的主导项。此外，在扶手椅 GNR 的情况下，可以在一些近似下计算探针电位矩阵元。根据定义(4.8)，两个散射态之间的探针势的矩阵元从具有相同能量  $\varepsilon$  的相对侧面撞击可以写为

$$\mathcal{U}_{a,a'}^{2,1}(\varepsilon, \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar v_F} \sum_{m=0}^{M+1} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{i\lambda(k_a+k_{a'})y} U_T(ma_0, y) \chi_{\varepsilon,a,-\lambda}^\dagger(m) \chi_{\varepsilon,a',\lambda}(m), \quad (4.30)$$

其中，我们用到了  $s' = -s = -\lambda$ 。根据(3.26)和(3.27)，我们可得

$$\begin{aligned} & \chi_{\varepsilon,a,-\lambda}^\dagger(m) \chi_{\varepsilon,a',\lambda}(m) \\ &= \frac{1}{M+1} \frac{|\xi|}{(k_a k_{a'})^{1/2}} \sin\left(\frac{\pi a m}{M+1}\right) \sin\left(\frac{\pi a' m}{M+1}\right) \mathcal{Z}_{\varepsilon,a,-\lambda}^\dagger \mathcal{Z}_{\varepsilon,a',\lambda}, \end{aligned} \quad (4.31)$$

以及

$$\mathcal{Z}_{\varepsilon,a,-\lambda}^\dagger \mathcal{Z}_{\varepsilon,a',\lambda} = 1 + \frac{1}{\xi^2} (q_a - i\lambda k_a)(q_{a'} - i\lambda k_{a'}). \quad (4.32)$$

我们很容易做(4.30)中的  $y$  方向积分。此外，将离散指数  $m$  与连续变量  $x = ma_0$  进行交换，并注意到对于最低横向能量模式，与积分的其他项相比，两个正弦的乘积是  $x$  的快速振荡函数，我们可以写成

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{a,a'}^{2,1}(\varepsilon, \varepsilon) &= \frac{\delta_{a,a'}}{4\pi\hbar v_F} \frac{u_T d}{W} e^{2i\lambda k_a y_T} \frac{|\xi|}{k_a} \left[ 1 + \left( \frac{q_a - i\lambda k_a}{\xi} \right)^2 \right] \\ &\times \int_0^W dx \frac{\exp\left(-2k_a d \sqrt{1 + (x - x_T)^2/d^2}\right)}{\sqrt{1 + (x - x_T)^2/d^2}}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

对于  $d \ll W$ ，抛开从探针到边界距离为  $d$  的情况不谈，我们可以将  $x$ - 积分推广到  $\pm\infty$ ，可以得到

$$\mathcal{U}_{a,a'}^{2,1}(\varepsilon, \varepsilon) = \frac{\delta_{a,a'}}{2\pi\hbar v_F} \frac{u_T d^2}{W} e^{2i\lambda k_a y_T} \frac{|\xi|}{k_a} \left[ 1 + \left( \frac{q_a - i\lambda k_a}{\xi} \right)^2 \right] \mathcal{K}_0(2k_a d), \quad (4.34)$$

其中  $\mathcal{K}_0$  为第二类零阶修正贝塞尔函数的。通过应用(4.28)，我们得到

$$\frac{\delta G^{(2)}}{G_0} = - \left( \frac{2\pi u_T d^2}{\hbar v_F W} \right)^2 \sum_a \left( \frac{q_a}{k_a} \right)^2 \mathcal{K}_0^2(2k_a d), \quad (4.35)$$

其中是对传输模式  $a$  的求和。

从同一侧入射的等能量散射态的情况可以用相似的方法得出来。对于  $l = 1$  的情况，我们有

$$\mathcal{U}_{a,a'}^{1,1}(\varepsilon, \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar v_F} \sum_{m=0}^{M+1} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{i\lambda(k_{a'} - k_a)y} U_T(ma_0, y) \chi_{\varepsilon,a,\lambda}^\dagger(m) \chi_{\varepsilon,a',\lambda}(m). \quad (4.36)$$

与前面的情况一样，我们考虑到探针电位在晶格常数的尺度上是平滑的，执行  $y$ - 积分，并将对  $m$ - 的求和转换为对  $x$ - 积分，得到

$$\mathcal{U}_{a,a'}^{1,1}(\varepsilon, \varepsilon) = \frac{\delta_{a,a'}}{2\pi\hbar v_F} \frac{u_T d}{W} \frac{|\xi|}{k_a} \int_0^W dx \frac{1}{\sqrt{1 + (x - x_T)^2/d^2}}. \quad (4.37)$$

执行  $x$ - 积分，得到

$$\mathcal{U}_{a,a'}^{1,1}(\varepsilon, \varepsilon) = \frac{\delta_{a,a'}}{2\pi\hbar v_F} \frac{u_T d^2}{W} \frac{|\xi|}{k_a} \ln \left( \frac{\sqrt{\left(\frac{W-x_T}{d}\right)^2 + 1} + \frac{W-x_T}{d}}{\sqrt{\left(\frac{x_T}{d}\right)^2 + 1} - \frac{x_T}{d}} \right). \quad (4.38)$$

在图4-5 (a) 中，我们展示了数值上得到的作为探针强度  $u_T$  (以跳跃能  $t$  为单位) 为函数的 SGM 修正，探针大小为  $d = 20 a_0$ ，并位于条带的中间轴上（如图 4-1 上的  $x = W/2$  处）。计算 SGM 电导响应所对应的费米能分别位于未扰动的 GNR 的第一 (蓝色实线)、第二 (红色实线) 和第三 (紫色实线) 电导平台上 (分别为图 4-2 中的点  $P_1$ ,  $P_2$  和  $P_3$ )。

第一个显著的特征是，当仅占用零横向模式时，SGM 修正相对于其他曲线的尺度上为零 (通常为  $\delta G/G_0 \sim -10^{-8}$ )。这个奇怪的现象在文献 [205, 242] 中已经注意到，与 (4.28)一致，即在这种情况下二阶电导修正消失。由(4.32)可知，在金属性 GNR 中，对于零横向能量模式， $a^* = 4(M+1)/3$  和  $q_{a^*} = 0$ ，可以立刻发现  $\mathcal{Z}_{\varepsilon,a^*,-\lambda}^\dagger \mathcal{Z}_{\varepsilon,a^*,\lambda} = 0$ 。因此，矩阵元  $\mathcal{U}_{a^*,a^*}^{2,1}(\varepsilon, \varepsilon) = 0$  与探针的强度和位置无关，更一般的可以说与扰动电位的特性无关，其中假设了这种势能是大范围的 [216] (只有这样才不会引起谷间散射)。这样一来就导致了金属性扶手椅 GNR 中近乎完美的单通道传输概念 [216]，近乎完美是指围绕展开中的高阶项原则上不能被忽略，这是因为其他矩阵元不会变为零 [见(4.38)]。由于在金属性扶手椅 GNRs 中由边界条件导致了时间对称性破缺，文献 [218] 提出扶手椅 GNRs 中零横向能量模式是一个完美的电导通道。

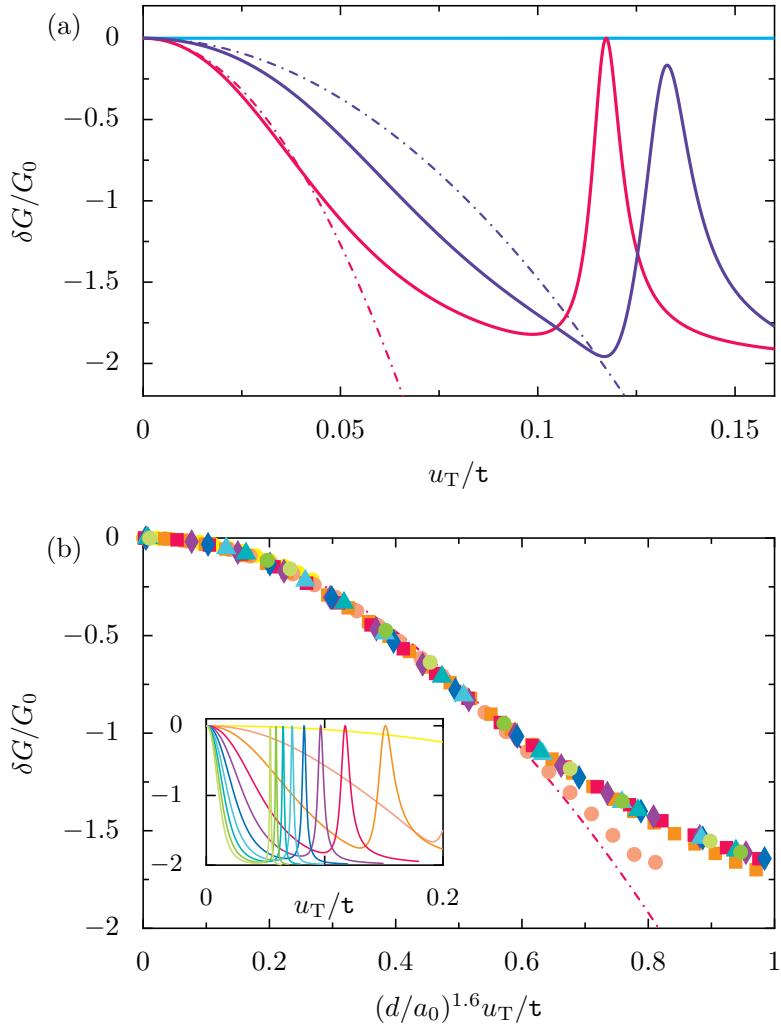


图 4-5: (a) 宽度为  $W_L = 599 a_0$  的金属性扶手椅 GNR 的关于探针强度  $u_T$  变化的 SGM 电导修正, 其中探针放置在条带的中间轴上 ( $x = W/2$ )。计算 SGM 电导响应所对应的费米能分别位于未扰动的 GNR 的第一 (蓝色实线)、第二 (红色实线) 和第三 (紫色实线) 电导平台上 (分别为图 4-2 中的点  $P_1$ ,  $P_2$  和  $P_3$ )。探针感应电势的范围为  $d = 20 a_0$ 。红色和紫色虚线分别表示 (4.35) 对  $u_T$  的初始二次依赖性的解析预测, 分别对应于  $P_2$  和  $P_3$  的情况。(b) 对于各种大小  $5 \leq d/a_0 \leq 50$  和各种强度  $0 \leq u_T/t \leq 0.2$  的探针关于第二个平台点  $P_2$  的电导修正, 如果以  $u_T d^{1.6}$  为标度, 数据将会重叠。未缩放的数据在插图中显示为  $u_T$  的函数 (包括电导修正开始减少到出现第一个峰值的值)。插图中的颜色对应于主图中数据点的颜色。 $d$  越大, 对应的电导修正越强。

从数值角度看, 完美传输通道和近乎完美传输通道之间的区别很微妙 [218]。事实上, 图 4-5 (a) 中  $\delta G$  的十分微小的值受到有限尺寸效应的影响。其一是由

于在我们的数值模拟中沿  $y$  方向有限范围延伸到导线的长程探针电位（洛伦兹函数的性质），如图 4-6 所示，我们计算了宽度为  $W_L = 599 a_0$ ，不同长度的金属性扶手椅 GNR 的 SGM 电导修正与探针沿着传输方向移动的依赖关系。未加探针的情况为图 4-2 的  $P_1$  点。图 4-6 (a) 中的虚线指示的地方为器件和导线的接触面，可以看到探针在靠近接触面时，因为受到探针势的长程效应而导致 SGM 电导修正的波动较大。图 4-6 (b) 放大了条带中间部分的电导修正图，该部分远离导线，因此受到探针长程效应的干扰较小。同时，我们也发现，当条带的长度和宽度达到一定值时，比如我们计算所用的七倍时，探针的长程效应几乎不起作用。

其二是当数值计算的采用的电势的宽度很小时，会导致石墨烯的谷自由度混合。图 4-7 计算了长度为  $L = 700 \text{ nm}$ ，宽度为  $W_L = 599 a_0$  的金属性扶手椅 GNR 对于不同宽度和强度的探针的 SGM 电导修正与探针沿着传输方向移动的依赖关系。未加探针的情况为图 4-2 的  $P_1$  点。为了控制变量，由方程(4.35) 可知，我们需要设定  $\mu_T d^2$  的值为常数。可以观察到，探针宽度的减少会导致更大的 SGM 电导修正。

然而，从理论角度来看，零横向能量通道的完美传导可以通过将扰动项展开到更高阶来解决。对于零横向能量模式，传输系数幅度的一阶和二阶修正可以从(4.13)、(4.25)和附录B.3得到，

$$\delta t_{a^*, a^*}^{(1)} = -2\pi i \mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\varepsilon, \varepsilon), \quad (4.39)$$

以及

$$\delta t_{a^*, a^*}^{(2)} = -2 [\pi \mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\varepsilon, \varepsilon)]^2. \quad (4.40)$$

很容易看出，传输系数幅度  $\delta t_{ba}^{(n)}$  的  $n$  阶修正具有与(4.25)相同的结构，即具有  $n-1$  中间能量积分以及对导线指标进行加和，每项具有  $n$  矩阵元素的乘积。对于零横向能量模式，重要的简化条件为  $\mathcal{U}_{a^*, a^*}^{2,1}(\varepsilon, \varepsilon) = 0$ 。从一般结果(B.28)来看，我们有

$$\delta t_{a^*, a^*}^{(n)} = 2 [-i\pi \mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\varepsilon, \varepsilon)]^n, \quad (4.41)$$

允许去计算任意  $n$  阶的电导修正  $\delta G^{(n)}$ 。对于旧的  $n$  阶项，我们可得

$$\frac{\delta G^{(n)}}{G_0} = 2\text{Re} \left[ \delta t_{a^*, a^*}^{(n)} + \sum_{j=1}^{(n-1)/2} \left[ \delta t_{a^*, a^*}^{(j)} \right]^* \delta t_{a^*, a^*}^{(n-j)} \right] = 0, \quad (4.42)$$

由于加和中的每一项，包括  $\delta t^{(n)}$ ，都是纯虚数。对于偶数的  $n$ ，我们有近似于(4.16)

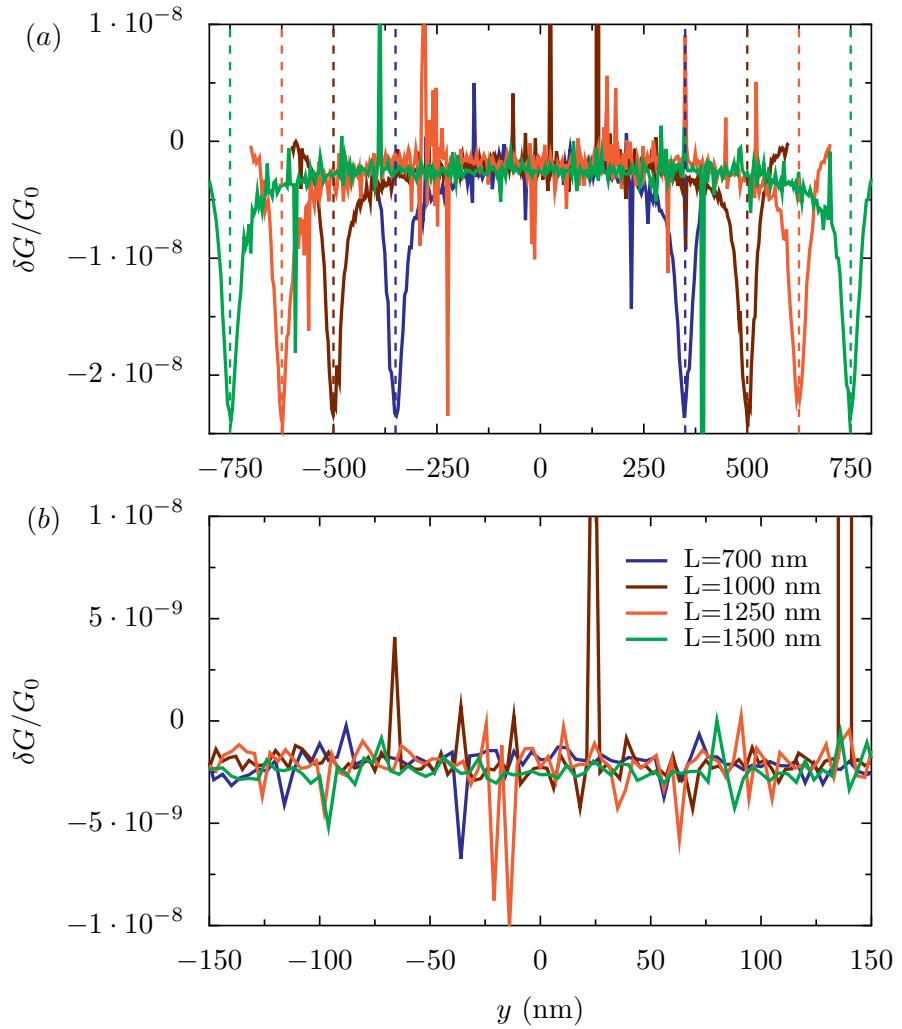


图 4-6: (a) 宽度为  $W_L = 599 a_0$  但长度不同的金属性扶手椅 GNR 的关于探针沿着传输方向变化的 SGM 电导修正, 其中探针放置在条带的中间轴上 ( $x = W/2$ )。计算 SGM 电导响应所对应的费米能位于图 4-2 的  $P_1$  点。探针的强度  $\mu_T = 0.002t$ , 感应电势范围为  $d = 100 a_0$ 。图中虚线为不同长度的 GNR 对应的导线与器件的界面处。(b) 是对 (a) 中 GNR 中心区域的放大图, 其中  $L \in [-150, 150]$  nm。不同长度的 GNR 用  $L$  标记, 对应着图中数据的颜色。

的分解

$$\frac{\delta G^{(n)\alpha}}{G_0} = 2\text{Re} \left[ \delta t^{(n)} + \sum_{j=1}^{n/2-1} [\delta t^{(j)}]^* \delta t^{(n-j)} \right], \quad (4.43a)$$

$$\frac{\delta G^{(n)\beta}}{G_0} = |\delta t^{(n/2)}|^2. \quad (4.43b)$$

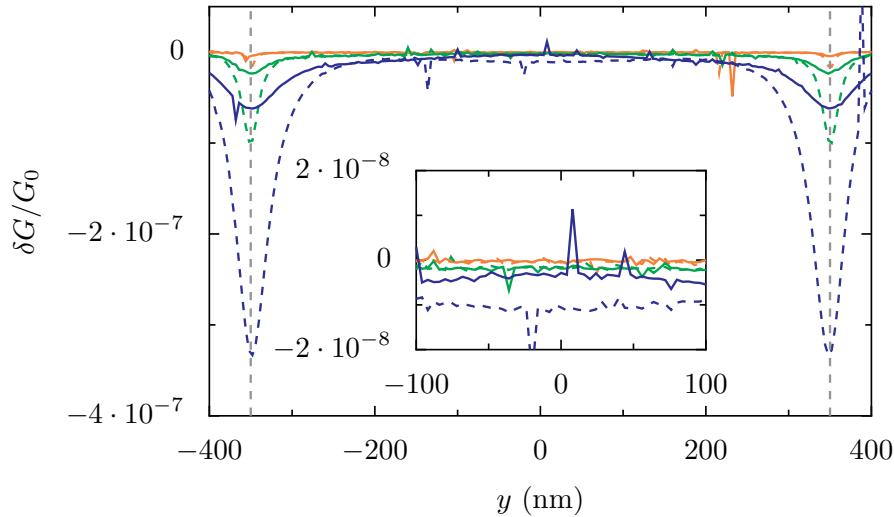


图 4-7: (a) 宽度为  $W_L = 599 a_0$  的金属性扶手椅 GNR 的关于探针沿着传输方向变化的 SGM 电导修正, 其中探针放置在条带的中间轴上 ( $x = W/2$ )。计算 SGM 电导响应所对应的费米能位于图 4-2 的  $P_1$  点。图中实线和虚线对应的探针电势强度分别为  $\mu_T = 0.002t$  和  $\mu_T = 0.008t$ 。蓝色、绿色和橘黄色的实线对应的探针电势宽度分别为  $d = 200 a_0$ 、 $d = 100 a_0$  和  $d = 40 a_0$ ; 相应颜色的虚线的电势宽度为实线的一半。插图是 GNR 中心区域的放大图, 其中  $L \in [-100, 100]$  nm。

利用(4.41), 可得

$$\begin{aligned} \frac{\delta G^{(n)\alpha}}{G_0} &= 4 \left[ i\pi \mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\varepsilon, \varepsilon) \right]^n \left[ 1 + 2 \sum_{j=1}^{n/2-1} (-1)^j \right] \\ &= -4 \left[ \pi \mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\varepsilon, \varepsilon) \right]^n = -\frac{\delta G^{(n)\beta}}{G_0}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

因此, 我们在扰动理论中的所有阶数都有  $\delta G = 0$ , 这意味着零横向能量模式是一个完美的电导传输通道。我们强调, 这个结果不限于对应于洛伦兹形式的电势的矩阵元素的特定形式(4.38), 但它适用于任何长程势, 包括文献 [218] 中处理的无序情况。

在图 4-5 (a) 中, 红色和紫色的实线分别表示  $P_2$  (第二个电导平台) 和  $P_3$  (第三个电导平台) 处 SGM 得响应, 随着电势强度  $u_T$  的增加, 初始 SGM 电导修正呈现出二次依赖关系。电导的修正始终为负, 符合在弱探针强度下主导的 SGM 修正为二阶的预期, 并且初始的强度依赖关系可以通过方程(4.35)的微扰预测进行很好的描述 (分别为红色和紫色的虚点线)。需要强调的是, 微扰区间相对较大, 可以相当精确地描述电导修正, 直到  $|\delta G| \lesssim G_0$  处。此外, 图 4-4 的 SGM 扫描证实了方程(4.35)的一个近似独立于探针位置的预测, 其前提是探针

不靠近条带的边缘。

在图 4-5 (b) 中, 我们展示了较大范围内 ( $5 \leq d/a_0 \leq 50$ ,  $0 \leq u_T/t \leq 0.2$ ) 不同电势宽度  $d$  (不同符号) 和强度  $u_T$  的 SGM 修正, 结果表明有一个十分稳定的数据折叠。变量  $d$  的缩放的非整数幂律与方程(4.35)中函数  $\mathcal{K}_0$  对小参数的对数依赖是一致的。图 4-5(a) 的另一个显著特征是, 当  $u_T$  取大值时, GNR 电导重

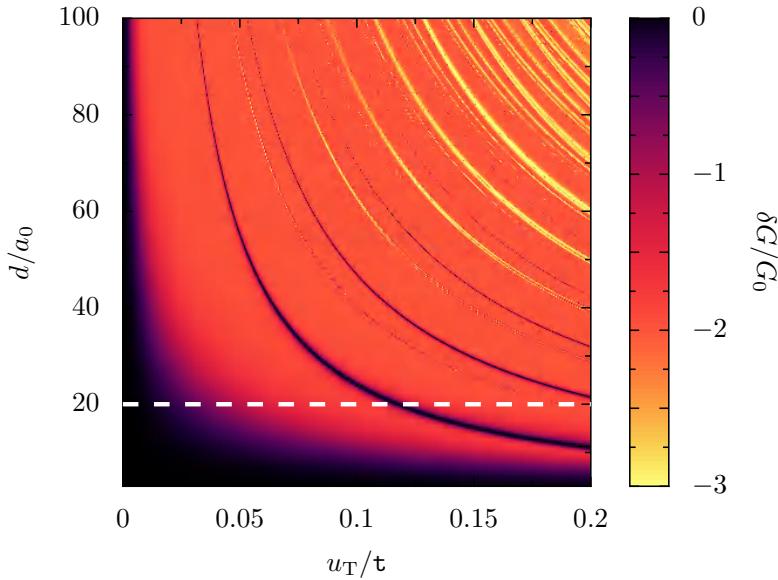


图 4-8: 当探针放置在条带中轴线上 ( $x = W/2$ ) 且未扰动的电导处于第二电导平台 (图 4-2 中  $P_2$  点) 时, 金属性 GNC 的 SGM 电导修正 (以电导量子  $G_0$  为单位) 关于探针引起的电势强度 ( $u_T$ ) 和宽度 ( $d$ ) 的分布。在对应于  $d = 20a_0$  的白色虚线上, 重现了图 4-5 (a) 中第二电导平台 (红实线) 的数据。

新增长, 超出微扰范围。这些峰值在第二电导平台的情况下达到无电导修正的幺正极限 (红实线), 并可解释为足够大的  $u_T$  的探针下方电静场的束缚态导致了共振, 类似于参考文献 [243, 244] 中研究的石墨烯量子点状态。图 4-8 中以颜色为标度显示 SGM 电导修正作为探针强度和宽度的函数, 突出显示了当未扰动电导处于第二电导平台 (图 4-2 中  $P_2$  点) 时, 随着  $u_T$  和  $d$  的变化而出现的谐振 (暗色) 和反谐振 (浅色)。这些共振线表明了在  $u_T$  和  $d$  的关系下, 探针下方的受限态与费米能量保持齐平。白色虚线所示的剖面对应于  $d = 20a_0$ , 指示了图 4-5 (a) 中针对第二电导平台 (红实线) 提供的数据的参数, 该参数略大于  $u_T$  的区间。

当共振发生在相同的探针强度下时, 移动探针位置, 例如将探针放置在偏离中轴线的位置, 如图4-9的结果所示。当靠近条带的边缘时, 电导修正增长发生在更低的探针强度下, 这可以从被截断的势场中的限制态的行为中得出。

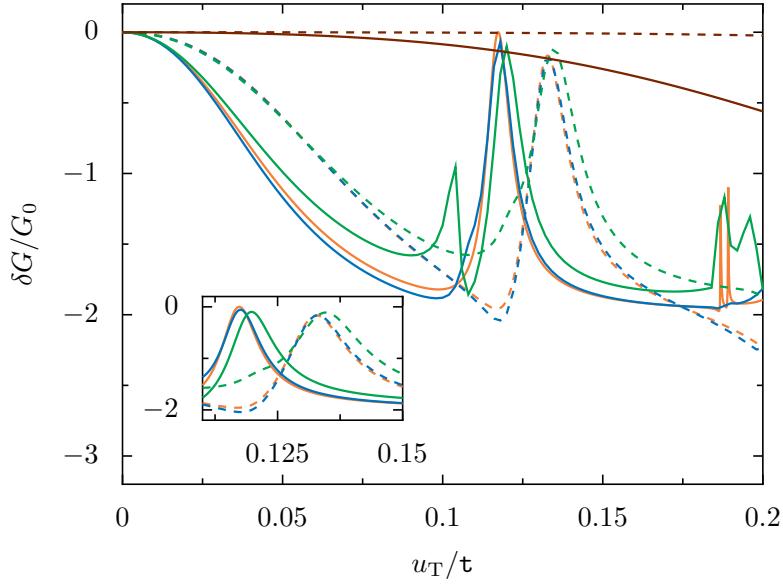


图 4-9: 宽度为  $W_L$  的金属性扶手椅 GNR 关于探针强度  $\mu_T$  的 SGM 电导修正, 其中探针分别放置在条带  $x = 0$  (橘黄色),  $x = 25a_0$  (蓝色),  $x = 50a_0$  (绿色) 和  $x = 100a_0$  (棕色) 的中轴线上。实线和虚线分别代表未加扰动的第二电导平台 (图 4-2 的  $P_2$  点) 和第三电导平台 (图 4-2 的  $P_3$  点) 上的值。插图为更加精细计算的电导修正的峰值附近的放大图。

#### 4.4.2 石墨烯纳米收缩结构中的 SGM 响应

在纳米带中定义的 GNC 情况下, 我们没有明确定义的导电平台 (见图4-2中的彩色实线), 因此我们期望 SGM 电导修正的最低非零项是方程(4.13)的一阶项, 在非侵入性区域内呈对探针强度的线性依赖。图4-10的数值结果显示了 SGM 电导修正随着探针强度变化的依赖关系, 对于在图4-3中定义的所有情况下 (除了表征未受扰动的电导峰的点  $Q_2$  和  $S_2$  之外), 都验证了我们的理论。这些图中, 上面的面板对应着  $W_C = 399a_0$  和  $C = 25$  nm, 下面的面板对应着  $W_C = 199a_0$  和  $C = 25$  nm, 探针放置在这些 GNCs 的中心。

与 GNR 电导平台的负二阶修正不同, 具有线性  $u_T$  依赖关系 (带有相应颜色的虚线) 的一阶修正可以是正的或负的。电导修正值的矩阵元(4.8)由未受扰动的透射和反射振幅一起决定, 比起 GNR 的情况更难计算, 因为散射波函数通常不是已知的 (除了如 [215] 中的突变结构等特殊情况)。可以在图4-10中观察到, 线性行为的范围相当受限, 因为高阶项在中等的探针强度, 如  $u_T \approx 0.01t$  时就变得重要了。

图 4-3 中的点  $Q_2$  和  $S_2$  (图 4-10 中的红线) 对应于由宽度为  $W_C$  的虚构 GNR

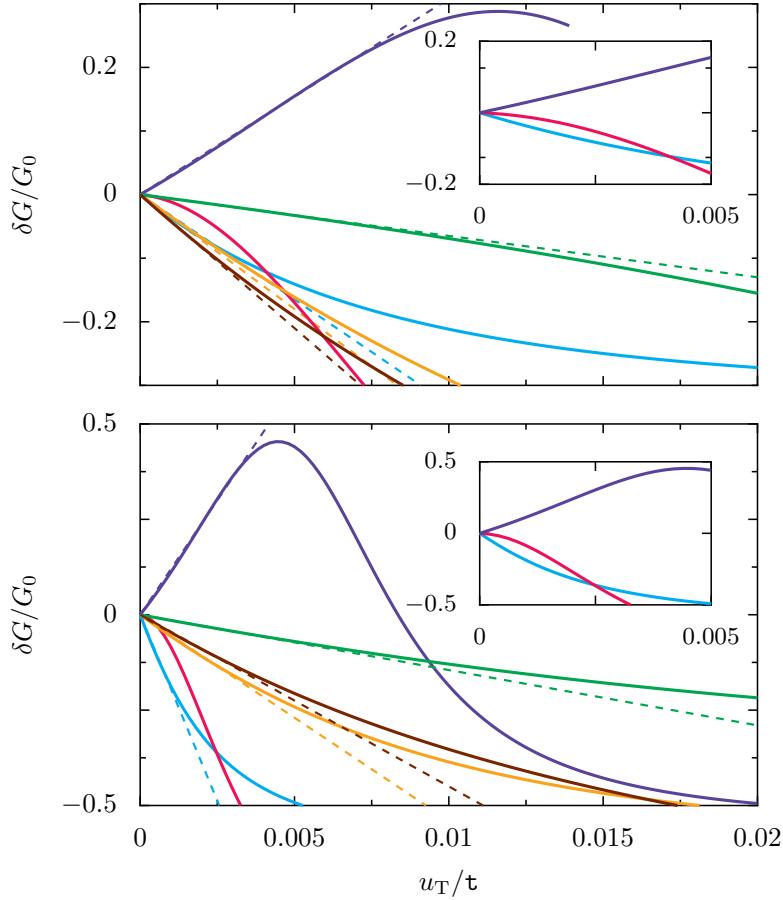


图 4-10: 对于一个宽度为  $W_C = 399, a_0$ ,  $C = 25$  nm 的 GNC (上图), 以及一个宽度为  $W_C = 199, a_0$ ,  $C = 25$  nm 的 GNC (下图), 在中心放置一个宽度为  $d = 20a_0$  的探针, 分别展示了在不同的强度下的电导修正变化。不同的实线对应于上(下)图中颜色相同的点  $Q_i$  ( $S_i$ ), 这些点对应于未受干扰的情况。虚线表示低探针强度下 SGM 响应的线性拟合。插图: 点  $Q_i$  (上图) 和  $S_i$  (下图) 定义的条件在小的  $u_T$  区域的放大。点  $i = 1, 2, 3$  表征未受干扰情况下的电导峰值。

的未扰动幺正输运。由于此时二阶修正占主导地位, 因此在非常小的  $u_T$  范围内, 导致了图4-10中观察到的二次依赖关系。如图4-3中的绿线所示的  $Q_5$  和  $S_5$  点对应于平台状条件, 表明在接近电导量子化的情况下, 线性修正(4.13)被削弱。上图中的整体电导比下图小, 因为前者呈现了比后者更平滑的结构, 而平滑结构中的十分好的的电导量子化平台削弱了一阶修正(4.14)的贡献。

图4-11展示了在一个GNC中, 电导修正随着探针位置的变化图, 其中未受扰动的条件对应于图4-3(b)中点  $S_4$ (橙色)。在非侵入性弱探针情况下( $u_T = 0.002t$ ), 分别采用两个探针电势范围值:  $d = 20a_0$  (上图) 和  $d = 100a_0$  (下图)。在两种情况下, 最强的 SGM 响应出现在探针靠近 GNC 中心的最窄区域, 这与先前的实

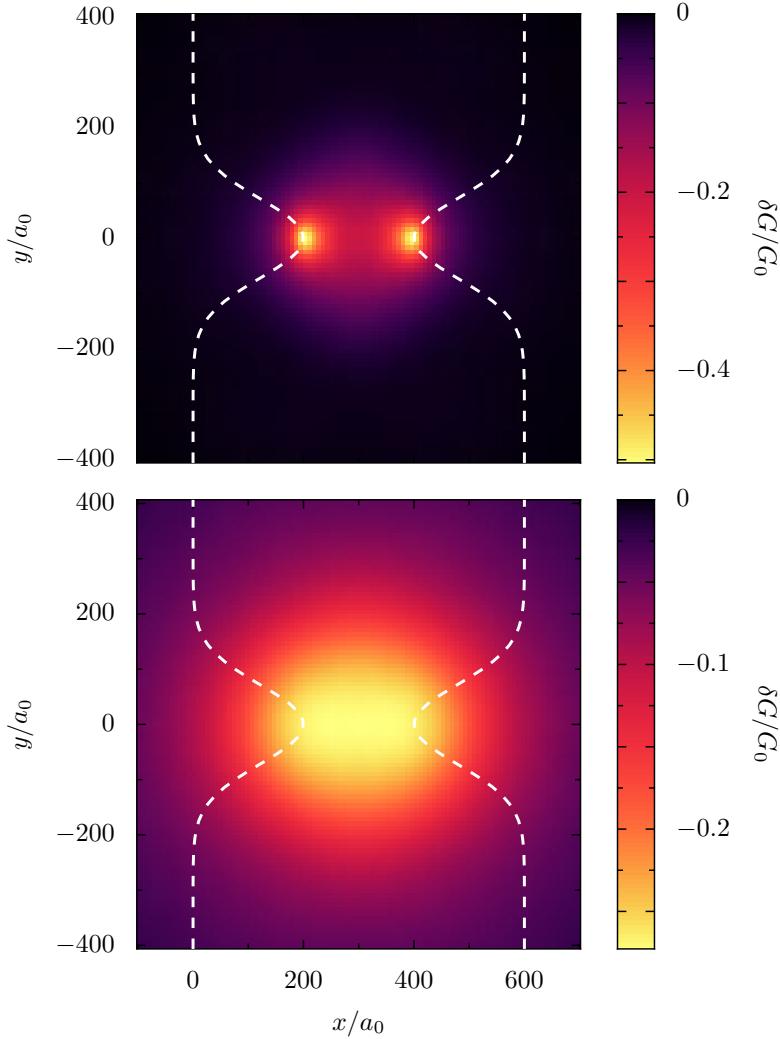


图 4-11: 方程 (4.2) 定义的 GNC 的 SGM 扫描, 其中  $W = 600 a_0$ ,  $W_C = 199 a_0$ ,  $C = 25 \text{ nm}$  (白色虚线), 对应于图 4-3 下面板中的点  $S_4$  的未受扰动状态。探针电势强度为  $u_T = 0.002 \text{ t}$ , 而探针势范围对应于上 (下) 面板分别为  $d = 20a_0$  ( $d = 100a_0$ )。

验 [201] 和理论工作 [205, 242] 是一致的。这种强烈的响应在图中的尺度上压倒了从 GNR 包围结构中产生的调制, 如图 4-4 所示。一方面, 探针强度比在 GNR 中进行 SGM 扫描的示例中要小得多。另一方面, 点  $S_4$  对应于极限 GNR 的第三个电导平台, 由图 4-2 中的点  $P_3$  描述, 其中 SGM 响应比第二个电导平台 (点  $P_2$ ) 要弱得多。较小的探针 ( $d = 20a_0$ ) 产生的信号比大探针 ( $d = 100a_0$ ) 要弱, 因为电势(4.4)随着  $d$  减小而变得不那么有效 [参见式(4.34)]。我们注意到, 在图 4-11 中, SGM 电导修正不仅在收缩结构中心是负值 (图 4-10 (b) 中的橙线), 而且在整个区域都是负值。

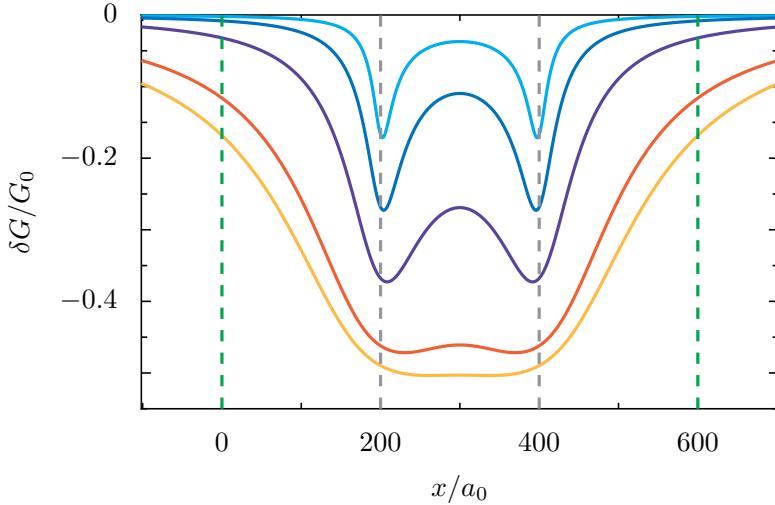


图 4-12: 对图 4-11 中的 GNC, 沿着横向中心线 ( $y = 0$ ) 进行了不同探针电势范围 ( $d/a_0 = 10, 20, 40, 80, 100$ , 从上倒下) 的 SGM 扫描。灰色垂直虚线表示收缩结构中最窄处的位置, 绿色垂直虚线表示定义 GNC 的纳米带的宽度。

图4-11的两个面板之间的一个重要差异是, 对于小探针的 SGM 响应在 GNC 最窄部分的边缘处具有两个局部最小值的空间特征。图4-12展示了当探针沿着  $y = 0$  线移动时的电导变化, 对于不同的宽度 ( $d/a_0 = 10, 20 \dots, 100$ ), 说明逐渐变宽的探针会模糊边缘处的局部特征。图4-11的空间特征相当普遍, 因为它们在大多数未受干扰的条件下都会出现, 但也可以观察到其他行为, 即对于点  $S_1$  (如图4-13所示), 无法获得 SGM 信号的聚集。

在半导体 QPCs 中, 文献 [245] 表明在某些情况下, 弱侵入的 SGM 响应可以与未受干扰的部分局域态密度 (Partial Local Density of States, PLDOS) 联系起来, 定义为

$$\rho_{1,\varepsilon}(\mathbf{r}) = 2\pi \sum_{a=1}^N |\Psi_{1,\varepsilon,a}(\mathbf{r})|^2 \quad (4.45)$$

其中对应于电子从导线 1 以能量  $\varepsilon$  射入散射体, 并且散射态由式 (3.39) 给出。PLDOS 表示电子的能量本征态在 GNC 中的局部态密度, 对于局域探针, 当 QPC 处于单个开放通道条件下, 一阶电导变化与 PLDOS 之间存在线性关系。而当 QPC 处于电导平台上时, 二阶电导修正满足  $\delta G^{(2)}(\mathbf{r}_T)/G_0 = -\rho_{1,E}^2(\mathbf{r}_T)$ , 其中  $\mathbf{r}_T$  是被传输电子在导线的位置。研究表明, 对于不完美的传输, 上述关系的偏差很小, 只要探针的范围保持较小即可 [245]。在图 4-14 的上面板, 我们探讨了上述关系, 并绘制了图 4-11 所考虑的 GNC 的 PLDOS, 结果显示探针对收缩结构的最窄部分的边缘处的 PLDOS 有很大的增强。

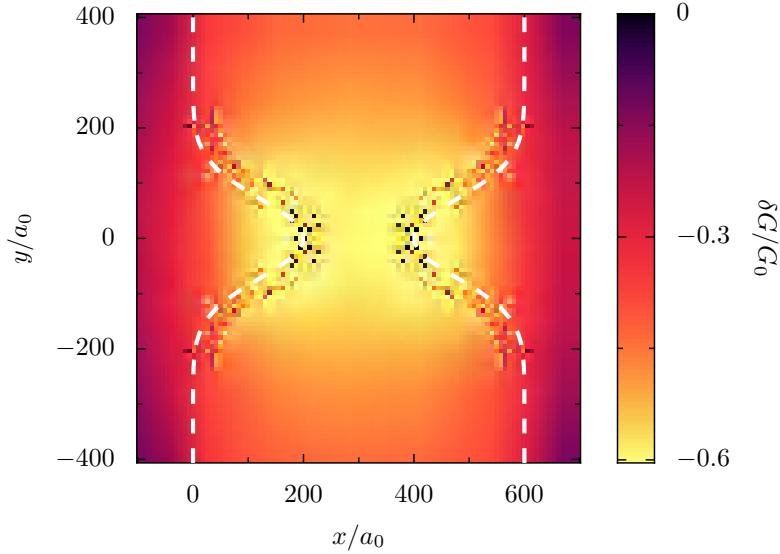


图 4-13: 方程 (4.2) 定义的 GNC 的 SGM 扫描, 其中  $W = 600a_0$ ,  $W_C = 199a_0$ ,  $C = 25\text{ nm}$  (白色虚线), 对应于图 4-3下面板中的点  $S_1$  的未受扰动状态。探针电势强度为  $u_T = 0.002\text{ t}$ , 探针势范围为  $d = 20a_0$ 。

一项使用氮-空位中心磁力计的新型成像技术已经揭示了, 微米级狭缩口(欧姆区域)的电流密度集中在最窄部分的边缘处 [246]。当将温度降低到 200 K 以下时, 欧姆机制将让位于弹道机制, 电流密度沿缩口中心线变得均匀。我们所计算出的电流密度结果(图 4-14 的下图)与文献 [246] 中的弹道区域结果一致。因此, PLDOS 中出现的强烈特征, 并且被相对较小的探针的 SGM 响应所凸显, 似乎对电流密度没有影响。

#### 4.4.3 锯齿形边界

目前为止, 我们主要讨论了具有扶手椅边缘的情况, 在这种情况下, 特征能量和特征函数具有附录A中所呈现的简单形式, 并且可以得到微扰范围内的 SGM 电导修正的解析表达式。对于具有锯齿形边缘的情况会变得复杂, 因为在 GNR 中, 可能的横向动量取决于纵向动量。与扶手椅边缘相比, 另一个不同之处在于, 锯齿形 GNR 中存在具有小  $|\varepsilon|$  值的平带, 这些平带对应于每个子晶格边缘上的手征特征态。

如图 4-15 所示, 宽度为  $W_L = 599a_0$  的锯齿形 GNR 的电导呈现出对  $E$  的阶梯状依赖关系(粗黑实线)。第一个电导平台在  $G = G_0$  处对应于沿电流方向的手征模式, 而随后的平台则由于两个石墨烯谷的模式简并引起的, 并且相互之间间距为  $2G_0$ 。

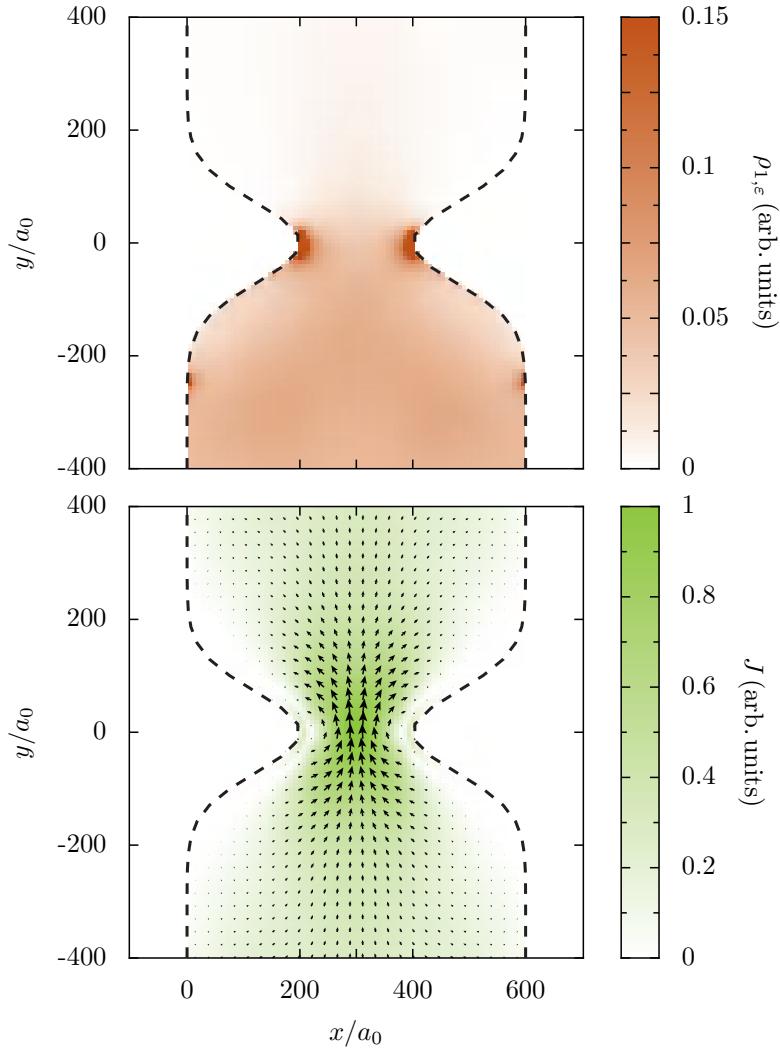


图 4-14: 上面板: 从 GNC 下方入射的局部态密度 ((4.45)), 计算的是图4-11中的 GNC (以任意单位表示)。下面板: 相应的电流密度。

一旦在一个锯齿形 GNR 上定义了一个收缩结构 (其轴线与图 4-1 的设置相比旋转了一个  $\pi/2$  的角度), 与 GNR 相比, 所得到的电导会降低 (图 4-15 中粗彩色线)。正如在文献 [235] 中所指出的那样, 在锯齿边缘的电导平台比在扶手椅边缘更好定义, 特别是对于宽 GNR 的情况。在低能区域, 具有最大宽度 ( $W_C = 499a_0$ , 棕色实线) 的 GNC 不会破坏周围 GNR 的完美导电通道。而较窄的 GNC(深蓝色、橙色、绿色和紫色实线)会在低能区破坏完美导电通道, 类似于图 4-2 中扶手椅形 GNC 的情况, 可以观察到与准束缚态相关的尖锐共振现象 [238, 239]。细虚线表示宽度等于具有相应颜色的 GNC 的最窄距离  $W_C$  的 GNR 的电导。在锯齿形的情况下, 宽 GNC 的电导可能大于相应宽度  $W_C$  的 GNR 的电导。在图 4-15 中, 当虚构的 GNR 的由于完美的电导通道为  $G_0$  时, 而因为 GNC 中新的横向模式是

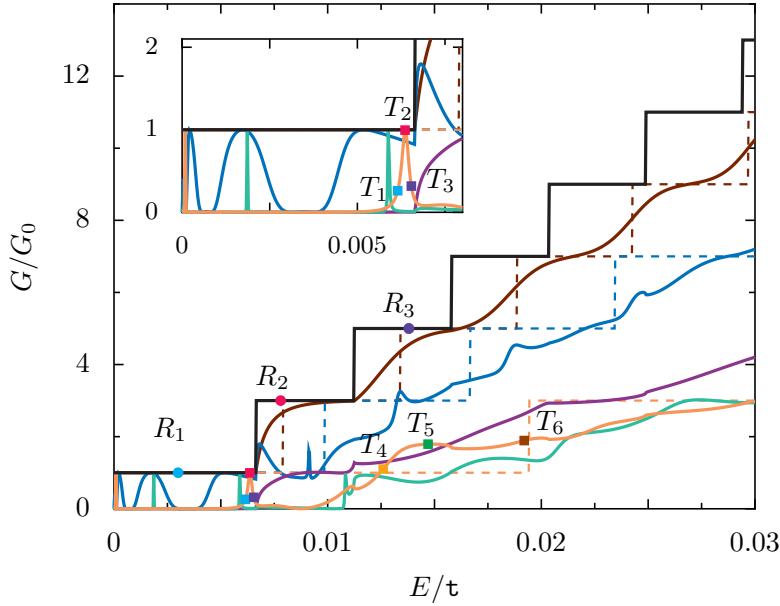


图 4-15: 不同 GNRs 和 GNCs 电导关于费米能的函数。粗的黑色实线对应于宽度为  $W_L = 599 a_0$  的 GNR。粗的彩色实线表示不同形状的 GNCs 的电导:  $W_C = 499 a_0$ ,  $C = 25 \text{ nm}$  (棕色),  $W_C = 399 a_0$  and  $C = 25 \text{ nm}$  (深蓝色),  $W_C = 199 a_0$  and  $C = 40 \text{ nm}$  (绿色),  $W_C = 199 a_0$  and  $C = 25 \text{ nm}$  (橘黄色),  $W_C = 199 a_0$  and  $C = 10 \text{ nm}$  (紫色)。细的虚线表示具有与相应 GNC 宽度  $W_C$  的虚拟 GNR 的电导 (根据颜色约定)。插图: 主图的低能区域的放大图。不同的点  $R_i$  ( $T_i$ ) 定义了选择执行锯齿形 GNR (GNC) 的 SGM 分析的参数。

打开的, 棕色和深蓝色粗实线在某些能量区间内可能高于相应的虚线。

锯齿形边缘的 GNC 的电导平台比扶手椅边缘的略微更好一些, 这可以从电导的输运特征模式分解中理解。对于前一种情况, 模式会随着  $E$  的增加而被打开 (如图4-16所示), 达到了比在图 4-3 中展示的扶手椅边缘情况更快的幅值为 1 的传输。

对于锯齿形 GNR, SGM 探针的电导响应与扶手椅情况相比存在一些相似和不同的地方。在图 4-17 中, 我们展示了 SGM 电导修正与  $u_T$  的依赖关系, 对于一个  $d = 20 a_0$  的探针被放置在条带的纵向轴线上 ( $y = W/2$ ), 分别为三种情况下的未扰动电导在第一个 (蓝色实线), 第二个 (红色实线) 和第三个 (紫色实线) 的电导平台 (分别为图 4-15 的  $R_1$ ,  $R_2$  和  $R_3$ )。与图 4-5 (a) 所示的扶手椅 GNR 的情况类似, 完美电导通道似乎不受探针影响 (蓝线), 而另外两种未扰动情况则表现出对  $u_T$  的初始二次依赖性, 随着更大电势强度的出现, 电导重新增大 (红线和紫线分别对于  $R_2$  和  $R_3$ )。然而, 当探针的作用破坏了手征模式的完

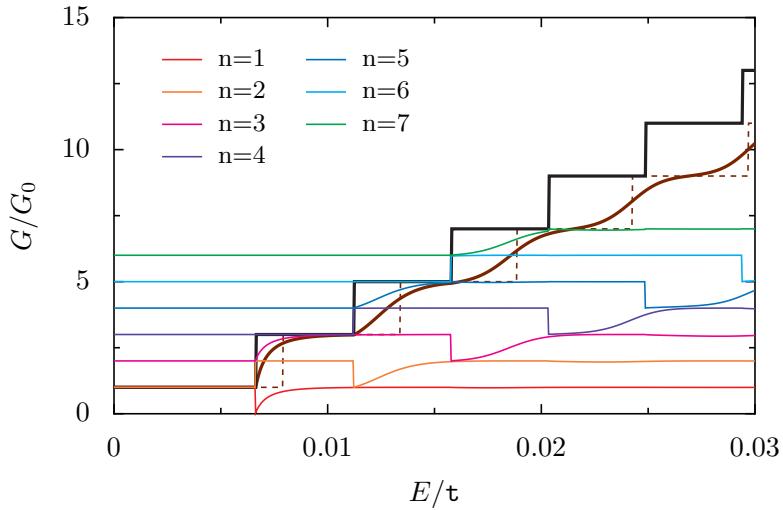


图 4-16: 图4-15所示的  $W_L = 599 a_0$ ,  $W_C = 499 a_0$  和  $C = 25 \text{ nm}$  的棕色电导的分解, 以传输特征模态 (用  $n$  标记, 为带有相应图例的不同颜色的细曲线表示)。为了数据能够更好的呈现, 传输特征值在图中被排序并连续向上移位。

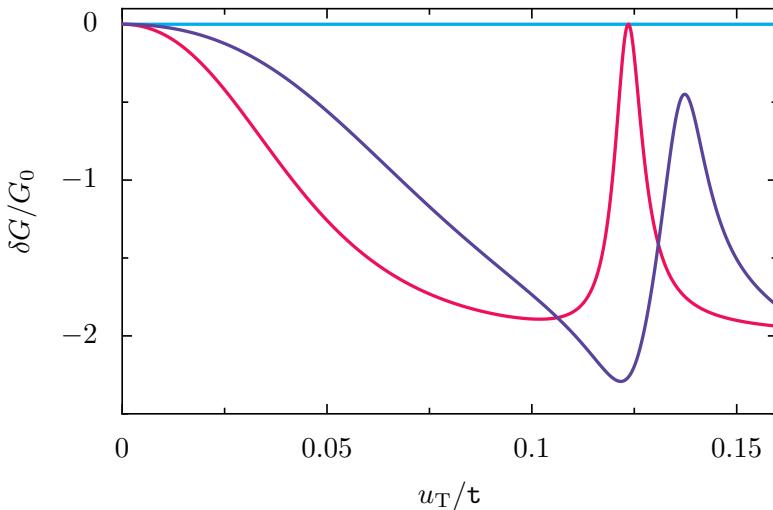


图 4-17: 宽度为  $W_L = 599 a_0$  的锯齿形 GNR 的 SGM 电导修正作为探针势强度的函数。电势宽度为  $d = 20 a_0$  的探针位于条带中轴线上, 对于三种情况, 未受扰动电导位于第一 (蓝色实线)、第二 (红色实线) 和第三个 (紫色实线) 电导平台 (图 4-15 中点  $R_1$ 、 $R_2$  和  $R_3$ )。

美电导时, 这种简单的图像就会被修改。

在图 4-18 中, 当探针被放置在条带的中轴线上 ( $y = W/2$ , 与图 4-17 中的颜色约定相同),  $y = W/4$  (棕色), 以及  $y = W/8$  (绿色) 时, 我们展示了 SGM 的电导修正值与  $u_T$  的依赖关系, 对于  $d = 20 a_0$  的探针电势, 其中未扰动的电导

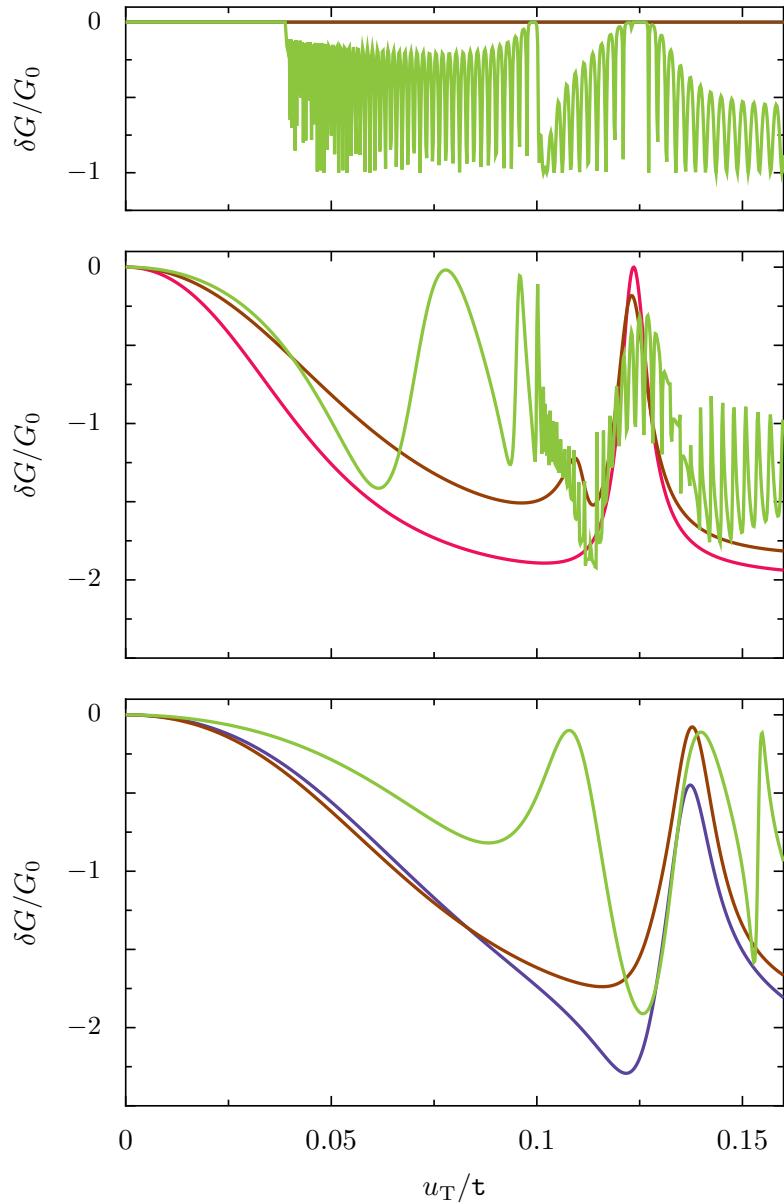


图 4-18: 宽度为  $W_L = 599a_0$  的锯齿形 GNR，当一个  $d = 20a_0$  的探针被放置在条带的中轴线 ( $y = W/2$ , 与图 4-17 中的颜色约定相同),  $y = W/4$  (棕色), 以及  $y = W/8$  (绿色) 时, SGM 修正值与探针电势强度的函数关系。上, 中和下子图分别对应于在图 4-15 中定义的三种未扰动的  $R_1$ ,  $R_2$  和  $R_3$  点。

平台分别对应于图 4-15 的  $R_1$ ,  $R_2$ , 和  $R_3$  (分别对应于上部, 中部和下部)。当探针靠近边缘时, 会出现明显的电导波动, 这个效应在文献 [205] 的数值模拟中已经被注意到。如果将探针保持在条带中轴线上, 同时增加其范围  $d$ , 也可以观察到类似的特征。对于  $d = 60a_0$ , 在  $u_T \simeq 0.075t$  时, 完美的电导会丧失, 之后出现强烈的振荡 (如图 4-19 所示)。这些结果与文献 [137] 的发现一致, 该研究证

明即使是最平滑的势能，如果强到足以在锯齿形 GNC 中形成局域 p-n 结，也会导致相当的散射，因为两个谷是由边界态联系在一起的。

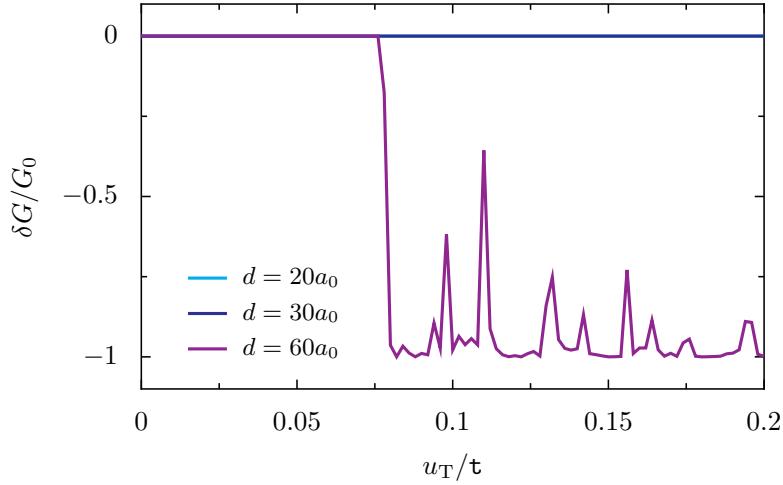


图 4-19: 放置在条带中轴线上的,  $d = 20a_0$  (蓝色),  $d = 30a_0$  (深蓝色) 和  $d = 60a_0$  的探针, 相应的 SGM 修正值与探针势强度的函数关系。

在小节4.3中发展的针对 SGM 响应的扰动方法很难推广到锯齿边界, 这是由于 GNR 能谱的特殊性质所致。扁平准简并带的存在阻碍了我们像方程(B.21)中那样对能量进行积分 (这是扰动方法的基础), 这是因为不能将积分能量区间限制在  $\varepsilon$  所属的区间。此外, 锯齿形石墨烯布里渊区的有限大小无法用狄拉克方程来表示, 因为这种连续的描述无法考虑横向方向上跨越原子数  $M$  的奇偶性所带来的差异, 即具有对称轴 (锯齿形, 偶数  $M$ ) 和, 没有对称轴 (反锯齿形, 奇数  $M$ ) 的 GNR 之间的对比 [137]。

可以通过紧束缚模型得到包含边界态的波函数的形式 [29, 222, 247–249], 因此, 探针电势矩阵元是谷简并的。如文献 [137] 中所述, 通过限制希尔伯特空间到最低  $|\varepsilon|$  态, 可以理解观察到 SGM 响应对探针位置或强度的依赖性, 以及对  $M$  奇偶性的相关性。对横方向上原子数奇偶性的依赖性出现在锯齿形 GNR 的 SGM 结果中。 $W_L = 598a_0$  的横向截面不同点的电导修正与  $u_T$  依赖关系和图 4-18 所示的  $W_L = 599a_0$  结果具有定性差异。对于具有不同奇偶性的两个不同宽度的条带随着  $d$  的不同会导致相应的差别。

在锯齿形 GNR 上定义的 GNC 的 SGM 响应表现出与扶手椅边缘类似的特征。在图 4-20 中, 我们展示了探针宽度为  $d = 20a_0$ , 位于收缩结构中心的情况下, 对于图 4-15 中标记的  $T_i$  点的未扰动条件的电导修正关于  $u_T$  的依赖性。类似于图 4-10 的结果, 大多数未扰动条件 (即点  $T_1$ ,  $T_3$ ,  $T_4$  和  $T_6$ ) 的电导修正呈

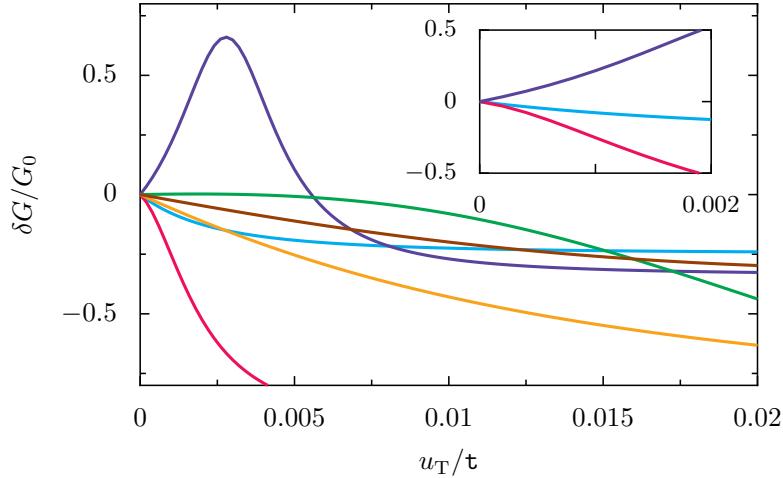


图 4-20: 对于定义在锯齿形 GNR 中的宽度为  $W_C = 199a_0$ ,  $C = 25\text{ nm}$  的 GNC, 当具有电势宽度  $d = 20a_0$  的探针位于条带中轴线上, 研究了 GNC 不同探针强度下 SGM 的电导修正。不同实线对应于图 4-15 中用相同颜色标记的  $T_i$  的未扰动条件。插图: 对由  $T_i$  点定义的条件进行了放大, 其中  $i = 1, 2, 3$  代表了未扰动电导峰上的值。

现出初始  $u_T$  的线性依赖性, 对应于一个电导峰值 (点  $T_2$ ) 或近似电导平台 (点  $T_5$ ) 的条件则呈现出二次依赖性。

图 4-21 中的 SGM 扫描图和图 4-11 相似 (经过  $\pi/2$  的旋转)。小探针 ( $d = 20a_0$ , 上图) 靠近 GNC 最窄部分边缘的两个局部最小值的空间特征对于较大探针强度 ( $d = 100a_0$ , 下面板) 模糊。SGM 响应在边缘附近没有振荡, 因为 GNC 有效的破坏了完美电导通道。

## 4.5 讨论和结论

我们研究了在 SGM 探针电势影响下石墨烯条带中的输运。我们将非侵入探针的 SGM 响应的扰动理论拓展到了石墨烯的情况, 并且已经在弱探针范围内证明了结果的有效性。在金属性扶手椅 GNR 中观察到的电导平台上, 探针诱导的电导修正时对探针强度的二次依赖, 并且始终为负。在零横向能量模式下会发生特殊情况, 其中二阶修正消失, 导致近乎完美的输运。当电导修正绘制为探针势强度和宽度的特定组合时, 会出现数据折叠, 表明小而强的探针能够导致与较大且相应较弱的探针相同的低阶电导修正。

对于更强的探针, 我们发现来自最低通道的电导贡献随着探针强度的增加会恢复到完全的电导输运。这些电导共振可以由探针电势下的受限态来解释。

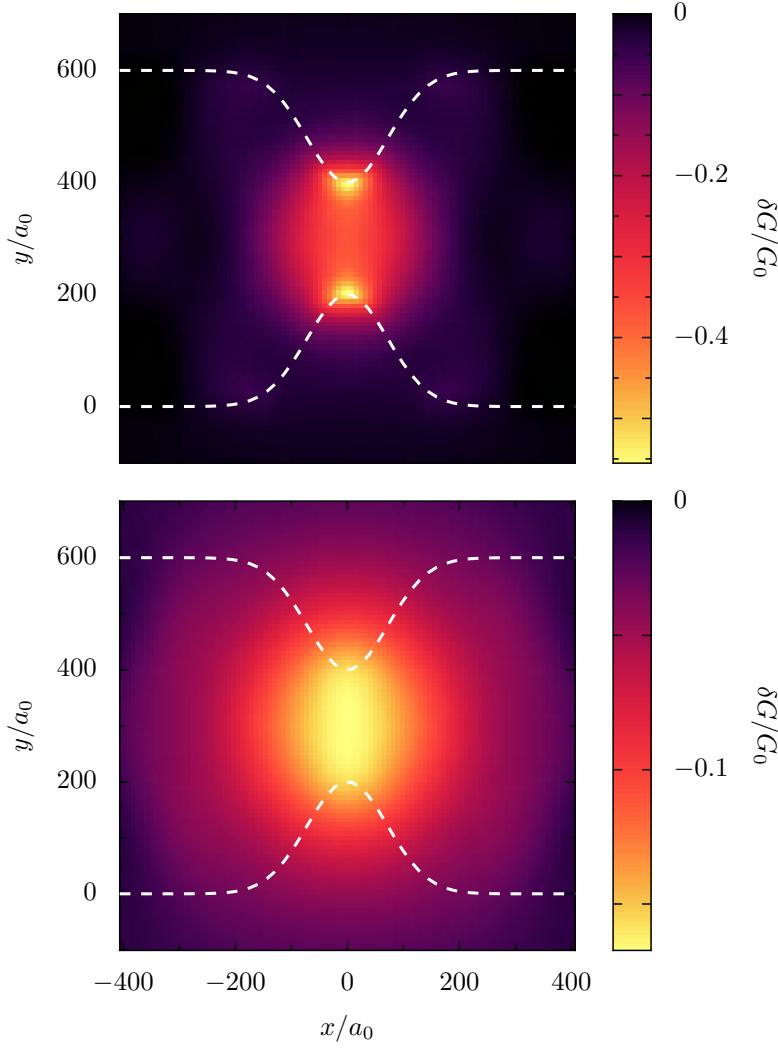


图 4-21: 在锯齿形 GNR 中上定义的  $W_L = 599a_0$ ,  $W_C = 199a_0$ , 以及  $C = 25 \text{ nm}$  (白色虚线) 的 GNC 的 SGM 扫描图, 未扰动的情况对应于图 4-15 中的  $T_4$ 。探针势的强度为  $u_T = 0.002 t$ , 而上(下)面板对应的探针宽度为  $d = 20a_0$  ( $d = 100a_0$ )

该理论也被应用于条带中定义的收缩结构。在这种情况下, 电导平台通常会丢失, 并且根据扰动方法预测, 对于非侵入探针的机制, 电导修正呈关于探针强度的线性依赖。数值结果证实了这一结论, 而在微弱的幸存电导平台中以及当未扰动条件对应于电导的最大值时, 则会呈现对探针强度的二次依赖性。

当探针放置在收缩结构的最窄部分且局部最大值靠近边缘时, 电导修正作为探针位置函数的数值结果显示了明显的空间特征。这种行为与未受干扰的 PL-DOS 在这些点的聚集程度有关。然而, 电流密度没有表现出相关行为。

锯齿形 GNR 表现出与扶手椅形类似的 SGM 响应, 具有二次电导修正, 除非靠近边界的探针电势足够强以产生局部 n-p 结并破坏手性边缘状态的完美电导。

在锯齿形纳米带上定义的 GNC 通常会破坏完美的通道输运，因此探针的作用类似于在扶手椅 GNC 中观察到的作用。这一结果很重要，因为对于扶手椅形边缘，已经开发了用于非侵入探针的扰动方法，此外，因为具有锯齿形和扶手椅形边界的中间态的 GNR 已被证明可以等效的被认为具有锯齿形边缘的情况 [213]。

前面提到的一些理论发现可以在石墨烯纳米结构中进行实验检验，包括 SGM 电导修正对探针电势强度及普遍标度的初始线性与二次依赖性、在非侵入性机制之外恢复完美电导、收缩结构中 SGM 扫描的空间特征以及完美电导通道可能被破坏。

将我们的理论方法拓展到微米尺寸，并与石墨烯中电子光学的半经典方法联系起来 [250, 251]，再考虑文献 [246] 中研究的欧姆到弹道转变，便有可能理解文献 [88] 中石墨烯电子的反常聚集现象。此外，本章开发的扰动方法可以拓展到有磁场情况，以解决场依赖性 SGM 实验的分歧 [73, 74, 81, 83, 86, 203, 241, 252]。该理论的其他可能推广包括双层石墨烯，其中 SGM 允许检测窄通道中的局域态 [84]，并观察从收缩结构发出的电子喷射流 [85]。

## 第五章 石墨烯量子点在小磁场下的输运特征

本章的研究问题始于对八边形石墨烯量子点的实验数据的数值模拟。我们当时发现石墨烯量子点关于费米能（靠近狄拉克点）和磁场分布（小磁场）的电导图中会出现明显的电导等高线。之后发现这种电导等高线区别于由薛定谔方程描述的传统 2DEG 中的，可称为相对论性的电导等高线。随后，我们对此问题进行了更深入的探索。发现对于不同形状的量子点，会出现不同类型的电导等高线，并且由其上局域态密度（部分局域态密度）对应的经典轨道决定。因为我们研究的出发点和实验是紧密联系在一起的，因此对数值和实验结果之间能否对应的问题进行了研究，并得到了一个关于器件大小、费米能范围和磁场范围三者之间的标度关系。该标度关系通过费米能和背栅压的关系就能将数值和实验数据进行联系。此外，因为实验器件一般都具有杂质，因此讨论这些杂质对电导等高线以及相应局域态密度的影响也十分有必要。总之，本章的研究揭示了石墨烯量子点中的局域态密度（尤其是指针态）对其输运性质的影响，并对与实验相关的问题进行了探讨，可能对相关的数值和实验一定的价值。

### 5.1 简介

量子疤痕，即倾向于集中在对应经典混沌哈密顿系统的不稳定周期轨道上的波函数，是量子混沌研究中的一个基础问题。在半经典状态下，局域的波函数可以被看作是许多平面波的叠加。参照经典混沌，可以假设这些平面波的方向是均匀分布的。直觉上，人们可能期望波函数在位置空间中具有均匀的分布。然而， McDonald 和 Kaufman 在研究古典混沌型运动场弹球中的亥姆霍兹方程时发现了本征态可以高度不均匀，并且经典不稳定周期轨道附近具有显著的态密度聚集的特征 [42, 43]。后来，Heller [34] 根据随机波模型的物理解释创造了术语“疤痕（scarring）”，并且 Bogomolny [253] 和 Berry [254] 基于半经典格林函数对疤痕效应进行了理论解释。从那时起，量子疤痕就成为了非线性物理学研究的一个活跃领域。

考虑垂直于平面的磁场时，洛伦兹力的存在影响了经典的二维弹球动力学 [255]。磁性弹球具有丰富的物理现象学以及许多有趣的数学特性，后者源于粒子的弧形轨迹与边界反射之间的相互作用 [255–257]。从物理角度来说，磁性量子弹球是研究磁输运特性，尤其是量子霍尔效应的起点 [258, 259]。此外，它

们构成了一个重要的领域来理解量子到经典的转变以及量子混沌 [260, 261]。

磁性量子能谱和波函数反映了对应经典轨道的特征 [262]。在强磁场下，局域在弹球的边界的波函数称为边界态，其经典对应是沿着边界的跳跃运动 [263–265]。而当磁场不太大时，会出现弯曲疤痕态。文献 [23] 通过对混沌石墨烯弹球的研究获得了相对论量子系统中能发生疤痕现象的第一个证据。而加磁场后石墨烯弹球中的疤痕态的存在性仍然是一个开放的问题。因而对这些“疤痕”类的波函数在石墨烯中的输运特征的研究对基础和应用物理都具有一定的价值。

量子点 (QD) 可用于形成自旋量子比特，这引起了许多科学家的兴趣 [171–175]，然而，自旋退相干效应极大地限制了它们在自旋量子比特上的进一步应用。石墨烯作为一种碳基材料成为自旋量子比特的极佳候选者，因为其弱自旋轨道耦合和弱超精细相互作用，有效削弱了自旋退相干效应 [176]。因此，石墨烯量子点 (GQD) 多年来备受关注。除了在自旋量子比特上的潜在应用外，大量实验和理论工作发现 GQDs 为研究狄拉克费米子的基本性质如克莱因隧道效应 [177–179]、量子光电子学 [180, 181]、Berry 相位 [182, 183]、电子-电子相互作用 [184] 以及量子混沌 [20–23, 27, 30, 185] 提供了一个重要的平台。目前，对 GQDs 中的量子限制效应研究仍然是凝聚态物理中最热门的课题之一。

当 QD 打开时，它们将提供一个研究输运的经典和量子对应的天然系统。从经典的观点来看，这些量子点拥有一个混合相空间，它产生了一系列封闭的、规则的轨道以及广阔的混沌海。然而，通过研究量子点的量子性质，人们发现波函数会发生十分明显的反常凝聚，形成类似疤痕样的形态。当量子点通过 QPC 打开时，许多正常的本征态通过与环境（量子点外）的强烈相互作用而发生“退相干”。然而，仍然有大量的本征态保持强烈的相干性。这些不与环境耦合的状态被称为“指针态” [266]，并且会导致电导涨落。每个电导涨落都具有特征性的由量子隧穿导致的 Fano 共振类型 [119]，当电流通过量子点时，可以观察到一系列的电导涨落 [267, 268]。在早期研究中假设这些电导涨落是由杂质材料引起的 [269]。后来发现当参与这些量子点研究的材料的品质相对较高时，仍然会发现电导涨落，因而人们开始认为电导涨落是由量子点内的混沌行为引起的。相关研究已经确定电导涨落确实与开放量子点内的规则轨道相关 [121]，即使对于典型的混沌型运动场量子点也一样 [122]。

近年来，电导涨落与经典轨迹之间的关系也在 GQDs 中被研究了 [169, 185, 270]。文献 [169] 研究了石墨烯系统中的电导涨落，主要关注电导涨落与经典动力学的相关性。他们发现当加入磁场后，经典轨道相关的输运特征消失了，而且电导随费米能和磁场变化时，规则和随机电导涨落都会发生。他们通过分析可积

和混沌型的石墨烯量子点系统揭示了临界费米能量、临界磁通量和量子点大小之间的普遍的标度关系。然而，该文章中电导的规则涨落以及标度关系都是在大磁场下的输运特征。因为大磁场下的指针态为边界态，并不能反映出不同形状量子点的磁场下的动力学性质，因此我们的研究的侧重小磁场。我们详细分析了多边形石墨烯量子点在不同磁场和费米能下的输运特征。对其中与形状相关的两种类型的电导等高线形成的条件进行了研究。随后为了验证电导等高线和相应指针态的稳定性，我们对具有不同分布杂质势的石墨烯量子点的输运特征进行了研究。研究发现，当施加的杂质势不太大的时候，杂质势对电导等高线以及相应的 PLDOS 影响都很小。而当杂质势的强度超过了临界值时，量子点中的 PLDOS 会受到杂质势的严重干扰，并使得电导等高线模糊直至消失。此外，我们给出了一个更加普适的关于量子点大小、费米能范围和磁场范围三者之间的标度关系。而且通过费米能与实验中的背栅压的关系 [114, 271]，可以给出一个数值模拟的小器件和实验测量的大器件的电导图的标度关系。关于电导等高线的结果也得到了实验数据的支持 [270]。

## 5.2 模型和方法

### 5.2.1 具有 Peierls 替换的紧束缚哈密顿量

我们使用标准的紧束缚模型框架并结合格林函数方法来计算通过各种几何形状的石墨烯量子点的电导。紧束缚哈密顿量具有以下形式

$$H = \sum_{i,j} -\mathbf{t}_{ij}(c_i^\dagger c_j + \text{H.c.}), \quad (5.1)$$

其中对所有最近邻对求和， $c_i^\dagger(c_j)$  是产生（湮灭）算符， $\mathbf{t}_{ij}$  是原子从格点  $j$  到格点  $i$  的跳跃能量，并且将格点势能设置为参考能 0，因为它对所有原子都相同。在没有磁场的情况下，最近邻跳跃能量为  $\mathbf{t}_{ij} = \mathbf{t}$ 。当施加具有矢量势  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  的垂直均匀磁场  $\mathbf{B}$  时，跳跃能量具有额外的相位因子，其形式为

$$\mathbf{t}_{ij} = \mathbf{t} \exp(-i2\pi\phi_{i,j}), \quad (5.2)$$

其中  $\phi_{i,j} = (1/\phi_0) \int_j^i \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}$ ，并且  $\phi_0 = h/e = 4.136 \times 10^{-15} \text{ Tm}^2$  是量子磁通。

在低温下，量子点器件的电导  $G$  与透射率  $T$  近似成正比，由 Landauer 公式  $G(E) = (2e^2/h)T_G(E)$  给出。本章节通过 Kwant [186] 对电导、PLDOS (4.45) 及电流密度进行数值计算，但是小节 5.3.4 对电导、LDOS 及局域电流密度的计算由格林函数方法给出（详细可参考章节三中的 3.3.1）。

### 5.3.4 实验验证

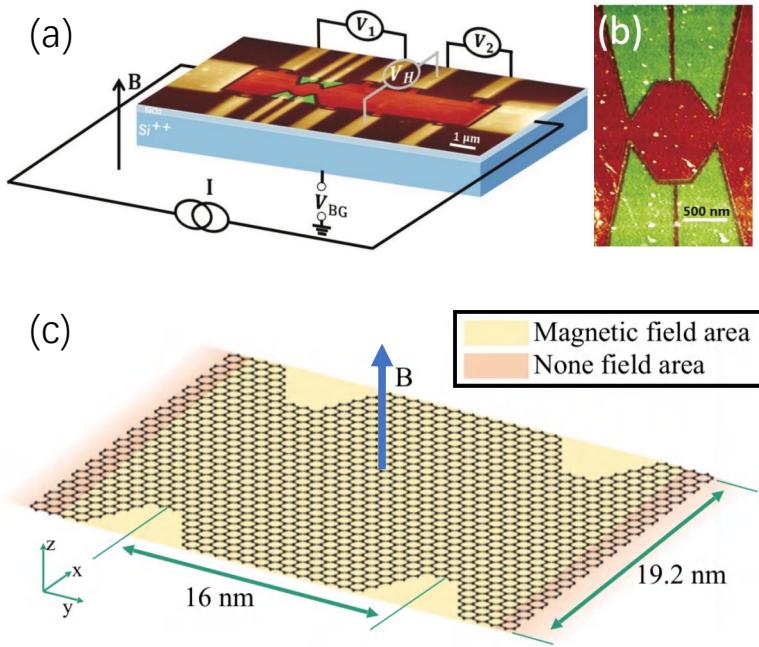


图 5-14: 实验中的石墨烯腔: (a) 石墨烯器件的假色原子力显微镜 (AFM) 图像以及器件结构和测量设置的示意图。其黄色部分为电极, 红色区域是石墨烯, 绿色突出显示的区域是通过蚀刻沟槽与空腔隔离的石墨烯片。(b) 为 (a) 中腔体 AFM 图的放大图。(c) 数值计算使用的垂直于平面的磁场中的石墨烯腔装置的示意图。其中, 磁场仅存在于腔体区域。

我们的数值结果也得到了实验组数据的很好验证。图5-14 (a) 和 (b) 所示的为实验所用的石墨烯腔体的示意图, 器件大小一般为微米尺度。在数值计算中, 实验所用的石墨烯腔可以在跳跃能达到第三最近邻的紧束缚哈密顿量框架内的如图如图5-14 (c) 所示的晶格结构构建模, 模型大小为 16 nm × 19.2 nm。其哈密顿量形式为(3.60)。由于计算资源的限制, 模拟超过 1 μm 的实验器件是不现实的, 因此数值计算中采用的模型一般比较小。然而通过我们在小节5.3.3中推导的量子点大小, 费米能和磁场三者间的标度关系并结合费米能和背栅压之间的关系, 因此理论上我们可以利用数值模拟中的小器件去揭示相应实验器件中的物理现象。

如图5-14 (b) 所示的实验器件宽度约为 1 μm, 数值模拟中所用的模型的宽度为 19.2 nm, 因此可以预计数值计算中计算的磁场范围约为实验中磁场范围的 2500 倍。图5-15所示的为实验测量和数值计算的电导图的特征模式的对比

图。图5-15 (a) 的实验测量中磁场范围为  $-0.2\text{ T}$  到  $0.2\text{ T}$ , 因此理论上数值模拟所用的磁场范围应为  $-500\text{ T}$  到  $500\text{ T}$ 。然而这种对应显然是不正确的, 因为数值中所使用的模型在约  $200\text{ T}$  时便出现明显的朗道能级, 因此和实验数据明显不符合。这种与小节5.3.3中标度关系不符合的结果可以从另一个角度进行理解。当增加垂直于石墨烯平面的磁场  $B$  增加时, 载流子的经典回旋半径随之减少  $R_c = \hbar v_F/eB$  [160]。一旦磁场超过最大值  $B_{\max} = \hbar v_F/eD$ ,  $R_c$  到达腔体的尺度  $D$ , 然后边缘态开始形成, 此时量子霍尔效应占主导地位。然而, 这种量子霍尔机制超出了我们数值建模的范围, 因为我们关注的重点是小磁场区域。随着模型的尺寸从实验器件的  $D$  缩小到更小的  $D_{\text{scale}}$ , 相应的磁场可以拓展到  $B_{\text{scale}} = \hbar v_F/eD_{\text{scale}}$ , 从而无需考虑量子霍尔区域。这种器件大小和磁场范围的标度关系可从文献 [277] 得到,  $D = 2\hbar(E/\tau)/3ea_0B$ 。然而, 这种标度关系确实和器件的大小有关系的, 文献 [278, 279] 中论述, 当器件的大小超过  $0.5\mu\text{m}$  时, 磁场范围和器件大小(面积的根方)成反比, 但是对于较小的器件, 标度关系便有所差异。因此, 随着器件大小的不同, 标度关系肯定会有转变。结合我们在小节5.3.3推导出的标度关系, 因此可以推断, 随着器件从小到大, 器件大小与磁场的标度关系先是器件面积的根方  $D$  和磁场范围  $\Delta B$  成反比, 随后转变为器件的面积  $S$  与磁场范围  $\Delta B$  成正比。对于本实验, 我们需要采用前者的标度关系, 因此图5-15 (b) 中数值计算的电导图的磁场范围也是合理的。接下来, 我们讨论背栅压(费米能)和器件大小的标度关系。我们以狄拉克点为起点, 利用背栅压和费米能的关系(5.24)。可以得到如图5-15中的实验和数值结果的对比。我们标记了两个特征的电导模式, 图5-15中的 I 和 II, 可以发现这两个区域中的实验和数值结果十分的相似。从数值结果图5-15 (b) 中可以看到有抛物线型和直线型的两种电导等高线。

为了更清楚的了解电导图中特有的两种类型的电导轮廓线, 我们也做了一个与图5-14 (c) 形状相似的由方格子构成的薛定谔型量子点, 其色散关系为  $E = \hbar^2 k^2/(2m^*)$ , 其中  $m^*$  为等效质量。遵循与小节5.3.1中的推导步骤, 我们可得到与方程(5.7)和方程(5.12)相似的薛定谔型关系

$$\frac{E}{\tau_S} = \left( \sqrt{\frac{E_{B=0}}{\tau_S}} \pm \frac{2\pi S_e B}{L_e B_0} \right)^2, \quad (5.25)$$

和

$$\frac{d(E/\tau_S)}{d(B/B_0)} = \pm 4\pi \sqrt{\frac{E_{B=0}}{\tau_S} \frac{S_e}{L_e}}, \quad (5.26)$$

其中,  $\tau_S = \hbar^2/(2m^*a_S^2)$  为两个近邻格点之间的跳跃能,  $a_S = 1.92\text{ nm}$  为两个格点之间的距离, 以便当石墨烯和薛定谔量子点大小相似时, 其中原子数目也接近。

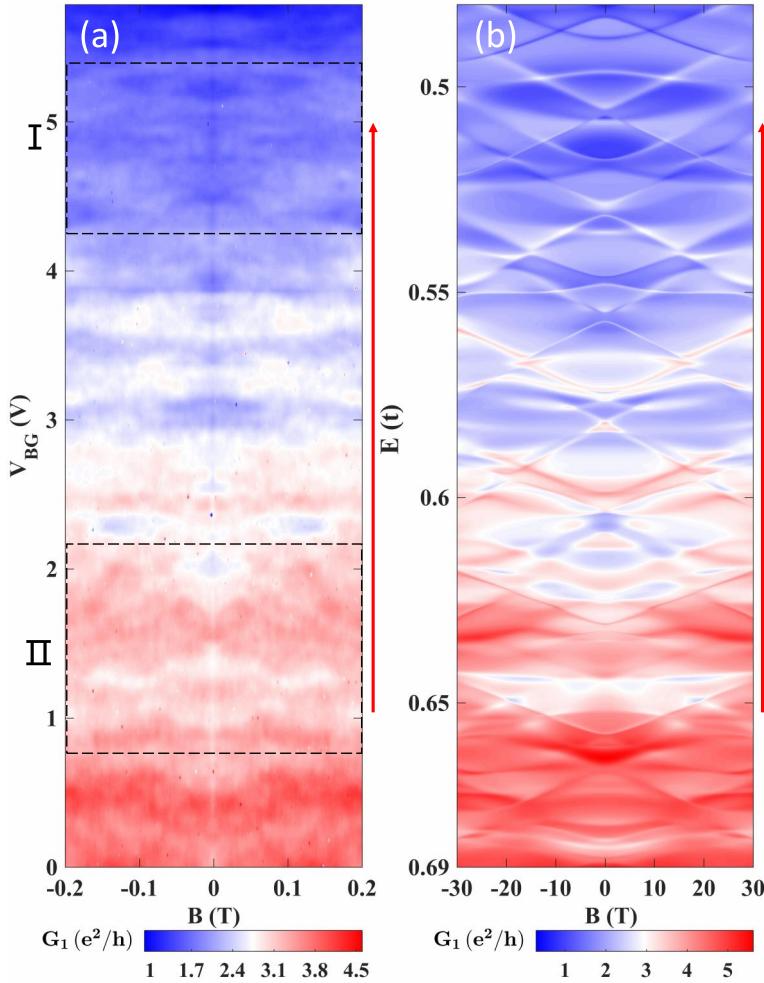


图 5-15: 特征电导图。(a) 在温度为  $T = 60 \text{ mK}$  测量的大范围  $V_{BG}$  下的石墨烯腔体的电导图。(b) 石墨烯腔的数值模拟电导图。其中, 发现了实验测量和数值计算中相似的特征电导图。红色箭头指向的是狄拉克点方向。

图5-16为具有相同形状的石墨烯和薛定谔腔的电导图。我们发现二者的电导图具有很大的区别。比如图5-16 (a) 中石墨烯腔的电导图的直线型的电导等高线为等间距的分布, 且电导等高线的斜率一致; 而图5-16 (b) 中薛定谔腔的电导图的直线型的电导轮廓线为非等间距的, 且随着费米能增大, 电导轮廓线的斜率越来越大。如小节5.3.1.2中所论述的那样, 直线型的电导轮廓线通常是由  $S_e/L_e$  恒定的回音壁型指针态导致的。对于我们研究的八边形量子点, 为了获取相应的轨道信息, 我们在每个直线型电导轮廓线上分别取两个点, 并绘制了相应的LDOSSs, 如图5-16所示。由此可见, 八边形量子点中的直线型电导等高线也是由其中的回音壁型指针态导致, 并且在大磁场下也可以发现这种规律 [169]。可以观察到只需要一组参数  $S_e$  和  $L_e$  就可以描述电导等高线的特征。为了得到这两个

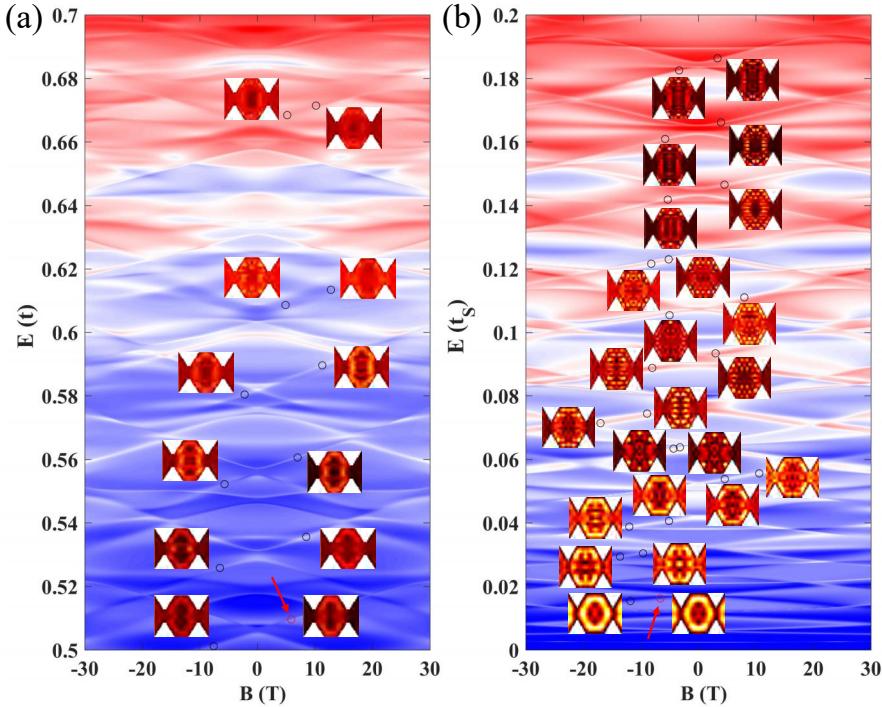


图 5-16: 具有相同形状的石墨烯和薛定谔腔的电导图比较。(a) 石墨烯腔的电导图, 其中  $B \in (-30 \text{ T}, 30 \text{ T})$  和  $E \in (0.5\text{t}, 0.7\text{t})$ 。(b) 薛定谔腔的电导图, 其中  $B \in (-30 \text{ T}, 30 \text{ T})$  和  $E \in (0\text{t}, 0.2\text{t})$ 。插图中为电导图黑色圆圈标记处的 LDOSs。红色箭头指向的红色圆圈标记的点的 LDOS 和电流密度分布如图5-17所示。

值, 我们在图5-16上分别取两个具有代表性的点, 如红色箭头指向的圆圈标记, 相应的 LDOS 和电流密度分布如图5-17所示, 通过测量 LDOS 和其对应的电流密度分布以确定电流循环的面积和轨道长度。图5-17 利用虚线粗略的估计经典轨道, 通过计算可知  $S_e/L_e$  的值对石墨烯和薛定谔腔分别为 9.14 和 11.74。

如图5-16所示, 当  $B \sim 0$  时, 直的电导等高线经常和其他的电导等高线交叉。我们追踪这些电导等高线并为每条线固定两个点, 用圆圈标记, 计算和绘制 LDOS 以确保它们可以关联到相同经典轨道, 并估计这些线的斜率  $d(E/\text{t})/d(B/B_0)$ 。我们仅仅计算了直的电导线的正斜率值, 并将这些结果绘制在图 5-18 (a) 中 (数据点)。图中的曲线对应的是方程(5.11)和(5.26)的结果。可以看到数据很好的符合了理论预测。

根据小节 5.3.1.1 关于抛物线型电导等高线的分析, 我们可以对八边形器件中的抛物线型电导等高线做类似的分析。需要注意的是, 在低磁场下, 非相对论量子系统通常会出现类似抛物线的电导等高线。但是, 它和石墨烯中的抛物线型电导等高线来自完全不同的机制。

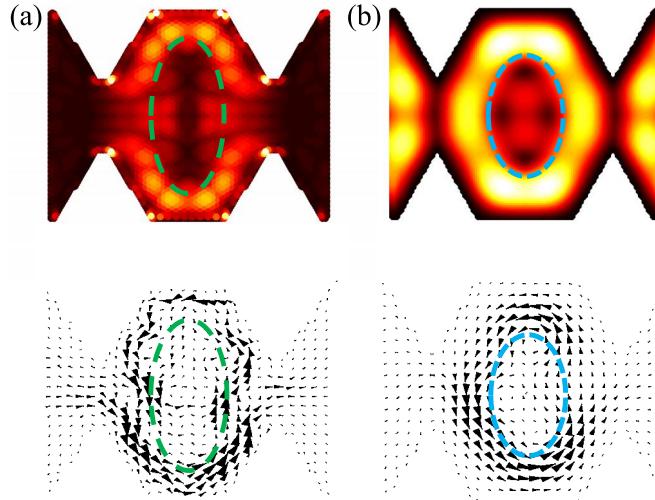


图 5-17: (a) 图5-16 (a) 中对应的石墨烯腔在  $B = 5.9$  T,  $E = 0.5096t$  的 LDOS 和电流密度分布, 比如, 图5-16 (a) 中红色箭头指向的红色圆圈标记的点。虚线勾勒出从计算的 LDOS 和电流密度分布中提取的等效轨道。估计的  $S_e/L_e$  的值为 9.14。(b) 和 (a) 的设定相同, 但是为薛定谔腔的情况, 红色圆圈标记位于  $B = -6.6$  T 和  $E = 0.0162t_s$ 。这里估计的  $S_e/L_e$  值为 11.74。

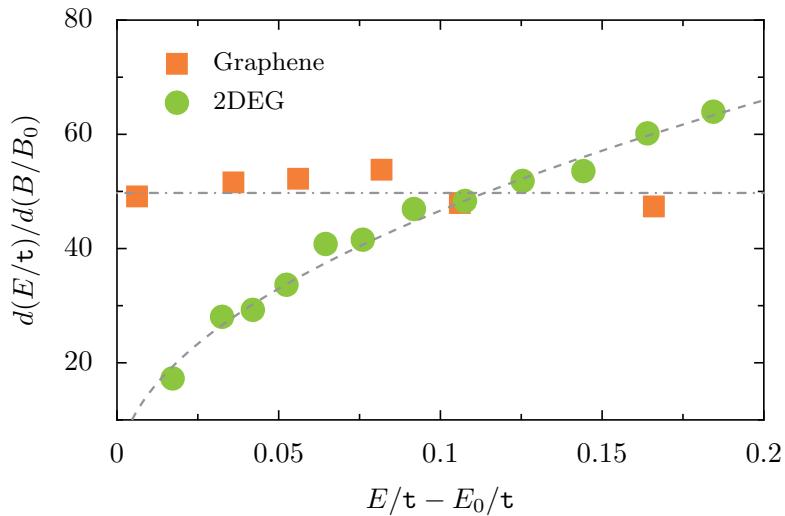


图 5-18: 直线型电导等高线的斜率关于费米能的变化。 $E_0$  对于石墨烯和薛定谔的情况分别为  $0.5t$  和  $0t_s$ 。

## 5.4 讨论和结论

我们数值计算了方形和八边形的石墨烯量子点关于费米能和磁场的电导图, 并计算了不同杂质势对前者电导、PLDOS 和电流密度的影响。需要注意的是, 我

们计算中使用的方形石墨烯量子点的导线宽度只是略小于方形器件的宽度，从而使得其中的电导等高线上的 PLDOSs 对应的是弹跳球型指针态；而计算中使用的八边形量子点的导线初始具有与其宽度相同的宽度，之后收缩宽度直至与八边形左右两边的宽度一致，从而使得其中的电导等高线上的 PLDOSs 对应的是回音壁型指针态。当费米能接近石墨烯量子点的狄拉克点，对应的是相对论性量子输运，而对于接近能带边缘的费米能，则对应的是薛定谔型量子输运。

对于靠近狄拉克点的费米能，电导图中有与量子点的形状有关的两种类型的电导等高线，如方形量子点中主要是抛物线型电导等高线，而八边形对应的是直线型的。从 Bohr-Sommerfield 量子化规则出发，结合狄拉克点附近的线性色散关系，我们得到了相对论性的电导等高线在电导图中是  $E/\tau$  关于  $B/B_0$  的截距为  $E_{B=0}/\tau$ ，斜率为  $\sqrt{3}\pi S_e/L_e$  的“直线”。不难看出，对于相对论性电导等高线，其类型与  $S_e/L_e$  的值密切相关。具体来说，当  $S_e/L_e$  为定值时，对应直线型电导等高线斜率固定，对应的是回音壁型指针态；而当  $S_e/L_e$  为随着磁场变化的量时，比如，无磁场时的弹跳球型指针态，当磁场增加时，弹跳球轨道开始变得弯曲，使得  $S_e/L_e$  随之增加，从而导致了抛物线轨道的出现。而对于能带边缘，我们可得到薛定谔型的电导等高线出现的条件，即  $E/\tau_s$  是关于  $B/B_0$  的顶点为  $(\pm\sqrt{(E_{B=0} - E_{edge})/\tau} L_e / \pi S_e, 0)$  的开口向上的抛物线。因为顶点距离原点一般较远，因此在小磁场下，如方程(5.10)所示，为  $E/\tau$  关于  $B/B_0$  的截距为  $E_{B=0}/\tau$ ，斜率为  $2\pi S_e \sqrt{(E_{B=0} - E_{edge})/\tau} / L_e$  的“直线”。如果  $S_e/L_e$  为定值，那么该直线的斜率仅取决于  $\sqrt{(E_{B=0} - E_{edge})/\tau}$ ，而对于  $S_e/L_e$  随着磁场增大的情况，也可以预测对应的电导等高线仍然是抛物线型的。由上述分析可知道，在小磁场下，无论是相对论性的还是薛定谔型的，当  $S_e/L_e$  为定值或者量子点对应回音壁型指针态时，对应的电导等高线都为直线型。区别在于，相对论性的电导等高线是平行的，均匀分布的，而薛定谔型的则是扇状分布的。然而，对于  $S_e/L_e$  随磁场增大或对应的弹跳球型指针态，那么相对论性和薛定谔型的电导等高线都是抛物线型的，其“顶点”为  $E_{B=0}/\tau$ ，与对应的色散关系有关。

我们对上述理论分析进行了数值验证，并得到了数值结果支撑，此外，我们详细的对弹跳球型和回音壁型指针态进行了研究。我们发现了在不加磁场的时候，方形器件的电导小峰对应的都是弹跳球型指针态。随着费米能的增加，逐渐出现了多条弹跳球型指针态，增加磁场时也可以观察到类似现象。特别的，不加磁场的弹跳球型指针态的电流密度分关于传输方向中轴线为对称分布或者形成两个流向相反的涡旋，从而使得  $S_e/L_e = 0$ ；但是加入磁场后，便形成包含净磁通量的涡旋，从而  $S_e/L_e \neq 0$ ，对此类情况我们做了详细的数值验证，结果符合

预测。我们也对不加磁场的两种色散关系的弹跳球型指针态分别做了基于半经典理论的  $\eta$  分析，发现无论是相对论性还是薛定谔性的弹跳球型指针态都对应于经典的弹跳球轨道。对于回音壁型轨道，我们计算了其  $S_e/L_e$  的值，无论相对论性还是薛定谔性的直线型电导等高线都符合理论预测。

本章的另外一个研究内容是杂质对电导等高线及其上指针态的影响。我们计算了施加了几种不同分布，不同强度的方形器件的电导图并绘制了对应的指针态。结果发现，随着杂质势强度的增大，电导等高线会越来越模糊，当杂质势超过一定强度后，电导等高线会消失不见，对应的弹跳球型指针态也从逐渐破坏到按照杂质势进行分布；另外，当电导等高线消失后，方形器件的电导值急剧下降，类似从导电到绝缘体的相变 [115]。当改变杂质势的分布，如仅改变杂质势出现的位置，那么输运的特征变化不大；而保持杂质势位置不变而缩小杂质势的分布范围后，我们发现杂质势在相对较高的强度下才会对电导图的进行破坏，可以理解为势强度和宽度之间存在标度关系。

电导等高线作为电导图的重要特征，其一个十分重要的应用是利用的是器件大小、磁场范围和费米能范围三者之间的标度关系对不同大小的石墨烯量子点的电导图进行对应。我们推导的标度关系基于半经典理论，对于狄拉克和薛定谔方程描述的电子的电导图都有很好的符合。结合费米能和实验中对应的背栅压的对应关系，我们很轻松的就能将该标度关系应用与数值和实验的结果对比中，同时也为小器件模拟实验器件的合理性提供了证据。

综上，我们对石墨烯量子点电导图中的电导等高线的研究揭示了电导与器件指针态对应的经典轨道之间的内在联系，尤其是我们对器件大小、磁场范围和费米能范围三者之间的标度关系的研究，说明本工作对基础和应用物理都有重要意义。此外，杂质势导致电导衰减的临界值、标度关系适用的器件大小的范围及其内在机制以及能否定量的研究抛物线电导等高线的斜率都是可以进一步研究的方向。

## 第六章 石墨烯弹球中的多体能谱统计

本章的研究课题是对文献 [280] 工作的进一步扩展。文献 [280] 中发现了扇形石墨烯弹球中的反常能谱统计，其根源在于石墨烯弹球特殊的边界形状。一个自然的问题是，在考虑电子-电子相互作用的情况下，扇形石墨烯弹球的能谱统计会有什么样的表现。因为石墨烯中的电子-电子相互作用可以用平均场 Hubbard 模型进行计算，从而使得上述问题可以被解决。一般来说，加入多粒子相互作用会使系统中的动力学变得更加的复杂，表现在能谱统计上是更加的偏向 GOE。因此，我们计算了随着相互作用强度变化的能谱统计，并对其中的能谱统计现象进行了解释。本章的结果对理解多体相互作用、相对论性量子力学与经典动力学三者之间的关系进行了有益的尝试，对基础物理的研究和二维材料的应用都有意义。

### 6.1 简介

量子混沌是研究在经典极限中出现的混沌的量子表现或特征的跨学科领域 [129–131]。在现实世界的量子系统中，多体相互作用无处不在，识别和理解它们对可测量量的影响十分的有意义。在量子混沌中，现有工作的绝大多数都是在单粒子框架中进行的。尽管如此，也有工作对多体相互作用对由薛定谔方程描述的非相对论量子系统中的能谱统计或能级间距统计进行了研究 [146–156]。利用自旋链模型 [281]，一些工作研究了量子热化中的多体相互作用 [282, 283]，还有一些零星的工作 [31, 156] 通过对多体相互作用进行平均场化处理研究了量子弹球系统，揭示了经典轨道在能谱统计中有着非平庸的作用。尽管有这些工作，多体相互作用对相对论性量子混沌领域 [20–22, 170] 中的基本量的影响仍然缺乏理解。对该问题的研究也有实际的意义。特别是，从二十年前对石墨烯的成功分离开始 [9, 114, 160, 196, 284]，相对论性量子力学在固体物理的研究中的重要性已经得到了认可，因为石墨烯中的低能激发以及大量的其他二维狄拉克材料由二维狄拉克方程描述。因此，理解多体相互作用，相对论性量子力学以及经典动力学三者之间的关系，对基础物理的研究和二维材料的应用都有价值。

在完全忽略多体相互作用的单粒子框架中，非相对论性量子系统的能谱统计关于一般经典动力学的普遍行为已被充分记录和理解。特别是，对于在经典极限中具有时间反演对称性的完全混沌系统，能级间距统计等效于来自 GOE 的随

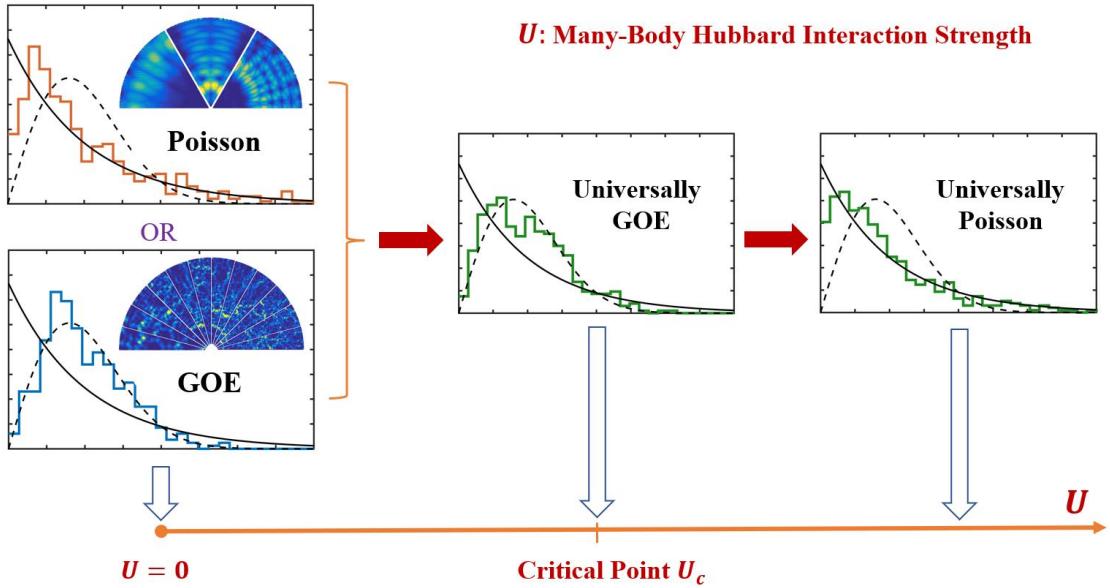


图 6-1: 该章节的主要结果: 多体 Hubbard 相互作用对狄拉克点附近能量的石墨烯弹球能谱统计的影响。示意性的展示了当 Hubbard 相互作用  $U$  从零开始增加时, 能级间距分布的特征演变。起点是  $U = 0$ , 此时能级间距统计可以是 Poisson 或者 GOE, 其中插图显示了相应本征态的空间分布, 通常 Poisson 对应的是规则的, GOE 不规则的。随着  $U$  向临界点  $U_c$  增加时, 无论“初始”( $U = 0$ ) 能级间距分布如何, 其分布都接近 GOE。当  $U$  从  $U_c$  开始增加, 能谱统计普遍的向 Poisson 进行演变。

机矩阵 [134, 285, 286]。对于经典可积动力学, 谱统计是 Poisson [143], 这是由于与不同自由度相关的量子数的独立性, 因此会丢失相邻能级之间的任何相关性。以前的工作还揭示了经典力学的性质与 GOE 或 Poisson 统计之间的对应关系适用于相对论性量子系统 [27, 30, 141, 170, 215, 287, 288]。然而, 最近发现了对应的例外情况, 对于填充石墨烯的圆形扇区弹球, 尽管经典动力学是可积的, 但接近 Dirac 点的能级间距统计遵循 GOE [280]。这是令人惊讶的, 因为根据对非相对论量子弹球的研究, 在这种情况下, 能级间距统计应该是 Poisson。圆形扇区石墨烯弹球系统中出现 GOE 统计的物理原因可归因于自旋波函数的复杂边界条件, 破坏了相应经典力学的可积性 [280]。

在本章节中, 我们使用圆形石墨烯弹球作为原型模型, 研究了电子-电子相互作用对相对论性量子系统能谱特性的影响。我们具体的技术方法是在没有多体相互作用的情况下考虑两种不同类型的圆形扇区, 它们的能谱统计分别为 Poisson 和 GOE [280], 并系统地研究当电子-电子相互作用强度从零增加时, 能

谱统计数据的特征是否变化以及如何发生。为了完成这项任务，一个基本要求是将多体相互作用整合到石墨烯弹球系统中。我们使用 Hubbard 模型 [145]，该模型最初是为了理解导电相和绝缘相之间的过渡而提出的 [289]。在该模型中，电子-电子相互作用通过屏蔽的库仑势来近似，即遵循泡利不相容原理的传统紧束缚模型 [290, 291]。尽管 Hubbard 模型在半个多世纪前被引入，但由于其与重费米子材料 [292, 293]、高温超导体 [294, 295] 和石墨烯中的边缘磁性 [296–300] 等前沿领域的高度相关性，Hubbard 模型及其扩展仍然是凝聚态物理的一个活跃研究领域。Hubbard 模型代表了一种理论和计算范式，用于获得对各种物理系统中多体相互作用的物理见解。

我们的工作和主要贡献可以描述如下。我们通过迭代方法对平均场 Hubbard 哈密顿量进行对角化，计算圆形扇区石墨烯弹球的全套本征能量和本征态，并获得不同能量范围内的能谱统计数据。一般来说，能谱特性取决于 Hubbard 相互作用。为了确定能谱统计的性质，我们采用感兴趣的能量范围内的代表性本征波函数并检查它们的规律性，其中规则和不规则本征态通常分别对应于 Poisson 和 GOE 统计。一种常见的情况是能谱特性介于 Poisson 和 GOE 统计之间。在这种情况下，通过假设哈密顿矩阵是分别生成 Poisson 和 GOE 统计量的具有适当的权重的矩阵的组合，我们进行插值拟合从而获得一个可以衡量系统能谱性质的参数 [301, 302]。对于非相对论性量子系统，以前的工作 [146, 156] 表明，加强电子-电子相互作用将使哈密顿量更加复杂，并且它们的能谱与随机矩阵系综统计更紧密地对齐。然而，我们发现，对于大多数能量范围内的石墨烯弹球，能谱统计对 Hubbard 相互作用不敏感，但有一个例外：对于接近狄拉克点的能量范围，无论能谱统计的性质在没有多体相互作用的情况下如何，Hubbard 相互作用倾向于将其推向 GOE。这种向 GOE 的持续演变一直持续到 Hubbard 相互作用强度达到临界点。一个令人惊讶的现象是，随着相互作用强度从临界值进一步增加，由于能带间隙的出现和准粒子行为的蜕变，能谱统计倾向于接近 Poisson。综上所述，如图 6-1 所示，当相互作用强度从零开始增加时，会出现三种不同的状态：(1) 存在不同能谱统计的弱相互作用状态，(2) 中间相互作用状态（大约临界点），其中统计数据普遍包含 GOE，和 (3) 统计数据普遍为 Poisson 的强相互作用机制。我们基于能带结构阐明物理图像，以启发式地理解这些行为。随着多体相互作用强度的增加，无论开始时能谱统计的性质如何，其会经历向一个通用类 (GOE) 然后到另一个 (Poisson) 的转变。我们的结果阐明了多体相互作用和相对论性量子系统的能谱统计之间的关系，对量子混沌领域及基础物理学都有一定的贡献。

## 6.2 多体哈密顿量和求解方法

### 6.2.1 平均场 Hubbard 哈密顿量

为了将电子 - 电子相互作用纳入圆形扇区石墨烯弹球的量子力学中，我们使用单轨道平均场 Hubbard 模型 [31, 157, 303]。该模型的哈密顿量由两部分组成：描述单粒子的  $\pi$ - 轨道的紧束缚哈密顿量  $\mathcal{H}_{TB}$  以及描述排斥电子-电子库仑相互作用的 Hubbard 势  $\mathcal{H}_U$ ：

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{TB} + \mathcal{H}_U, \quad (6.1)$$

其中

$$\mathcal{H}_{TB} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}, \quad (6.2)$$

加和是对所有最近的相邻格点对  $\langle i,j \rangle$ , 角标  $\sigma$  表示自旋, 并且  $c_{i,\sigma}^\dagger (c_{j,\sigma})$  表示在格点  $i$  ( $j$ ) 对具有自旋  $\sigma$  的电子的产生 (湮灭) 算符。石墨烯的电子能带结构可由紧束缚模型 [160] 来描述。电子通过屏蔽的库仑势相互作用, 可以近似为 Hubbard 势, 即通过短程排斥格点库仑相互强度  $U$  进行引入

$$\mathcal{H}_U = U \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} n_{i,\bar{\sigma}}, \quad (6.3)$$

其中  $\bar{\sigma}$  是由泡利不相容原理规定的  $\sigma$  的反自旋并且  $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$  是数量算符。由于希尔伯特空间维度是关于电子数目  $N_e$  的指数型增长, 因此即使对于只有数十个原子的中等大小的系统, 对角化和分析也会使得计算变得十分困难。解决方案是利用平均场近似 [304–309]：

$$H_{MF} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_{i,\sigma} \langle n_{i,\bar{\sigma}} \rangle \hat{n}_{i,\sigma}, \quad (6.4)$$

其中平均场哈密顿量描述了位点  $i$  处的自旋  $\sigma$  电子与同一位点的平均自旋  $\bar{\sigma}$  电子群  $\langle n_{i,\bar{\sigma}} \rangle$  相互作用的情况, 反之亦然。这个平均场 Hubbard 模型类似于从第一性原理或量子蒙特卡罗计算中推导出的模型, 表明平均场近似适用于石墨烯 [296, 305, 306, 310, 311], 特别是在弱相互作用机制下 [296, 305]。另一个可能的问题是方程 (6.3) 中  $U$  的物理意义范围。目前, 关于石墨烯的  $U$  的实际值尚未达成共识 [303], 因为缺乏磁性石墨烯系统相关的实验, 因此很难对其进行准确的估计 [303]。先前的讨论表明, 石墨烯量子点的  $U$  值范围为 2.8 to 8.4 eV [307, 312, 313]。众所周知, 当格点库仑斥力势接近临界值  $U_c/t \sim 2.23$  时,

蜂窝晶格哈密顿量将经历一个对称破坏过程，从铁磁序（低于临界值）到反铁磁序（高于临界值）的相变 [18, 160, 312]。本文采用蜂窝晶格模型，将  $U$  作为  $U/t \in [0, 3]$  范围内的控制参数，揭示和量化电子-电子相互作用强度对能谱统计的影响，特别是在过渡点  $U_c$  前后的行为。如章节 6.3 所示，接近相变点时，能谱统计接近 GOE。

为了求解方程 (6.4) 中哈密顿算符的特征值和特征向量，我们采用了迭代程序 [31]，并假设石墨烯系统在零温度下处于  $\pi$  电子的半填充状态，对应于电子中性石墨烯 [157]。这种半填充是文献中经常利用的情况 [157, 296, 314–316]，因为它表现出有趣的现象，例如莫特绝缘行为和反铁磁顺序等 [317, 318]。将初始值  $\langle n_{i,\sigma} \rangle$  分配给位点  $i$ ，我们将方程 (6.4) 中的哈密顿量写成矩阵形式的自旋  $\sigma$  电子，其中特征值和特征态可以使用直接对角化求解。从与自旋  $\sigma$  相关的特征态  $\psi_{\alpha,\sigma}$ ，位点  $i$  的平均占用数可以得到为：

$$\langle n_{i,\sigma} \rangle = \sum_{\alpha=1}^{N/2} |\psi_{\alpha,\sigma}(i)|^2.$$

利用  $\langle n_{i,\sigma} \rangle$ ，自旋  $\bar{\sigma}$  的特征值和特征态可以直接从相应的哈密顿量 (6.4) 获得，从中可以类似地导出  $\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle$ ，完成一次迭代。该过程重复，直到  $\langle n_{i\sigma} \rangle$  和  $\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle$  达到稳定状态，产生自旋分辨的单粒子能谱 [157, 305, 319]。

### 6.2.2 圆形扇区石墨烯弹球

圆形扇区石墨烯弹球可以从石墨烯片上切割出来，之前发现，对于大多数的圆心角，在没有电子-电子相互作用的情况下，在狄拉克点附近的能级的能谱统计接近 GOE [280]。值得注意的是，对应的薛定谔弹球能谱统计为泊松 [280]。但却有一些例外。例如，对于具有完美锯齿形或扶手椅径向边界的  $60^\circ$  石墨烯扇形弹球，能谱统计为 Poisson。具体的，我们考虑每个类别中的一个示例：(1) 一个  $15^\circ$  的扇形石墨烯弹球，其中一个径向边缘为锯齿形，另一个径向边缘为锯齿形和扶手椅形的混合物 [表示为  $15^\circ$ ZM，如图 6-2(a) 所示]，以及 (2) 一个  $60^\circ$  扇形石墨烯弹球，两个径向边缘均为扶手椅形 [表示为  $60^\circ$ AA，如图 6-2(b) 所示]，其中在狄拉克点附近的能谱统计在没有 Hubbard 相互作用的时候分别是 GOE 和泊松，

两个圆形扇区石墨烯弹球系统的参数如下。 $15^\circ$ ZM 弹球有  $N_e = 40328$  个原子，大小约为  $90 \times 25$  纳米。 $60^\circ$ AA 弹球有  $N_e = 42540$  个原子，大小约为  $46 \times 40$  纳米。对于两种系统，迭代过程都可以获得相应的  $N_e$  能级的自旋分辨单粒子能

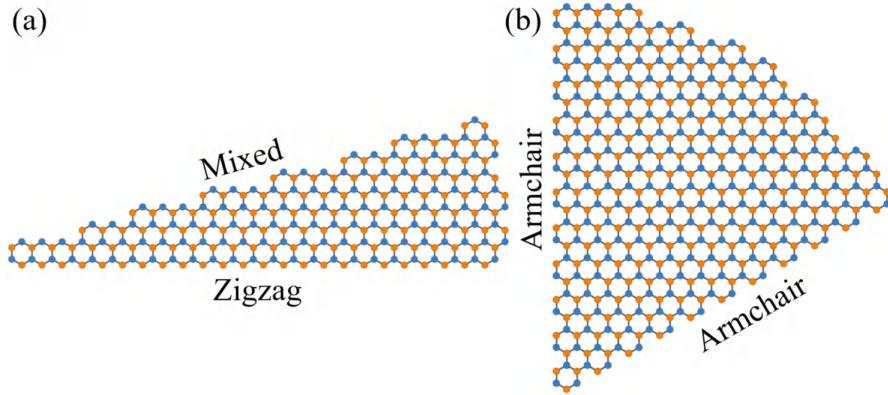


图 6-2: 扇形石墨烯弹球。圆心角是  $15^\circ$  (a) 和  $60^\circ$  (b)。石墨烯晶格晶胞中的两个非等效原子,  $A$  和  $B$  原子, 分别标记为蓝色和橙色圆圈。

谱 [157, 305, 319]; 因此, 对于不同的能量范围, 我们可以有足够多的能级, 例如 500 或 1000, 以产生准确的能谱统计数据。

### 6.2.3 局域系统中的能谱统计

我们将狄拉克点附近的能谱分成几个部分, 并分别对他们进行能谱展开。对于本征能量  $\epsilon_1 \leq \epsilon_2 \leq \epsilon_3 \leq \dots$ , 使得  $\langle N_c(\epsilon) \rangle$  是计数函数  $N_c(\epsilon)$  的平滑函数, 用于小于  $\epsilon$  的特征本征能级数目。展开后的能谱为  $\epsilon_i^u \equiv \langle N_c(\epsilon_i) \rangle$ , 并且能级间距为  $S_i = \epsilon_{i+1}^u - \epsilon_i^u$ 。以下结果在传统 (非相对论) 量子混沌领域已经得到很好的证实 [129]。如果经典系统是可积的, 能谱间距遵循泊松统计:

$$P(S) = e^{-S}.$$

当经典力学完全混沌并且没有任何几何对称性时, GOE 统计就会出现:

$$P(S) = (\pi/2)Se^{-\pi S^2/4}.$$

泊松和 GOE 之间的中间统计类型, 即半泊松统计 [320], 也可能出现:

$$P(S) = 4Se^{-2S}.$$

使用水平间距分布  $P(S)$ , 可以得到累积分布:

$$I(S) = \int_0^S P(S')dS'.$$

此外, 还有两个相关的统计量, 数量方差  $\Sigma_2(L)$  和谱刚度  $\Delta_3(L)$ , 这里  $L$  是平均能谱间距的数目 [129]。

为了获得能谱统计的参考，我们采用参数相关的随机矩阵模型，该模型在表现泊松和 GOE 统计的随机矩阵之间进行插值 [301, 302]：

$$H(\lambda) = (H_0 + \lambda H_1)/\sqrt{1 + \lambda^2}, \quad (6.5)$$

其中  $H_0$  属于随机泊松数的对角矩阵， $H_1$  是能谱统计为 GOE 的随机矩阵，并且选择  $H_0$  和  $H_1$  的矩阵元素的方差，使得它们的特征值具有相同的平均间距。由于本章节中每组的能级数目在 600 以内，对于矩阵  $H_0$  和  $H_1$ ，大小也设置为 600。当控制参数  $\lambda$  从零变为无穷大时， $H(\lambda)$  的能谱波动表现出从泊松到 GOE 的过渡。因为当  $\lambda \gtrsim 1$  的时候，能谱统计已经接近 GOE，因此我们将  $\lambda$  的最大值设置为 6。为了估计给定能谱的参数  $\lambda$ ，我们从随机矩阵模型方程 (??) 生成一系列能谱， $\lambda$  的范围从 0 到 6，增长的步长为 0.01，并计算相关的统计量  $\Sigma_2(L)$  和  $\Delta_3(L)$ 。然后，我们根据给定的频谱数据和随机矩阵模型的标准参考计算值之间的方差，找出那些具有最小方差的值对应的参数  $\lambda$ 。在我们的计算中， $\Sigma_2(L)$  和  $\Delta_3(L)$  考虑的是长程关联，但是  $\Sigma_2(L)$  太过敏感以至于对于大的  $L$  可能产生虚假结果。为了克服这个困难，在对于  $\lambda$  的计算中，我们取  $\Sigma_2(L)$  的  $L$  范围 (0, 2)，而取  $\Delta_3(L)$  的  $L$  范围 (0, 10)。

## 6.3 结果

检查不同能量范围内的能谱统计，我们发现 Hubbard 电子-电子相互作用会影响能谱统计，但仅限于狄拉克点附近的能量。特别是，由于狄拉克点（或带隙）在  $N/2$  左右，在下文中，我们将关注  $[N/2 - 1000, N/2 + 1000]$  范围内的能级，总共约 2000 个能级，并研究能谱统计如何随着 Hubbard 相互作用的增加而变化。我们的计算用到了一个简化：自旋向上和自旋向下的能谱统计是无法区分的。因此，只需关注一个自旋方向的特征能谱统计就足够了，例如自旋向下能谱。

### 6.3.1 不同能量范围和自旋的能谱统计

为了确定适当的能量范围从而进行分析，我们比较了两种情况之间的能级间距统计：不施加电子-电子相互作用 ( $U = 0$ ) 以及施加一个足够大的 Hubbard 强度 ( $U = 2t$ ) 到 60°AA 石墨烯弹球。如图 6-3 所示，插图显示的是态密度，绿色阴影区域表示用于计算能级间距统计的能量范围。图 6-3 的左列和右列分别表示  $U = 0$  和  $2t$ 。图 6-3 (a) 和图 6-3 (e) 是关于狄拉克点的能级，其中能级间距分别为  $U = 0$  的泊松和  $U = 2t$  的 GOE。图 6-3 (b) 和图 6-3 (f) 分别显示了

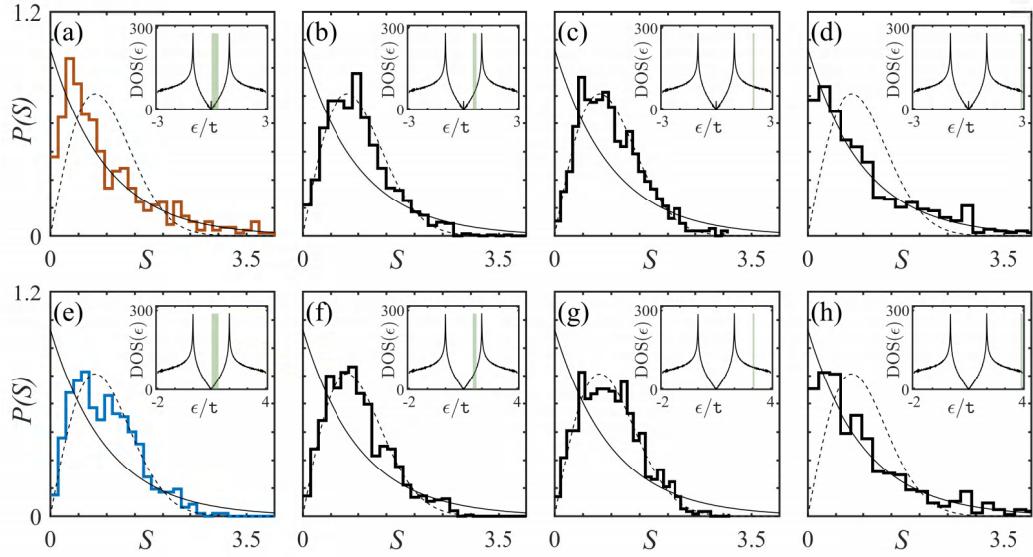


图 6-3: 电子-电子相互作用对 60°AA 石墨烯弹球在不同能量范围内的能级间距分布的影响。对于  $U = 0$ , 能量范围  $\epsilon/t$  和能级的数目分别是 (a) [0.02,0.4], 638; (b) [0.5,0.7], 1092; (c) [2,2.1], 713; 以及 (d) [2.9,3], 568。对于  $U = 2t$ , 狄拉克点平移到  $E/t = 1$ , 能级范围和能级数目分别是 (e) [1.02,1.4], 648; (f) [1.5,1.7], 1092; (g) [3,3.1], 712; 以及 (h) [3.9,4], 568。插图显示了态密度和相应的能级范围 (绿色阴影区域)。直方图显示了与泊松 (实线) 和 GOE (虚线) 统计量进行比较的数值结果。

$U = 0$  和  $2t$  时距离狄拉克点稍远的能量范围内的能谱统计数据, 图 6-3 (c) 和图 6-3 (g) 显示了远低于带边的能量范围内的相应结果。这四种情况的能谱统计都是 GOE。图 6-3 (d) 和图 6-3 (h) 显示了带边缘的能谱统计, 因此准粒子由具有修正等效质量的薛定谔方程描述, 其中对于  $U = 0$  和  $2t$  的情况能谱统计都是泊松。从这些结果中, 我们得出结论, Hubbard 相互作用会影响能级间距统计, 但仅限于狄拉克点周围的能量, 当相互作用强度从  $U = 0$  变为  $2t$  的时候, 能谱统计从泊松 [图 6-3 (a) ] 到 GOE [图 6-3 (e) ]。远离狄拉克点, 能谱统计要么是 GOE 要么是泊松, 而不管 Hubbard 相互作用是否存在。需要注意的是, 图 6-3 (a) 中的结果与泊松统计的轻微偏差是由于系统的大小有限 [280]。在下文中, 我们将重点讨论狄拉克点附近的特征能量。

为了区分自旋取向的影响, 我们分别选择自旋向上和自旋向下能谱范围 ( $\epsilon(N_{DP}), \epsilon(N_{DP} + 500)$ ) 和 ( $\epsilon(N_{DP} - 500), \epsilon(N_{DP})$ ) 的自旋分辨能谱, 对于 15°ZM 和 60°AA 石墨烯弹球取  $U = 2t$ , 并对 60°AA 石墨烯弹球取  $U = 1t$ , 其中  $\epsilon(N_e/2) = 0$  是狄拉克点的能量。我们忽略了狄拉克点附近的边界态。图 6-4 展示

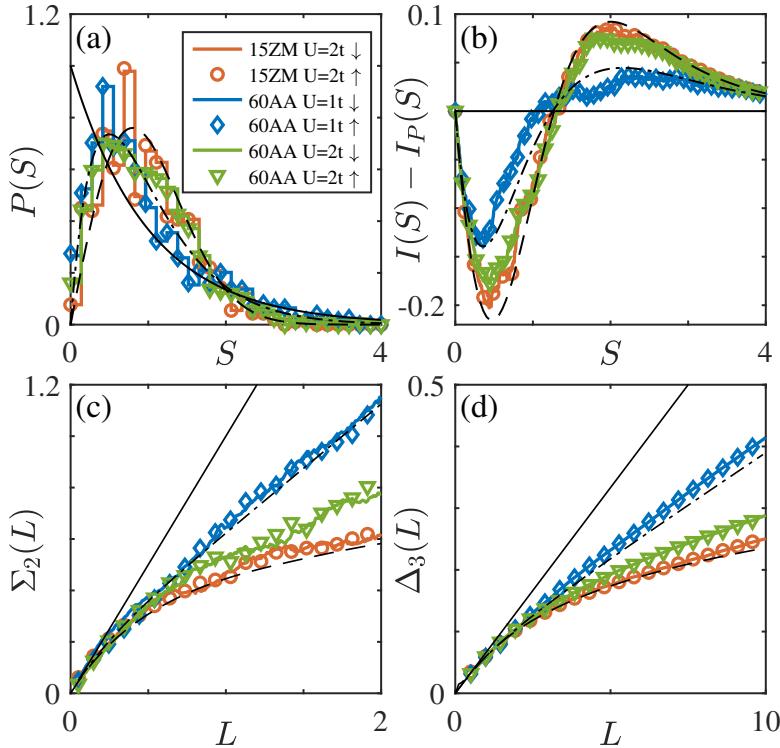


图 6-4:  $15^\circ$ ZM 和  $60^\circ$ AA 石墨烯弹球的靠近狄拉克点的特征能量关于自旋向上和自旋向下的能谱统计的比较。 (a) 最近邻能级间距分布  $P(S)$ , (b) 累积分布  $I(S)$  减去其泊松形式  $I_P(S)$ , (c) 数量方差  $\Sigma_2(L)$ , 以及 (d) 谱刚度  $\Delta_3(L)$ 。对于自旋向上和自旋向下的能谱, 能量范围分别是  $(\epsilon(N_{DP}), \epsilon(N_{DP} + 500))$  和  $(\epsilon(N_{DP} - 500), \epsilon(N_{DP}))$ 。实线、点划线以及虚线分别是泊松、半泊松和 GOE 能谱统计的随机矩阵结果。

了能谱统计, 比如, 展开的能间距统计  $P(S)$ , 累积分布  $I(S) = \int_0^S P(S')dS'$ , 数量方差  $\Sigma_2(L)$ , 以及谱刚度  $\Delta_3(L)$  关于三种情况以及两种自旋取向的能谱统计。可以看出,  $P(S)$ 、 $I(S)$  和  $\Delta_3(L)$  对于自旋向上和自旋向下的能谱统计几乎是无法区分的, 只在  $\Sigma_2(L)$  的统计中出现了很小的差异。这可以从方程(6.4)中的哈密顿量中得到解释, 其中两个自旋方向相关的物理性质是相互对称的。

### 6.3.2 $60^\circ$ AA 石墨烯弹球的能谱统计

我们在的狄拉克点周围的能量范围  $[\epsilon(N_{DP} - 1000), \epsilon(N_{DP} + 1000)]$  收集 2000 个特征能量, 并将它们分为四个子区域: 紧靠狄拉克点的  $[\epsilon(N_{DP} - 500), \epsilon(N_{DP})]$  和  $(\epsilon(N_{DP}), \epsilon(N_{DP} + 500))$ , 以及稍微远离狄拉克点的  $[\epsilon(N_{DP} - 1000), \epsilon(N_{DP} - 500)]$  和  $(\epsilon(N_{DP} + 500), \epsilon(N_{DP} + 1000))$ , 分别对应 1-4。对于  $U = 0$ , 四个区域对应的能量范围分别为  $[-0.3496t, 0]$ ,  $(0, 0.3496t]$ ,  $[-0.4916t, -0.3496t]$  和

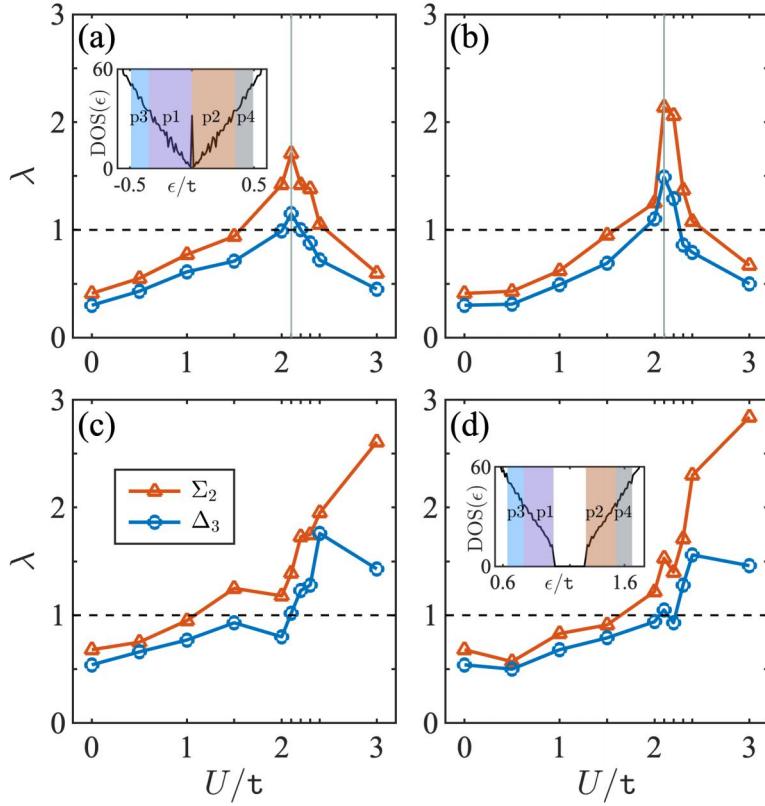


图 6-5: 确定随机矩阵参数  $\lambda$  作为泊松和 GOE 之间插值的指标。所示是将计算的能谱与标准的  $\Sigma_2(L)$  (红色向上三角形) 和  $\Delta_3(L)$  (蓝色圆圈) 统计数据进行比较获得的最佳拟合参数  $\lambda$ , 标准统计数据来自通过方程 (6.5) 构造的随机矩阵得到的。60°AA 石墨烯弹球的最佳拟合参数  $\lambda$  关于不同 Hubbard 相互作用  $U/t$  的分布: (a) - (d) 分别对应的是区域 1-4, 其中不同的区域在 (a) ( $U = 0$ ) 和 (d) ( $U/t = 2.3$ ) 中的插图中进行了展示。

$(0.3496t, 0.4916t]$ , 如图 6-5 (a) 所示。此外, 在进一步处理之前, 应先去除接近简并的态 (小于正常能级间距的千分之一)。这种分类可以通过提供十分接近狄拉克点的能谱统计的特征, 因为区域 1 和 2 的本征能量比区域 3 和 4 更加接近狄拉克点。

图 6-5 显示了最佳拟合参数  $\lambda$  作为相对电子-电子相互作用强度  $U/t$  的函数。在所有情况下, 对于  $U = 0$  的情况, 在本征能量都接近狄拉克点的时候,  $\lambda$  都很小且接近 0.5, 表明类似泊松的能谱统计。需要注意的是, 区域 3 和 4 的  $\lambda$  值略大于区域 1 和 2 的值, 因为它们比区域 1 和 2 离狄拉克点更远。这种行为与图 6-3(a) 和 6-3(b) 中的行为一致, 因为从狄拉克点开始, 能谱统计量从泊松变为 GOE。随着  $U$  变大,  $\lambda$  也会增加, 它在区域 3 和 4 中的值通常大于区域 1 和 2 中的值。区域 (1, 2) 和区域 (3, 4) 之间的主要区别在于, 前者达到约  $U/t = 2.1$

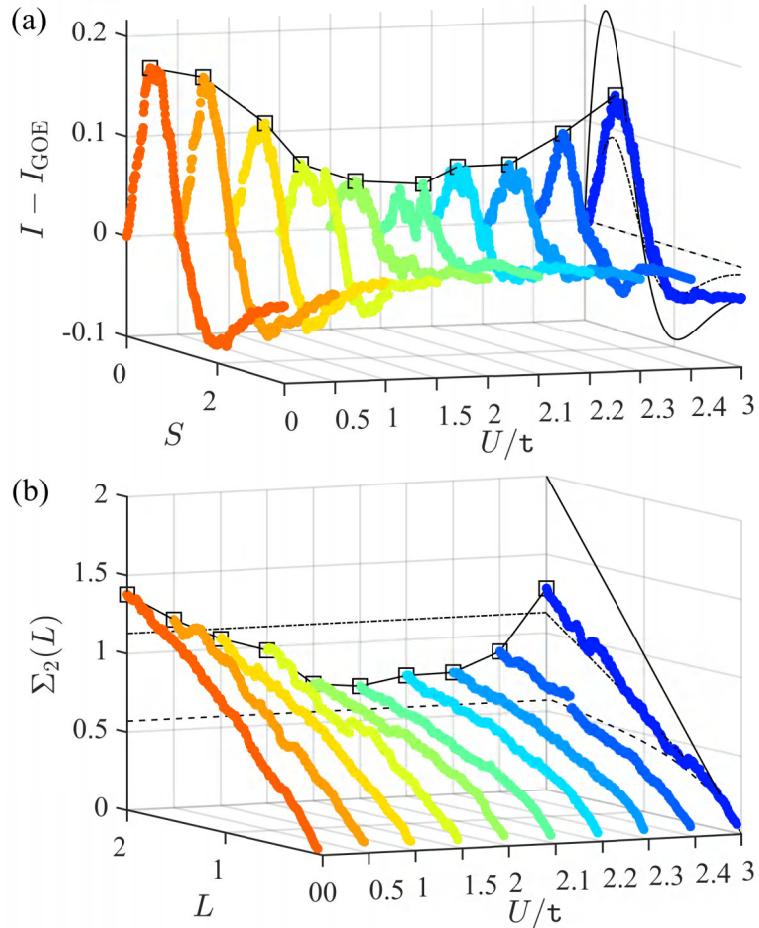


图 6-6: 60°AA 石墨烯弹球的累积分布  $I(S)$  与其 GOE 形式的  $I_{\text{GOE}}$  的偏差和数量方差  $\Sigma_2(L)$ 。图中展示了区域 1 在从 0 到  $3t$  的电子-电子相互作用强度下的  $I(S) - I_{\text{GOE}}(S)$  和  $\Sigma_2(L)$  分布。这里, 坐标  $U/t$  不是线性的, 图中  $U = 3t$  处的实线、点划线以及虚线分别对应泊松、半泊松以及 GOE。

的峰值,  $\lambda$  值大于 1, 表明过渡到类似 GOE 的能谱统计。随着  $U$  的进一步增加,  $\lambda$  减少到约 0.5, 这意味着回归泊松类光谱统计。对于区域 3 和区域 4,  $\lambda$  随  $U$  近似单调增加, 表明从类似泊松的统计量到类似 GOE 的统计单调过渡。从  $\Sigma_2 L$  和  $\Delta_3 L$  中提取的  $\lambda$  的行为大多是一致的, 除了少数情况是由于  $L$  范围不同, 比如  $U/t = 3$  的情况, 如图 6-5 (c) 和 6-5 (d) 所示。 $\lambda$  在区域 1 (2) 和 3 (4) 之间的不同响应给出了可以被视为狄拉克点邻域的能量范围内的能谱统计性质的粗略指标。

图 6-6 进一步阐述了能谱统计中的转变, 显示了不同的  $I(S) - I_{\text{GOE}}(S)$  和  $\Sigma_2(L)$  关于不同 Hubbard 相互作用  $U$  的函数。特别地, 在  $I(S) - I_{\text{GOE}}(S)$  的图中, 还给出了三个理论曲线作为参考: 泊松、中间半泊松和 GOE (数值为零的

水平线) 的对应量。随着  $U/t$  从 0 增加到 2.1, 从接近泊松开始, 数据曲线不断缩小, 超过半泊松曲线, 并接近 GOE 的零水平线。然而, 随着  $U$  进一步增加,  $I(S) - I_{\text{GOE}}(S)$  图中的数据曲线扩大并偏离零水平线, 即回到泊松。需要注意的是, 半泊松曲线仅作为参考包含在内, 因为它仅代表随着  $U$  变化的中间情况。 $\Sigma_2(L)$  的图显示出相似的特征, 即数据曲线从接近开始泊松下降, 到达接近 GOE 的 ( $U/t = 2.1$ ), 但随后增加并超过半泊松线。

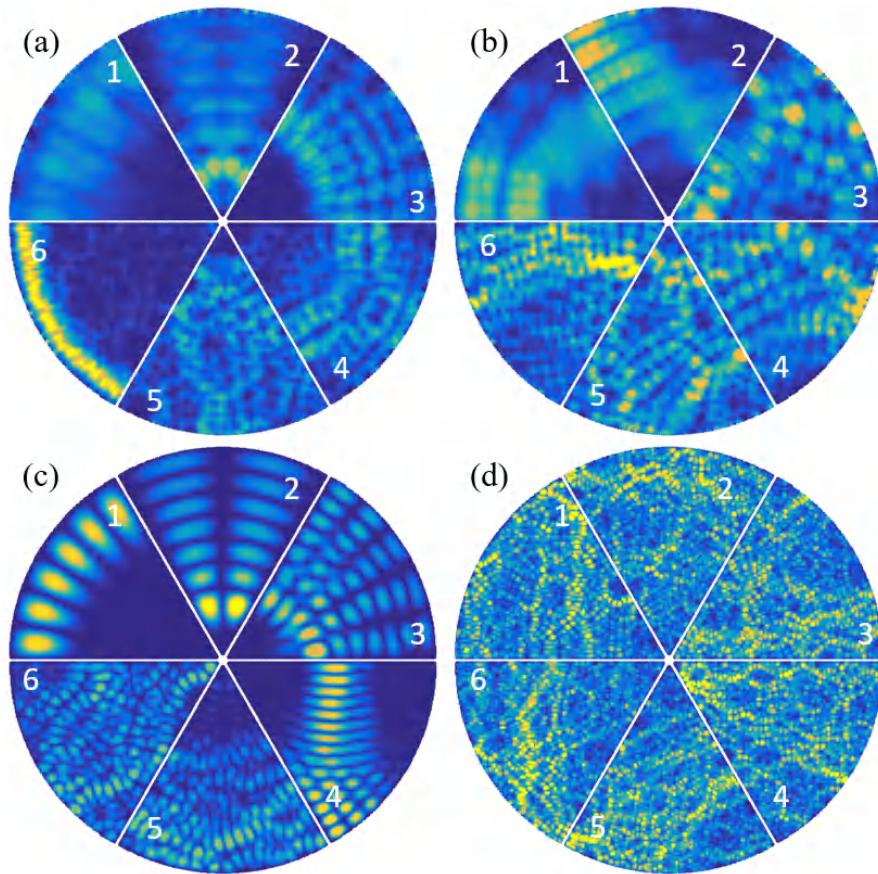


图 6-7: 电子-电子相互作用对 60°AA 石墨烯弹球的波函数强度  $|\Phi_j|^2$  的影响。(a-c) 在区域 2 中, 分别对应  $U = 0$ 、 $2t$  和  $3t$ 。每个子图包含六个面板, 分别对应于第 21304、21333、21397、21525、21625 和 21672 个特征态。(d) 在区域 4 中, 对应  $U = 3t$ , 波函数取自第 21800 个至第 22200 个特征态的代表性图, 两个相邻面板之间的间隔为 80。不同面板的颜色值的范围选择不同, 以获得更好的可视化效果。系统大小为  $N_e = 42540$ 。

本征波函数也证实了能谱统计在不同 Hubbard 相互作用强度  $U$  下的结果, 如图 6-7 中所示的四种不同情况, 每种情况显示的是狄拉克点周围的六个特征态。对于  $U = 0$ , 能谱统计接近于泊松, 并且大多数本征波函数表现出规则模式,

如图 6-7 (a) 中的面板 1-4 和 6 所示, 但一些本征态表现出不规则模式, 如面板 5 所示, 但是当能谱统计遵循随机矩阵系综时, 这种情况并不少见。这些“不规则”状态是能谱统计数据偏离泊松分布的主要原因。对于  $U = 2t$ , 如图 6-7 (b) 所示, 大多数本征态是不规则的, 这与在图 6-6 中观察到类 GOE 的能谱统计具有相同的  $U$  值。这表明, 随着 Hubbard 相互作用从零增加, 大多数本征态从规则变为不规则, 导致观察到的从类泊松到类 GOE 能谱统计的变化。

对于  $U = 3t$ , 大多数状态再次变得规则, 如图 6-7 (c) 所示, 这是由于反铁磁序导致的等效交错势。此外, 一些态类似于具有狄利克雷边界条件的薛定谔方程描述的非相对论量子子弹球的本征态, 例如,

$$\Phi_{S,mn} \sim \sin(m\pi\phi/\phi_0) J_{m\pi/\phi_0}(k_{mn}\rho)$$

其中  $m, n = 1, 2, \dots$  并且  $k_{mn}$  是本征波数, 角标  $S$  代表薛定谔型波函数。例如, 面板 1 和面板 2 的量子数集分别为  $(m, n) = (6, 1)$  和  $(m, n) = (2, 7)$ 。这些不同于没有 Hubbard 相互作用的石墨烯弹球中接近狄拉克点的本征态, 如图 6-7 (a) 所示。这表明, 虽然能谱统计在大  $U$  状态下返回到泊松统计, 但系统的本征态不会返回到  $U = 0$  情况下的那些态, 而是经历了态的改变, 因为它们变成了非相对论量子态就像在对应于石墨烯能带边情况的非相对论量子子弹球中一样, 如  $U = 0$  石墨烯弹球中的  $\epsilon/t \sim \pm 3$ 。事实上, 接近  $U/t \gtrsim 2.2$  时, 能带隙开始打开, 并且随着  $U$  的进一步增加而变得更大 [321], 导致非相对论的量子行为, 尤其是在等效波数小的能带段的底部的时候。

对于区域 3 和 4,  $\lambda$  的总体趋势是随  $U/t$  增加, 从低于 1 到高于 1, 如图 6-5 (c-d) 所示, 表示能谱特性从类泊松统计到类 GOE 统计的转变。对于  $U = 3t$ , 与区域 1 和 2 中的行为相反, 能谱统计不返回泊松, 但更接近 GOE。这也可以从波函数模式中得到证实, 如图 6-7 (d) 所示, 这些态显然是不规则的。

### 6.3.3 15°ZM 石墨烯弹球的能谱统计

我们从上节 6.3.2 中看到, 对于 60°AA 石墨烯弹球, 当不存在 Hubbard 相互作用时, 能谱统计接近泊松, 而随着  $U$  的增加能谱统计出现了明显的变化。然而, 对于大多数石墨烯扇形弹球, 即使当  $U = 0$  时, 狄拉克点的本征能量的能谱统计已经是类 GOE 的, 因此可以预见随着  $U$  的增加, 能谱统计如果发生变化的话, 也将只是微小的变化。为了测试这种预期是否成立, 我们考虑了 15°ZM 石墨烯弹球, 并检查了能谱统计对不同 Hubbard 相互作用的响应。如下所示, 多体相互作用和能谱统计之间的相互作用可能非常有趣, 具有意想不到的特征。

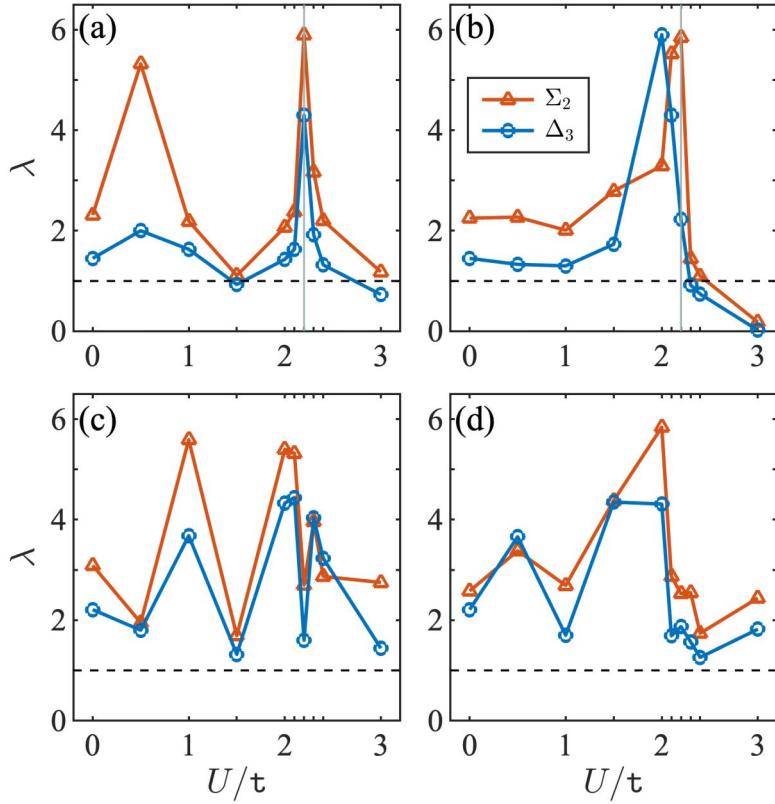


图 6-8: 对于  $15^\circ$ ZM 石墨烯弹球, 随机矩阵参数  $\lambda$  在泊松到 GOE 之间的插值。图中参数与图 6-5 中的相同。

在靠近狄拉克点的区域 1 和 2 中, 分别如图 6-8 (a) 和 6-8 (b) 所示, 对于  $U = 0$ ,  $\lambda \approx 2$ , 所以能谱统计为接近 GOE。之前的一项工作表明, 对于较大的系统, 统计数据是完美的 GOE [280]。随着  $U$  的增加, 尽管  $\lambda$  有波动, 但也在  $U/t = 2.2$  附近达到最大值。随着  $U$  进一步增加到  $U/t = 3$ ,  $\lambda$  减少。对于区域 1 (低于狄拉克点),  $\lambda$  的值变得小于 1, 导致半泊松统计。然而, 对于区域 2 (高于狄拉克点),  $\lambda$  的值减小到接近于零, 从而产生泊松统计。能谱统计是随着  $U$  的变化而连续变化的。这些结果令人惊讶, 因为预期高于和低于狄拉克的能量的能谱行为应该是相同的。然而, 在强 Hubbard 相互作用下, 系统可能处于反铁磁相, 因此对于高于和低于狄拉克的本征能量, 能谱统计可能会有很大不同。(这种现象不会发生在小节 6.3.2 处理的  $60^\circ$ AA 石墨烯弹球系统中。) 我们也发现当  $U = 3t$  时, 高于和低于狄拉克点的两个区域的能谱统计在其他角度的石墨烯圆形扇区弹球中也有类似的行为, 如图 6-9 所示。我们发现  $45^\circ$ ZM 弹球的  $\Sigma_2(L)$  统计量与  $15^\circ$ ZM 弹球最上述结果, 而  $45^\circ$ AM 弹球的  $\Sigma_2(L)$  统计数据接近  $60^\circ$ AA 弹球的能谱统计。

在区域 3 和 4 中, 如图 6-8 (c) 和 6-8 (d) 所示, 对于所有  $U$ ,  $\lambda$  的值都大

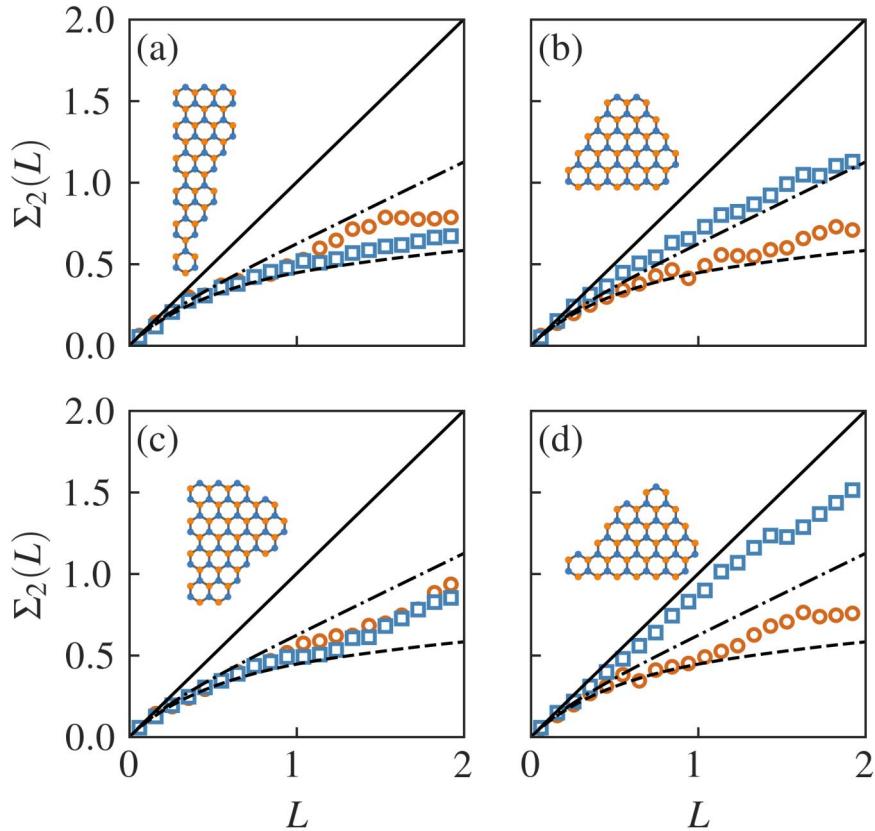


图 6-9: 其他圆形扇形石墨烯弹球的能谱特性。 $U = 3t$  的不同角度的扇形石墨烯弹球的  $\Sigma_2(L)$  统计数据: (a)  $15^\circ$ AM, (b)  $60^\circ$ ZZ, (c)  $45^\circ$ AM, 和 (d)  $45^\circ$ ZM, 其中“A”、“M”和“Z”分别代表扶手椅, 混合的, 和锯齿形边界。插图为靠近石墨烯弹球圆心角的放大图。橙色圆圈和蓝色方块分别代表区域 1 和 2 的数据。

于 1, 说明能谱特性都接近 GOE。这与图 6-3 和 6-5 中的结果一致, 即更高的能量或更强的电子-电子相互作用通常会导致类似 GOE 的能谱统计。然而, 随着  $U$  的增加,  $\Sigma_2(L)$  和  $\Delta_3(L)$  统计数据表明,  $\lambda$  进行振荡并在  $U = 2t$  附近达到最大值。

图 6-10 显示了区域 1 和 2 在不同  $U$  值的累积平均间距分布  $I(S) - I_{\text{GOE}}(S)$  和数量方差  $\Sigma_2(L)$  分布。对于大多数  $U$  值,  $I(S) - I_{\text{GOE}}(S)$  曲线接近于零, 为类 GOE 的能谱统计。对于  $U$  接近  $3t$ , 区域 1 中的曲线略微上升并接近半泊松统计, 但区域 2 中的曲线显着上升以接近泊松统计。 $\Sigma_2(L)$  曲线中也出现了类似的行为。

为了理解区域 1 和 2 在  $U = 3t$  中的不同行为, 我们在图 6-11 中显示了两个区域的代表性本征波函数, 其中图 6-11 ( $a_1$ ) 和 6-11 ( $a_2$ ) 显示了高于和低于狄拉克点的最低非局域化的本征态。两个本征态相似, 类似于对应的薛定谔弹球

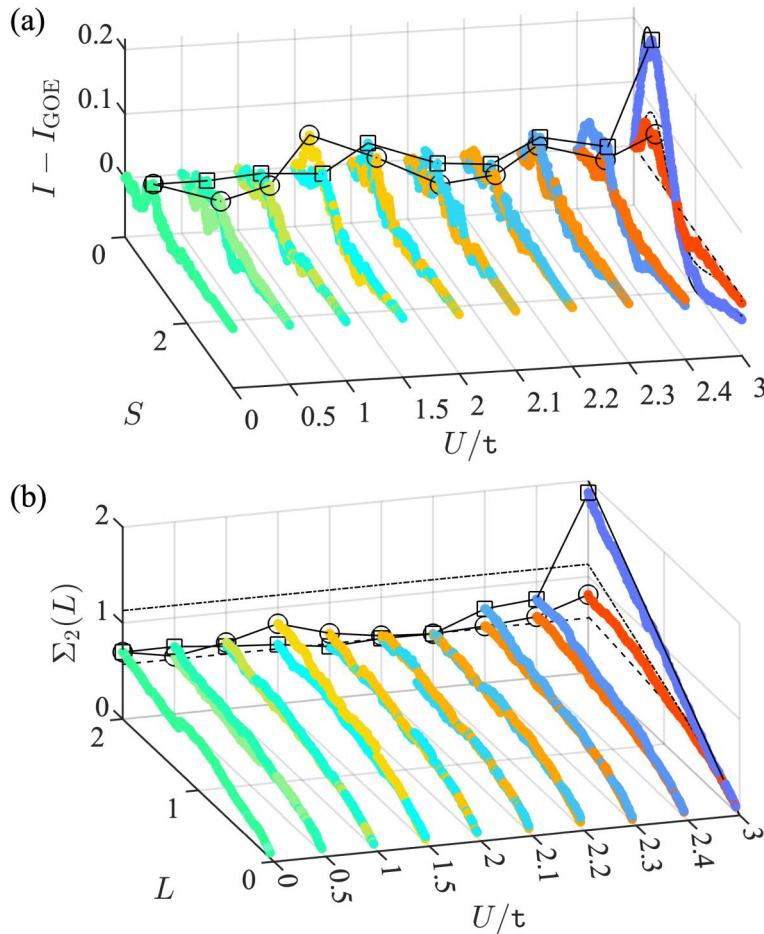


图 6-10:  $15^\circ$ ZM 石墨烯弹球的累积分布  $I(S)$  与其 GOE 形式的  $I_{\text{GOE}}$  的偏差和数量方差  $\Sigma_2(L)$ 。图中展示了区域 1 (蓝色) 和区域 2 (红色) 的  $U$  在从 0 到  $3t$  的电子-电子相互作用强度下的  $I(S) - I_{\text{GOE}}(S)$  和  $\Sigma_2(L)$  分布。这里, 坐标  $U/t$  不是线性的, 图中  $U = 3t$  处实线、点划线以及虚线分别对应泊松、半泊松以及 GOE。

中的第一个本征态。需要注意的是, 对于如此大的值  $U$ , 狄拉克点已经被破坏并出现能带隙 - 这里的狄拉克点是仅用作区域 1 和 2 的参考点, 忽略了高度局域化的态。图 6-11 ( $a_1-l_1$ ) 和 6-11 ( $a_2-l_2$ ) 是在 440 个本征态的范围内显示每个区域中的 12 个代表性本征态, 这些本征态是在两个相邻面板之间以 40 的间隔进行采样的。显然, 两个区域中的本征态非常不同。特别是, 在区域 1 中, 只有前四个本征态是规则的, 其他大部分是不规则的, 对于该区域的能谱统计是半泊松的。相反, 在区域 2 中, 前八个本征态是规则的, 只有少数不规则状态, 与该区域对应的泊松统计是一致的。

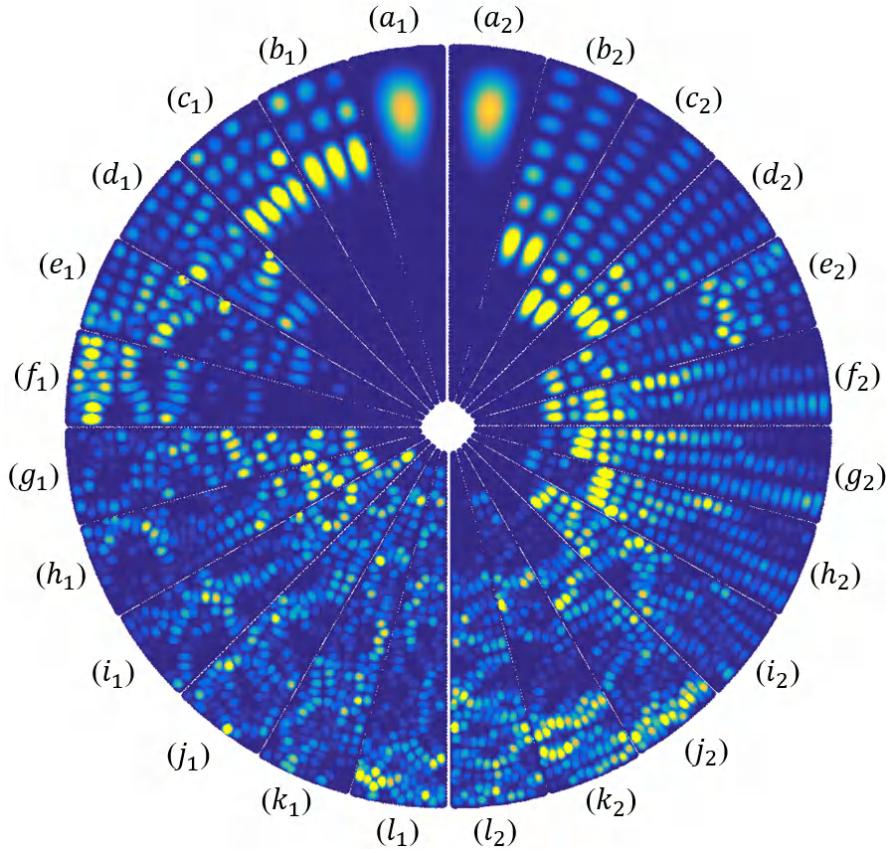


图 6-11:  $U = 3t$  的  $15^\circ$ ZM 石墨烯弹球的波函数强度  $|\Phi_j|^2$  分布。 $(a_1-l_1)$   $|\psi_j|^2$  的第 20138 到第 19698 步长为 40 本征态, 其本征能量属于区域 1 的能量范围。 $(a_2-l_2)$   $|\Phi_j|^2$  表示区域 2 中的第 20199 到第 20639 步长为 40 本征态。较亮的颜色对应于较大的  $|\Phi_j|^2$  值。为了更好的可视化, 不同面板中颜色范围选择不同。

## 6.4 对多体谱统计的启发式理解

从  $60^\circ$ AA 和  $15^\circ$ ZM 石墨烯弹球系统观察到的多体相互作用介导的能谱特性转变可以通过平均场哈密顿量 (6.4) 进行理解。回想一下, 当达到稳态时, 通过迭代求解(6.4) 的本征能量获得本征能谱。平均场哈密顿矩阵可以写成

$$H_{MF,\sigma} = \mathcal{H}_{TB} + \mathcal{H}_{U\sigma},$$

其中  $\mathcal{H}_{TB}$  是跳跃项 (如果  $i$  和  $j$  是最近的相邻格点,  $\mathcal{H}_{TB,ij} = -t$ , 否则  $\mathcal{H}_{TB,ij} = 0$  ),  $\mathcal{H}_{U\sigma}$  是与自旋为  $\sigma$  的 Hubbard 相互作用项的对角矩阵, 可以等效地视为格点势场:

$$\mathcal{H}_{U\sigma,ii} = U\langle n_{i,\bar{\sigma}} \rangle$$

其中  $i = 1, \dots, N$ , 当  $i \neq j$  时,  $\mathcal{H}_{U\sigma,ij} = 0$ .

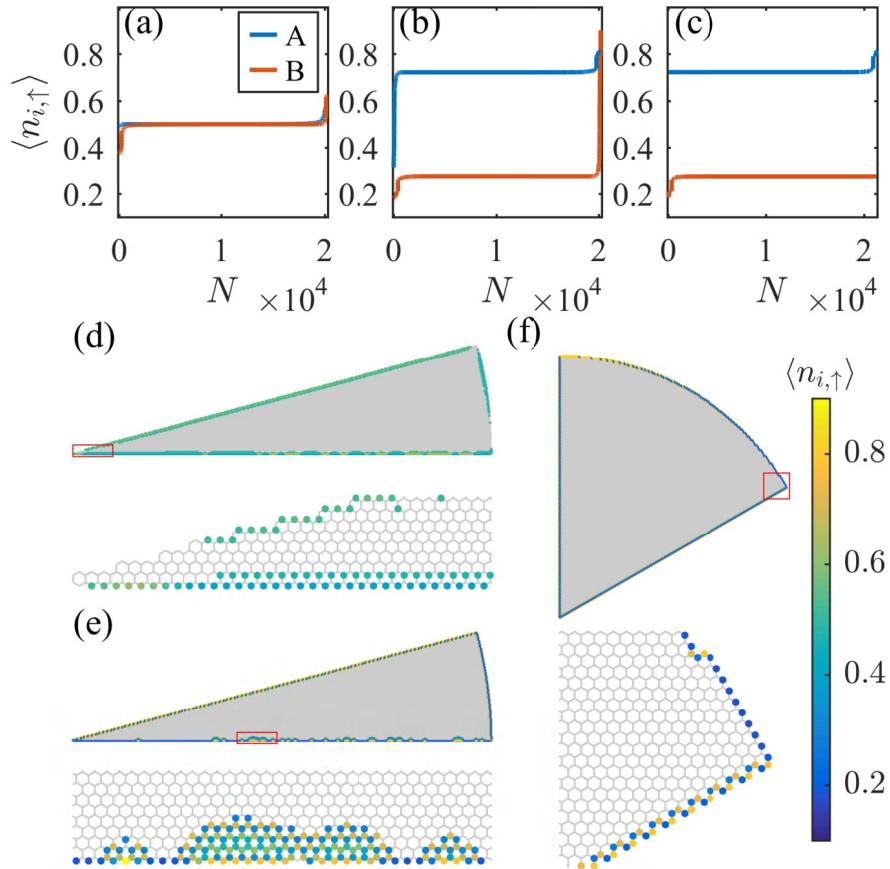


图 6-12: 与 A 和 B 晶格相关的自旋向上的平均电子密度  $\langle n_{i,\uparrow} \rangle$ , 按升序排列。(a)  $15^\circ\text{ZM}$ ,  $U = 0.5t$ , (b)  $15^\circ\text{ZM}$ ,  $U = 3t$ , (c)  $60^\circ\text{AA}$ ,  $U = 3t$ 。(d-f) 分别对应于 (a-c) 的  $\langle n_{i,\uparrow} \rangle$  的空间分布, 其中显示了每个面板中由小红色矩形标记的小边缘片段的放大。只有那些  $\langle n_{i,\uparrow} \rangle$  值偏离弹球的平均电子密度的原子才会被绘制出来。

在不失一般性的情况下, 我们检查自旋向上电子的平均密度分布, 即  $\langle n_{i,\uparrow} \rangle$ 。在临界点  $U_c$  以下, 对于弹球区域中的大多数原子, 我们有  $\langle n_{i,\uparrow} \rangle = 0.5$ 。与平均值的显着偏差主要发生在弹球边界附近的原子上, 然后导致了自旋极化(向上或向下)。图 6-12 (a) 中给出了  $U \sim 0.5t$  的示例, 展示了 A 和 B 原子的  $\langle n_{i,\uparrow} \rangle$  的值。相应的平均电子密度在物理空间上的分布如图 6-12 (d) 所示。对于高于临界点的  $U$ , 大多数原子被极化。如果原子  $i$  属于子晶格 A (B), 则  $\langle n_{i,\uparrow} \rangle > 0.5$  ( $\langle n_{i,\uparrow} \rangle < 0.5$ )。从关系  $\mathcal{H}_{U\downarrow,ii} = U\langle n_{i,\uparrow} \rangle$ , 我们得到自旋电子的格点势对于一个子晶格为正, 对于另一个子晶格具有  $U/2$  的平移, 这实际上等效是一个交错势, 并为等效狄拉克哈密顿量生成质量项  $m\sigma_z$ 。等效质量  $m$  取决于  $U$  并随着  $U$  的增加而变大。当  $U$  超过临界值时, 原来的狄拉克点被破坏, 打开一个能隙。由于感

兴趣的能量范围接近狄拉克点，我们有  $\hbar^2 k^2 \ll m$ ，因此相应的模式现在由薛定谔方程描述，导致波函数具有规则的空间分布和相应的能谱统计为泊松统计。

具体来说，我们假设 A 和 B 原子具有不同但统一的格点势  $U_A$  和  $U_B$  ( $U_A > U_B$ )。对于原始的狄拉克点（有带隙），自旋向下状态的  $E_\downarrow$  与波矢量之间的色散关系为 [189]

$$\epsilon_\downarrow = \frac{1}{2} \{ U_A + U_B \pm [(U_A - U_B)^2 + 4|H_{12}|^2]^{1/2} \}, \quad (6.6)$$

其中  $H_{12}$  由平面波假设给出，并且在晶格势下以原子 A 和其最近邻 B 之一为中心的波函数之间的重叠积分  $t$  可以通过以下方式确定：

$$H_{12} = -t [\exp(-2\pi i k_x a / \sqrt{3}) + 2 \cos(\pi k_y a) \exp(2\pi i k_x a / (2\sqrt{3}))],$$

其中  $a = 2.46$  是晶格常数。对于  $|H_{12}| \ll (U_A - U_B)$ ，方程 (6.6) 可以简化为

$$\epsilon_{\downarrow,+} = U_A + \frac{|H_{12}|^2}{U_A - U_B}, \quad (6.7)$$

$$\epsilon_{\downarrow,-} = U_B - \frac{|H_{12}|^2}{U_A - U_B}. \quad (6.8)$$

靠近狄拉克点时，我们有

$$|H_{12}| \approx \sqrt{3}\pi t |\mathbf{k} - \mathbf{k}_D| a,$$

所以  $\epsilon_{\downarrow,\pm}$  是关于  $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_D|$  的抛物线形关系，它近似于薛定谔粒子的色散关系。

在锯齿形边界或锯齿形段上，一些 A (B) 原子的  $\langle n_{i,\uparrow} \rangle$  值与弹球内大多数其他 A (B) 原子的值不同，如图 6-12 (d-f) 所示。这导致能级之间出现关联，从而导致从泊松分布偏向类 GOE 统计。如图 6-12 (b) 所示，如果锯齿形边界很长， $\langle n_{i,\uparrow} \rangle$  通常对于 A 和 B 原子不对称，例如，一种类型的子晶格原子可以比其他子晶格原子具有更广泛的平均电子密度分布。具有异常平均电子密度值的原子大多位于边界处，如图 6-12 (d-f) 所示。例如，我们的约定，在 15°ZM 弹球的长底锯齿形边界处最向外的原子是 B 型原子。对于弹球内部的大部分 B 原子，在  $U = 3t$  时，我们有  $\langle n_{i,\uparrow} \rangle \approx 0.27$ 。然而，对于 A 原子，我们有  $\langle n_{i,\uparrow} \rangle \approx 0.72$ 。在长底部锯齿形边界 [图 6-12 (e) ]，B 原子上的  $\langle n_{i,\uparrow} \rangle$  的值可以高达 0.82，甚至高于典型的 A 原子。相反，附近的 A 原子具有明显较小的值，即约为 0.33 而不是 0.72，但仍大于 B 原子的典型值。这些导致了锯齿形边界上的异常格点电位，并进一步导致它们周围出现范围更广的弧状结构。在弹球的内部域中，出现双值密

度分布: A 为 0.72, B 为 0.27。由于格点势能可视为等效质量, 因此与内部原子值的偏差有效地形成了质量无序分布。 $U_B$  的紊乱程度和幅度比  $U_A$  大得多, 使得  $\epsilon_{\downarrow,-}$  比  $\epsilon_{\downarrow,+}$  更随机。这与在能量区域 1 (低于狄拉克点的能级, 对应于  $\epsilon_{\downarrow,-}$  和 B 原子) 比能谱统计比区域 2 (高于狄拉克点的能级, 对应于  $\epsilon_{\downarrow,+}$  和 A 原子) 中的能谱统计更偏向泊松统计的结果一致。

## 6.5 讨论与结论

长期以来, 揭示和理解多体相互作用对能谱统计的影响一直被认为是量子混沌中的一个基本问题, 但之前的工作主要集中在非相对论、薛定谔量子系统 [146–156]。多体相互作用会如何影响相对论量子系统中的能级统计在很大程度上仍未得到探索。这项工作朝这个方向前进了一步。特别是, 利用圆形扇区石墨烯弹球作为原型系统并通过 Hubbard 模型处理电子-电子相互作用, 我们系统地研究了随着多体 Hubbard 相互作用强度从零开始增加时石墨烯弹球的能谱特性的变化。石墨烯弹球系统在实验上是可行的, 可以通过调试以表现出相对论量子或非相对论量子特性。特别地, 对于狄拉克点附近的能级, 系统处于相对论量子态, 而对于接近能带边缘的能量, 系统变为薛定谔型。

本章节的贡献在于, 随着多体 Hubbard 相互作用强度  $U$  的调整, 相对论量子体系中的能级间距分布可以表现出令人惊讶的过渡情况, 据我们所知, 这在以前没有被报道过。具体来说, 我们采用了两个不同的系统, 它们在没有多体相互作用的情况下表现出特征不同的能谱统计: 60°AA 和 15°ZM 圆形扇区石墨烯弹球, 在  $U = 0$  时, 能级间距统计对于前者的泊松, 对于后者是类 GOE。对于 60°AA 弹球, 会发生以下转换情况。随着  $U$  从零开始增加, 从泊松到 GOE 的转变发生在临界值  $U_c$  以下, 但随着  $U$  进一步增加, 转变回到泊松。第一个转变 (即  $U < U_c$  从泊松到 GOE 的转变) 逐渐发生, 能谱统计最接近 GOE, 略低于临界点。对于 15°ZM 石墨烯弹球, 随着  $U$  从零开始增加, 能谱统计仍然是类 GOE 的, 并且在接近临界点时变成“最大的 GOE”(通过  $\lambda$  来度量)。随着  $U$  的进一步增加, 会发生向泊松统计的转变。因为泊松和 GOE 统计通常分别对应于规则和不规则模式, 所以可以通过检查本征态的空间分布从而在视觉上进行确认。如图 6-1 中总结的那样, 本文的主要发现是以下引人注目的现象: 无论开始时能谱统计的性质如何, 随着 Hubbard 相互作用强度从零增加到临界点, GOE 统计占主导地位, 但是, 随着相互作用强度的进一步增加, 通过临界点, 两个圆形扇区弹球都发生了向泊松统计的转变。

一般来说, Hubbard 相互作用会使系统更复杂, 因此能谱统计将是 GOE。以前的工作揭示了在低填充时以及 Hubbard 相互作用很弱的情况下也会向 GOE 的急剧转变 [150]。对于本文研究的  $60^\circ$ AA 石墨烯弹球系统, 在半填充时, 能谱统计从泊松到 GOE 的过渡逐渐发生。此外, 对于强 Hubbard 相互作用 (例如  $U = 3t$ ) 和具有长锯齿形边界的系统, 子晶格 A 和 B 上原子的等效势不是对称的。特别是, 沿着较长的锯齿形边界, 最外层的 B 原子大多具有低等效电势, 但一些 B 原子可能具有非常大的电势, 同时附近 A 原子的电势值急剧下降, 如第 6.4 节所述。原子在石墨烯两个子晶格上的这种不均匀等效电势分布是大  $U$  时观察到的带隙下方和上方不同能谱统计转变的原因。

本文的主要发现, 即过渡到 GOE, 然后过渡到泊松能级间距统计, 是使用平均场 Hubbard 模型获得的。一个问题是转换是否是平均场近似的产物。事实上, 正如之前平均场 Hubbard 模型与密度函数理论 [305] 或来自量子蒙特卡洛方法 [18] 的结果比较, 这种近似在电子-电子相互作用强度  $U$  值在相对较小的弱相互作用区域中是有效的。在强相互作用机制中, 平均场模型可能会崩溃。然而, 我们的发现的有效性有物理上的理由。特别地, 未发现的从 GOE 到泊松的能级间距统计取决于两个因素: (1) 蜂窝晶格中从铁磁序到反铁磁序的相变变化和 (2) 带隙的打开。例如, 当  $U$  大约为  $U_c \sim 2.1t$  时, 能谱统计发生转变, 其中统计数据实际上是 GOE, 如图 6-5 (a, b) 所示的  $60^\circ$ AA 石墨烯弹球和图 6-8 (a, b) 所示的  $15^\circ$ ZM 石墨烯弹球。 $U_c$  的值接近相变点  $2.23t$ , 在该点蜂窝晶格从铁磁序转变为反铁磁序 [18]。超过临界值  $U_c$ , 带隙打开, 石墨烯晶格中 A 和 B 原子的等效格点电势开始相互偏离。随着  $U$  的进一步增加, 差异变得更大, 等效地为狄拉克哈密顿量贡献了一个质量项, 并使晶格上的相对论量子准粒子具有质量。因此, 在狄拉克点附近的能量范围内, 相对波数  $k$  较小, 有质量的狄拉克方程可以用薛定谔方程来近似。当发生这种情况时, 圆形扇区量子弹球, 无论角度如何, 都是可积的并遵循泊松分布。总而言之, 我们工作中发现的能谱统计中的转变是有效的, 因为在以前的工作中已经揭示了铁磁到反铁磁的转变 [18, 160, 314, 322, 323]。因此, 我们的发现不是平均场模型的假象, 而是一种稳健的物理现象。

另一个问题涉及多体局域化 (Many-body localization, MBL) 在能谱统计转变中的可能作用。MBL 是量子系统中的一种多体现象, 它阻碍系统达到热平衡 [324]。先前关于自旋链模型的工作表明, MBL 可以导致能谱的泊松统计 [325, 326], 这与石墨烯弹球的结果一致, 其中量子态的局域化导致状态之间的相关性被打破 [143] 可以产生类泊松能谱统计 [28, 215, 287]。(例如, 混沌动力学导致

的能谱关联，通常会导致类 GOE 的能谱统计 [134, 285, 286]。) 然而，我们发现在大  $U$  情况下导致的泊松统计不是由任何局域态引起的，而是由于带隙打开从而导致从无质量狄拉克准粒子到有质量狄拉克准粒子的转变。我们已经计算了表征本征态局部化程度的参与率 [327] 并发现该比率在经历  $U_c$  的过渡的时候没有系统性变化，即使在大的  $U$  条件下也是泊松统计。

最后，之前的研究表明对于处于金属-绝缘体相变下的系统，能谱统计在接近转变点时应该遵循半泊松分布 [320, 328]。在我们的研究中，当 Hubbard 相互作用强度落在适当的区间（即  $U \sim t$  到  $1.5t$ ）时，也会出现半泊松统计，但该能谱统计与临界状态无关。

## 第七章 总结与展望

### 7.1 总结

量子力学中微观粒子的状态可用波函数来表示，其幅度的平方表示了在该位置上发现粒子的概率。对于开放量子系统，一个小区域内存在粒子的概率密度可以通过波函数进行计算，从而得到粒子的局域态密度。波函数和局域态密度作为量子力学中最基本的概念之一，在量子混沌、量子输运等领域对其丰富的内涵进行了广泛的探讨。一个关键的问题是对波函数和局域态密度的成像，对此本论文讨论了实验上常用的 SGM 成像技术。波函数的一个重要的应用是其通常可以反映出系统对应的经典轨道信息。因此通过理解量子弹球和量子点中的经典动力学，可以更好的研究对应系统的量子行为。在开放量子点中，通过与环境耦合但能保存下来的局域态密度——指针态，对系统的输运特征具有重要的影响，通过半经典理论可以对指针态的输运特征进行很好的解释。而对于闭合系统，如量子弹球，波函数通常可以直观的反映出系统的性质，并可以用能谱统计对系统性质进行定量描述。石墨烯因其室温下的高迁移率以及其低能下准粒子可由无质量狄拉克方程描述的性质，近二十年来一直是实验和理论物理关注的焦点之一。波函数作为描述电子在石墨烯中运动行为的重要物理量，对理解石墨烯中相对论性狄拉克费米子区别于传统的由薛定谔方程描述的二维电子气的行为具有重要的意义。本论文在理论和数值上对石墨烯中的 SGM 技术、石墨烯量子点的磁性输运以及石墨烯弹球中的多体能谱统计进行了研究。研究取得的具体成果叙述如下。

SGM 技术是对输运器件中局域电子态密度观测的常见手段之一，近年来也被广泛的应用在石墨烯相关的研究中，虽然数值上对相关问题进行了一定程度的研究，但是为了解决实验中可能遇到的参数和几何特征的多样性，开发一种 SGM 响应的理论方法十分重要。我们在第四章中研究了在 SGM 探针电势影响下的石墨烯 GNR 和 GNC 中的输运性质。结果表明在弱探针机制下，数值结果很好的符合了利用散射理论推导的电导修正的解析表达式。我们发现，在金属性扶手椅 GNR 的电导平台上，探针诱导的电导修正正是对探针强度的二次依赖，并且其值始终为负。而在零横向能量模式下则会发生特殊情况，通过将理论推导至  $n$  阶修正，我们发现零横向能量模式下的电导修正为严格的完美输运。而当电导修正绘制为探针势强度和宽度的特定组合时，会出现数据折叠，表明强而窄的探

针与弱而宽的探针之间存在标度关系。对于强探针机制，我们发现因载流子在探针电势下受限会导致电导共振，从电导分解的角度看，最低通道的电导贡献了该电导共振。此外，该理论也可以应用在 GNC 中。在该情况下，电导平台通常不复存在，根据扰动方法可以预测，在非侵入探针机制下，电导修正关于探针强度呈线性相关，数值证明了这一结论。而对于低能下 GNC 中存在的微弱电导平台，电导修正也会呈现出与探针强度的二次依赖性。当探针放置在 GNC 的最窄部分且局部最大值靠近边缘时，电导修正作为探针位置函数的数值结果显示了明显的空间分布特征。这种行为与未受干扰的部分局域态密度在 GNC 最窄处的聚集程度有关。然而，电流密度没有表现出明显的相关行为。锯齿形 GNR 表现出与扶手椅形类似的 SGM 响应行为，具有二次电导修正，除非靠近边界的探针电势足够强从而产生局部 n-p 结破坏了手性边界态的完美电导。锯齿形 GNC 通常会破坏完美的输运通道，因此和扶手椅形相似，电导修正都会表现出对探针强度的线性依赖。对于其中提到的一些理论发现，如 SGM 修正对初始探针电势强度的一般线性和二次依赖性、强探针机制下的电导共振、GNC 中的 SGM 扫描图的空间分布特征以及完美电导通道的可能破坏则有可能在实验上实现。

相对论性的量子疤痕态可以在石墨烯系统中观测到，但是对相对论性的磁性疤痕的研究还是一个开放问题，因此探究石墨烯中的磁性疤痕及其输运特征十分有必要。我们在第五章中研究了石墨烯量子点在小磁场下的输运特征。结果表明石墨烯量子点的电导图中有与形状有关的两种类型的电导等高线：直线型和抛物线型，对应的指针态分别为回音壁型和弹跳球型。数值计算和理论分析有很好的对应关系。电导等高线和指针态在弱强度的杂质势分布下可以稳定存在，然而高强度的杂质势会使得电导值衰减，并使得 PLDOS 和电流密度按照杂质势进行分布。通过器件大小、磁场范围和费米能范围三者之间的标度并结合费米能和背栅压之间的关系，可以为数值结果模拟实验结果的合理性提供依据。此外，与电导等高线相关的结果在实验上得到了实验数据的支持。

量子混沌领域的绝大多数工作都集中在单粒子非相对论体系，研究多体相互作用、相对论性量子力学和经典动力学三者之间的关系也十分有价值。我们在第六章中研究了不同圆形扇区石墨烯弹球的多体能谱统计。结果表明，对于狄拉克点附近的能量，Hubbard 相互作用对能谱统计有着显著影响。无论不加相互作用时系统的能谱统计类型如何，将 Hubbard 相互作用强度提高到临界值前都会导致其能谱统计接近 GOE。当相互作用强度增加到超过临界值时，能谱统计开始偏向泊松统计。此外，我们还发现，高于和低于狄拉克点的能级可以表现出不同的能谱统计，而多体相互作用对远离狄拉克点的能级的能谱统计几乎没有影

响。

客观来说，我们的工作也存在着一些不足。比如第五章对抛物线型电导等高线目前只能进行定性描述。该问题后续可以结合 Mason 等人发展的 Husimi 函数，即一个能够很好的描述闭合和开放系统对应的经典轨道的工具 [329, 330]，可以从指针态得到清晰的经典轨道，从而进行定量分析。此外，在第六章中并不能给出一个经济体系统的经典轨道和量子波函数对应的直观图像。

综上所述，本论文对与石墨烯中波函数相关的三个课题进行了系统的研究，深入理解了 SGM 探针对石墨烯结构的电导修正和对局域态密度的成像原理、发现了石墨烯量子点电导图中相对论性电导等高线并给出了理论解释和数值验证以及发现了石墨烯圆形扇区弹球中反常的多体能谱统计并给了一个启发式的理解。此外，我们的工作与实验联系的十分紧密，对石墨烯中 SGM 技术、磁性输运以及多体效应研究的部分结果有实验实现的可能性。因此，本论文的研究对基础和应用物理都有一定的价值。

## 7.2 展望

石墨烯中的非侵入的 SGM 理论可以作为一种研究还未被解答的有趣问题的框架。其可能的探索方向有：(i) 狄拉克费米子的光学性质。将我们的方法扩展到微米尺寸，并与石墨烯中电子光学的半经典方法 [250, 251] 联系起来，再考虑文献 [246] 研究的欧姆到弹道输运的转变，便有可能理解文献 [88] 中石墨烯电子的反常聚集现象。(ii) 石墨烯中有磁场的 SGM 理论。将该套扰动展开方法拓展到有磁场的情况，可能解决与磁场有关的 SGM 实验中的分歧 [73, 74, 81, 83, 86, 203, 241, 252, 331]。(iii) 推广到双层石墨烯。最近实验上可以利用 SGM 技术对双层石墨烯中的窄通道的局域态进行成像 [84]，以及观察从收缩结构中发出的电子喷射流 [85]。将 SGM 理论推广到双层甚至旋转双层石墨烯很有研究意义。(iv) 相对论性量子疤痕态的成像。以往的研究对石墨烯环中的重复出现的相对论性疤痕态进行了成像 [200]，并且也观测到了石墨烯电子在磁场下的回旋轨道 [74]，近期文献 [44] 中报道了 SGM 对石墨烯中回音壁模式的研究。自然的，能否对石墨烯中相对论性的疤痕态（包括磁性疤痕）进行成像也是一个值得探索的方向。(v) 输运中的电子-电子相互作用。SGM 在 QPC 中的应用被视为可以研究电子相互作用的潜在有效工具。甚至在早期的实验中，也有人尝试研究电子的移相问题。虽然这些问题后来被重新定义了，但是对电子间的相互作用和关联的研究始终是一个活跃的领域。

对于石墨烯中的磁性输运，可能的研究方向有：(i) 相对论性的磁性疤痕态。虽然我们对开放系统的指针态进行了半经典理论的验证，但是石墨烯系统中是否存在磁性疤痕态仍然是一个开放问题。(ii) 不同形式标度关系与器件大小范围的关系及其内在机制。文献 [277] 中器件大小（约器件面积的根方） $D$  和磁场范围  $\Delta B$  的成反比，但是我们在方程(5.20)得到的是器件面积与磁场范围成反比，并且这两种标度都得到了相关研究结果的验证。根据文献 [278, 279] 中论述，这种标度关系和器件的大小有关。其内在机制仍需要进一步的研究。(iii) 定量描述抛物线型电导等高线的斜率变化。文献 [332] 表明电流密度并不能反映开放量子点中的经典轨道，为了解决这个问题 Mason 等人发展了 Husimi 函数，使之能够很好的描述闭合和开放系统对应的经典轨道 [329, 330]。利用此方法，有可能定量描述抛物线型电导等高线的斜率。

对于石墨烯弹球中的能谱统计及多体效应，可能的研究方向有：(i) 石墨烯中的磁性能谱统计。不加磁场下经典可积弹球系统，如方形弹球，根据施加磁场大小的不同，其庞加莱图显示系统可以经历从可积到混沌的变化。对于石墨烯弹球，其对应的能谱统计应该比较有探索的价值。(ii) 多体粒子的经典轨道和量子波函数的对应。我们研究了量子系统中的多体相互作用，然而却缺乏与经典图像的对应。经典多体系统的粒子轨迹和量子波函数的对应关系仍需进一步探索。

## 附录 A 石墨烯纳米条带中的波函数

### A.1 锯齿形石墨烯纳米条带

让  $\kappa_y \rightarrow -i\partial_y$ 。边界条件为  $\Phi_A(x, y=0) = \Phi_B(x, y=W) = 0$ , 并且我们可以把赝自旋量重写为

$$\psi^\nu(\mathbf{r}) = e^{i\kappa_x x} \phi^\nu(y) = e^{i\kappa_x x} \begin{pmatrix} \phi_A^\nu(y) \\ \phi_B^\nu(y) \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

当将方程(2.25)带入后, 并且应用边界条件, 可以得到

$$e^{iK_0 x} e^{i\kappa_x x} \phi_A^+(0) + e^{-iK_0 x} e^{i\kappa_x x} \phi_A^-(0) = 0, \quad (\text{A.2})$$

$$e^{iK_0 x} e^{i\kappa_x x} \phi_B^+(W) + e^{-iK_0 x} e^{i\kappa_x x} \phi_B^-(W) = 0. \quad (\text{A.3})$$

我们发现方程 (A.2) 和 (A.3) 在  $\phi_A^\nu(0) = \phi_B^\nu(W) = 0$  的条件下可解。横向波函数也是狄拉克哈密顿量的本征函数:

$$h^\nu(\boldsymbol{\kappa}) \phi^\nu(y) = \varepsilon(\boldsymbol{\kappa}) \phi^\nu(y), \quad (\text{A.4})$$

或者,

$$\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \nu\kappa_x - \partial_y \\ \nu\kappa_x + \partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A^\nu(y) \\ \phi_B^\nu(y) \end{pmatrix} = \varepsilon(\boldsymbol{\kappa}) \begin{pmatrix} \phi_A^\nu(y) \\ \phi_B^\nu(y) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

因此会产生两个耦合的方程

$$\hbar v_F(\nu\kappa_x - \partial_y) \phi_B^\nu(y) = \varepsilon(\boldsymbol{\kappa}) \phi_A^\nu(y) \quad (\text{A.6})$$

以及

$$\hbar v_F(\nu\kappa_x + \partial_y) \phi_A^\nu(y) = \varepsilon(\boldsymbol{\kappa}) \phi_B^\nu(y). \quad (\text{A.7})$$

将  $\hbar v_F(\nu\kappa_x - \partial_y)$  带入方程 (A.7), 可得

$$\hbar^2 v_F^2 (\kappa_x^2 - \partial_y^2) \phi_A^\nu(y) = \varepsilon(\boldsymbol{\kappa}) \hbar v_F (\nu\kappa_x - \partial_y) \phi_B^\nu(y) = \varepsilon^2(\boldsymbol{\kappa}) \phi_A^\nu(y). \quad (\text{A.8})$$

借助通解

$$\phi_A^\nu(y) = C_A^\nu e^{i\kappa_n y} + D_A^\nu e^{-i\kappa_n y}, \quad (\text{A.9})$$

得到

$$\hbar^2 v_F^2 (\kappa_x^2 - \partial_y^2) \phi_A^\nu(y) = \hbar^2 v_F^2 (\kappa_x^2 + \kappa_n^2) \phi_A^\nu(y) = \epsilon^2(\boldsymbol{\kappa}) \phi_A^\nu(y), \quad (\text{A.10})$$

其中  $\varepsilon(\boldsymbol{\kappa}) = \lambda \hbar v_F \sqrt{\kappa_x^2 + \kappa_n^2}$ ,  $\lambda = \pm 1$ 。对于第一个边界条件  $\phi_A^\nu(0) = 0$ , 我们有

$$\phi_A^\nu(0) = C_A^\nu + D_A^\nu = 0 \rightarrow D_A^\nu = -C_A^\nu, \quad (\text{A.11})$$

因此

$$\phi_A^\nu(y) = C_A^\nu (e^{i\kappa_n y} - e^{-i\kappa_n y}) = 2iC_A^\nu \sin(\kappa_n y). \quad (\text{A.12})$$

当  $\kappa_n$  为实数时, 方程 (A.7) 中的  $\mathbf{B}$  分量为

$$\begin{aligned} \phi_B^\nu(y) &= \frac{\hbar v_F}{\varepsilon(\boldsymbol{\kappa})} (\nu \kappa_x + \partial_y) \phi_A^\nu(y) \\ &= \frac{\hbar v_F C_A^\nu}{\varepsilon(\boldsymbol{\kappa})} [(\nu \kappa_x + i\kappa_n) e^{i\kappa_n y} - (\nu \kappa_x - i\kappa_n) e^{-i\kappa_n y}] \\ &= 2i\lambda C_A^\nu \sin[\kappa_n y + \theta_\nu(\boldsymbol{\kappa})], \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

其中  $\theta_\nu(\boldsymbol{\kappa}) = \arg(\nu \kappa_x + i\kappa_n)$ .

利用第二个边界条件,  $\phi_B^\nu(W) = 0$ , 可得

$$e^{2i\kappa_n W} = \frac{\nu \kappa_x - i\kappa_n}{\nu \kappa_x + i\kappa_n}, \quad (\text{A.14})$$

也可以写成

$$\nu \kappa_x = -\frac{\kappa_n}{\tan(\kappa_n W)}. \quad (\text{A.15})$$

当  $\kappa_n$  为虚数时, 例如  $\kappa_n = iq_n$  以及  $\varepsilon = \hbar v_F \sqrt{\kappa_x^2 - q_n^2}$ , 方程(A.15)变为

$$\nu \kappa_x = -\frac{q_n}{\tanh(q_n W)}. \quad (\text{A.16})$$

这些解是局域化的边界态。

从方程(A.15)和(A.16)中, 我们注意到, 对于锯齿形石墨烯条带, 横向动量  $\kappa_n$  和纵向动量  $\kappa_x$  相关联。因此我们不能得到他们的解析解, 但却可以得到其数值解。

## 归一化

系数  $C_A^\nu$  可以通过归一化得到

$$\int_0^W dy |\phi_A^\nu(y)|^2 = \frac{1}{4}, \quad (\text{A.17})$$

这里的  $1/4$  是因为我们只是对一个谷自由度的一个子晶格做了归一化,

$$\begin{aligned} \int_0^W dy |\phi_A^\nu(y)|^2 &= 4C_A^\nu \int_0^W dy \sin^2(\kappa_n y) = \\ &= \frac{(2C_A^\nu)^2}{2} \int_0^W dy [1 - \cos(2\kappa_n y)] = \dots \\ &= (C_A^\nu)^2 \frac{2\kappa_n W - \sin(2\kappa_n W)}{\kappa_n} = \frac{1}{4}, \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

对于  $\kappa_n$  为实数的情况,

$$C_A^\nu = C_A^\nu(\kappa_n) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\kappa_n}{2\kappa_n W - \sin(2\kappa_n W)}}. \quad (\text{A.19})$$

对于  $\kappa_n = iq_n$  的情况,

$$C_A^\nu(q_n) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{q_n}{2q_n W - \sinh(2q_n W)}}, \quad (\text{A.20})$$

其中用到了  $\sinh(z) = -i \sin(iz)$  的关系。

## A.2 扶手椅形石墨烯纳米带

令  $\kappa_x \rightarrow -i\partial_x$ , 边界条件为  $\Phi(x=0, y) = \Phi(x=W, y) = 0$ , 即子晶格的两个组分的值在两个边界上都应设置为 0。

为了不改变石墨烯格点在动量空间的布里渊区, 我们采用和锯齿形石墨烯一样的石墨烯格点, 因此对于扶手椅石墨烯, 其横向动量为  $\kappa_n$ , 纵向动量为  $\kappa_y$ 。区别于方程(A.1), 我们重新书写了石墨烯的自旋波函数

$$\psi^\nu(\mathbf{r}) = e^{i\kappa_y y} \phi^\nu(x) = e^{i\kappa_y y} \begin{pmatrix} \phi_A^\nu(x) \\ \phi_B^\nu(x) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.21})$$

以及

$$-i\hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & \nu\partial_x + \kappa_y \\ \nu\partial_x - \kappa_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A^\nu(x) \\ \phi_B^\nu(x) \end{pmatrix} = \epsilon(\vec{\kappa}) \begin{pmatrix} \phi_A^\nu(x) \\ \phi_B^\nu(x) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.22})$$

带入方程 (4.1) 以及应用边界条件, 可以得到

$$\psi^+(0) + \psi^-(0) = 0, \quad (\text{A.23})$$

$$e^{iK_0 W} \psi^+(W) + e^{-iK_0 W} \psi^-(W) = 0. \quad (\text{A.24})$$

重复利用通解,  $\phi_A^\nu(x) = C_A^\nu e^{i\kappa_n x} + D_A^\nu e^{-i\kappa_n x}$ , 可得

$$C_A^+ + D_A^+ + C_A^- + D_A^- = 0, \quad (\text{A.25})$$

$$e^{i(K_0 + \kappa_n)W} C_A^+ + D^{i(K_0 - \kappa_n)W} D_A^+ + e^{-i(K_0 - \kappa_n)W} C_A^- + e^{-i(K_0 + \kappa_n)W} D_A^- = 0. \quad (\text{A.26})$$

其中一个可能解是令  $C_A^+ = -D_A^+$  以及  $C_A^- = D_A^+ = 0$ , 可得

$$C_A^+ (e^{i(K+\kappa_n)W} - e^{-i(K+\kappa_n)W}) = 2iC_A^+ \sin[(K + \kappa_n)W] = 0. \quad (\text{A.27})$$

我们发现  $\kappa_n$  满足条件  $(K_0 + \kappa_n)W = n\pi$ , 或者

$$\kappa_n = \frac{n\pi}{W} - K_0 = \frac{n\pi}{W} - \frac{4\pi}{3a_0}. \quad (\text{A.28})$$

并且能量色散关系为  $\varepsilon(\vec{\kappa}) = \pm \hbar v_F \sqrt{\kappa_y^2 + \kappa_n^2}$ 。我们可得

$$\phi_A^\nu(x) = \nu C_A^\nu e^{i\nu\kappa_n x}, \quad (\text{A.29})$$

和锯齿形石墨烯的步骤一样, 可得

$$\begin{aligned} \phi_B^\nu(x) &= \frac{-i\hbar v_F}{\varepsilon(\boldsymbol{\kappa})} (\nu \partial_X - \kappa_y) \phi_A^\nu(x) \\ &= \frac{-i\nu\hbar v_F C_A^\nu}{\varepsilon(\boldsymbol{\kappa})} (i\kappa_n - \kappa_y) e^{i\nu\kappa_n x} \\ &= i\lambda\nu C_A^\nu e^{i\theta(\boldsymbol{\kappa})} e^{i\nu\kappa_n x}, \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

其中  $\theta(\boldsymbol{\kappa}) = \arg(\kappa_y - i\kappa_n)$ 。

## 归一化

由于石墨烯中  $A$  和  $B$  格点的数量相当, 我们对其中一种类型的格点进行归一化可得

$$\int_0^W dx |\Phi_{A/B}(x)|^2 = 4|C_A^\nu|^2 \int_0^W dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{W}x\right) = 2|C_A^\nu|^2 W = \frac{1}{2}, \quad (\text{A.31})$$

从中可得  $C_A^\nu = \sqrt{1/4W}$ 。

## 附录 B 能量积分的求解

### B.1 石墨烯 Fisher-Lee 关系中的积分

本节做方程(3.43)中的积分。我们首先注意到  $\lambda s$  必须和  $\bar{\lambda} \bar{s}$  相同，不然根据横向正交关系 (3.36)，积分会变为零。因此，整个的积分将会简化为

$$\begin{aligned} \mathcal{U} &= \sum_{m,m'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \sum_{\bar{c}} \varphi_{2,\bar{\varepsilon},b}^{(+)\dagger}(m, y) \sigma_y \sum_{\bar{d}} t_{\bar{d}\bar{c}} \varphi_{2,\bar{\varepsilon},\bar{d}}^{(+)}(m, y) \varphi_{1,\bar{\varepsilon},\bar{c}}^{(-)\dagger}(m', y') \sigma_y \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(m', y') \\ &= \left( \frac{1}{2\pi\hbar v_F} \right)^2 \sum_{m,m'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \sum_{\bar{c}} \\ &\quad \left( \left[ e^{isk_b^{(+)}y} \chi_{\varepsilon,b,s}(m) \right]_{\lambda s=1} \right)^\dagger \sigma_y \left( \sum_{\bar{d}} t_{\bar{d}\bar{c}} \left[ e^{i\bar{s}\bar{k}_{\bar{d}}^{(+)}y} \chi_{\bar{\varepsilon},\bar{d},\bar{s}}(m) \right]_{\bar{\lambda}\bar{s}=1} \right) \times \\ &\quad \left( \left[ e^{i\bar{s}\bar{k}_{\bar{c}}^{(-)}y'} \chi_{\bar{\varepsilon},\bar{c},\bar{s}}(m') \right]_{\bar{\lambda}\bar{s}=1} \right)^\dagger \sigma_y \left[ e^{isk_a^{(-)}y'} \chi_{\varepsilon,a,s}(m') \right]_{\lambda s=1}. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

假设我们设置  $\lambda = -\bar{\lambda}$ ,  $s = -\bar{s}$ , 即  $\varepsilon \neq \bar{\varepsilon}$ , 根据导线的正交性(3.29)以及横向模式正交性(3.36), 我们可得  $\mathcal{U} = 0$ 。

因此, 我们只能得到  $\lambda = \bar{\lambda}$  和  $s = \bar{s}$  的可能情况, 其中用到了离散正弦函数的加和(3.30), 可得

$$\begin{aligned} \mathcal{U} &= \left( \frac{1}{2\pi\hbar v_F} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \sum_{\bar{c}} \sum_{\bar{d}} t_{\bar{d}\bar{c}} \times \\ &\quad e^{-is(k_b - \bar{k}_{\bar{d}})y} e^{-is(\bar{k}_{\bar{c}} - k_a)y'} e^{-2\eta(y-y')} \times \\ &\quad \sum_m \chi_{\varepsilon,b,s}^\dagger(m) \sigma_y \chi_{\bar{\varepsilon},\bar{d},s}(m) \sum_{m'} \chi_{\bar{\varepsilon},\bar{c},s}^\dagger(m') \sigma_y \chi_{\varepsilon,a,s}(m'), \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

其中, 我们设置  $\bar{\xi} = \bar{\varepsilon}/\hbar v_F = \bar{\lambda} \sqrt{\bar{k}_a^2 + q_a^2}$ , 以及  $\xi = \varepsilon/\hbar v_F = \lambda \sqrt{k_a^2 + q_a^2}$ 。通过应用(3.30), 可得

$$\sum_{m'} \chi_{\bar{\varepsilon},\bar{c},s}^\dagger(m') \sigma_y \chi_{\varepsilon,a,s}(m') = \frac{i}{2} \left( \frac{|\xi||\bar{\xi}|}{k_a \bar{k}_a} \right)^{1/2} \left( \frac{q_a - isk_a}{\xi} - \frac{q_a + i\bar{s}\bar{k}_a}{\bar{\xi}} \right) \delta_{\bar{c}a}, \quad (\text{B.3})$$

相似的, 我们从  $\sum_m \chi_{\varepsilon,b,s}^\dagger(m) \sigma_y \chi_{\bar{\varepsilon},\bar{d},s}(m)$  得到  $\delta_{b\bar{d}}$ 。注意到  $\sqrt{\bar{k}_a^2 + q_a^2} = \sqrt{\bar{k}_b^2 + q_b^2}$  以及  $\sqrt{k_a^2 + q_a^2} = \sqrt{k_b^2 + q_b^2}$ , 可得

$$k_b = k_a \sqrt{1 + \frac{q_a^2 - q_b^2}{k_a^2}} \approx k_a + \frac{q_a^2 - q_b^2}{2k_a}, \quad (\text{B.4})$$

$$\bar{k}_a^2 - k_a^2 = \bar{k}_b^2 - k_b^2, \quad (\text{B.5})$$

相似的，我们可以得到  $\bar{k}_b$ ，可得

$$\begin{aligned} k_b - \bar{k}_b &= (k_a - \bar{k}_a) + \frac{q_a^2 - q_b^2}{2} \left( \frac{\bar{k}_a - k_a}{k_a \bar{k}_a} \right) \\ &= (k_a - \bar{k}_a) \left[ 1 - \frac{q_a^2 - q_b^2}{2k_a \bar{k}_a} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

因此

$$\begin{aligned} e^{-is(k_b - \bar{k}_b)y} e^{-is(\bar{k}_a - k_a)y'} e^{-2\eta(y-y')} \\ = e^{-is(\bar{k}_a - k_a)y'} e^{-is(k_a - \bar{k}_a)y \left[ 1 - \frac{q_a^2 - q_b^2}{2k_a \bar{k}_a} \right]} e^{-2\eta(y-y')}, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

那么，传输方向的积分为

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon} e^{-is(\bar{k}_a - k_a)y'}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \\ &= \int_0^{\infty} \frac{\bar{\lambda} \bar{k}_a d\bar{k}_a}{\sqrt{\bar{k}_a^2 + q_a^2}} \frac{e^{-is(\bar{k}_a - k_a)y'}}{\lambda \sqrt{k_a^2 + q_a^2} + \frac{i\gamma}{\hbar v_F} - \bar{\lambda} \sqrt{\bar{k}_a^2 + q_a^2}} \\ &= \int_0^{\infty} \frac{\bar{k}_a d\bar{k}_a}{\sqrt{\bar{k}_a^2 + q_a^2}} \frac{e^{-is(\bar{k}_a - k_a)y'}}{\sqrt{k_a^2 + q_a^2} + i\lambda \bar{\gamma} - \sqrt{\bar{k}_a^2 + q_a^2}} \\ &= \int_0^{\infty} \frac{\bar{k}_a d\bar{k}_a}{\sqrt{\bar{k}_a^2 + q_a^2}} \frac{\sqrt{k_a^2 + q_a^2} + i\lambda \bar{\gamma} + \sqrt{\bar{k}_a^2 + q_a^2}}{k_a^2 - \bar{k}_a^2 + i\lambda \bar{\gamma}} e^{-is(\bar{k}_a - k_a)y'} \\ &= \int_0^{\infty} \frac{d\bar{k}_a}{k_a + \bar{k}_a + i\lambda \bar{\gamma}} \frac{e^{-is(\bar{k}_a - k_a)y'}}{k_a - \bar{k}_a + i\lambda \bar{\gamma}} (\dots), \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

其中  $\bar{\gamma} = \frac{\bar{\gamma}}{2k_a} = \frac{2\bar{\gamma}\sqrt{\bar{k}_a^2 + q_a^2}}{2k_a} = \frac{\gamma}{\hbar v_F} \sqrt{1 + \left( \frac{q_a}{k_a} \right)^2}$ ，显然的  $k_a \neq 0$ 。

这里，我们将上述积分写成一个简化的形式：

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \int_a^b dx \frac{f(x)}{x \pm i\eta} = \mathcal{P} \int_a^b dx \frac{f(x)}{x} \mp i\pi \int \delta(x) f(x), \quad (\text{B.9})$$

其中  $\eta > 0$ 。对于这种情况，我们可以利用  $a \rightarrow -\infty, b \rightarrow +\infty$  和  $f(x) = \exp(icx)$ ，那么主积分为

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{icx}}{x} &= \lim_{x_0^+ \rightarrow 0} \left( \int_{-\infty}^{-x_0^+} dx \frac{e^{icx}}{x} + \int_{x_0^+}^{\infty} dx \frac{e^{icx}}{x} \right) \\ &= \lim_{x_0^+ \rightarrow 0} \int_{x_0^+}^{\infty} dx \left( \frac{e^{icx} - e^{-icx}}{x} \right) \\ &= 2i \int_0^{\infty} dx \frac{\sin cx}{x} \\ &= i\pi \operatorname{sgn}(c) \delta(x). \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

因此, 可得

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{icx}}{x \pm i\eta} = (i\pi \operatorname{sgn}(c) \mp i\pi) \delta(x). \quad (\text{B.11})$$

通过应用方程(B.11)到方程(B.8)并使得  $x = \bar{k}_a - k_a$ , 此处  $y' < 0$ ,  $\lambda s = 1$ , 当  $\lambda = 1, s = 1$ , 那么  $\lambda \bar{\gamma} > 0$ , 可得

$$\begin{aligned} - \int_0^{\infty} \frac{d\bar{k}_a e^{-is(\bar{k}_a - k_a)y'}}{\bar{k}_a - k_a - i\lambda \bar{\gamma}} &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d(\bar{k}_a - k_a) e^{-is(\bar{k}_a - k_a)y'}}{\bar{k}_a - k_a - i\lambda \bar{\gamma}} \\ &= -(i\pi \operatorname{sgn}(-sy') + i\pi) \delta(\bar{k}_a - k_a) \\ &= -2\lambda\pi i \delta(\bar{k}_a - k_a), \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

而当  $\lambda = -1, s = -1$ , 那么  $\lambda \bar{\gamma} < 0$ , 可得

$$- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{k}_a e^{-is(\bar{k}_a - k_a)y'}}{\bar{k}_a - k_a - i\lambda \bar{\gamma}} = -2\lambda\pi i \delta(\bar{k}_a - k_a), \quad (\text{B.13})$$

因此, 可得

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon} e^{-is(\bar{k}_a - k_a)y'}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} = -2\lambda\pi i \delta(\bar{k}_a - k_a). \quad (\text{B.14})$$

同样, 我们可以借助以下等式获得上述结果

$$\lim_{y \rightarrow -\infty} \lim_{\gamma \rightarrow 0^+} \frac{\exp(iky)}{k - i\gamma} = 0, \quad (\text{B.15a})$$

$$\lim_{y \rightarrow +\infty} \lim_{\gamma \rightarrow 0^+} \frac{\exp(iky)}{k - i\gamma} = 2\pi i \delta(k), \quad (\text{B.15b})$$

$$\lim_{y \rightarrow -\infty} \lim_{\gamma \rightarrow 0^+} \frac{\exp(iky)}{k + i\gamma} = -2\pi i \delta(k), \quad (\text{B.15c})$$

$$\lim_{y \rightarrow +\infty} \lim_{\gamma \rightarrow 0^+} \frac{\exp(iky)}{k + i\gamma} = 0. \quad (\text{B.15d})$$

从方程(B.8)出发

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \frac{d\bar{k}_a}{k_a + \bar{k}_a + i\lambda \bar{\gamma}} \frac{e^{-is(\bar{k}_a - k_a)y'}}{k_a - \bar{k}_a + i\lambda \bar{\gamma}} (\cdots) \\ = \int_0^{\infty} \frac{d\bar{k}_a}{k_a + \bar{k}_a + i\lambda \bar{\gamma}} [-2\lambda\pi i \delta(\bar{k}_a - k_a)], \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

其中用到了方程(B.15b)和(B.15c)。那么, 我们能得到与方程(B.14)相同的结果。

当  $\varepsilon = \bar{\varepsilon}$ ,

$$\sum_m \chi_{\varepsilon, b, s}^\dagger(m) \sigma_y \chi_{\varepsilon, \bar{d}, s} = \lambda s \delta_{b\bar{d}} \delta_{ss}, \quad (\text{B.17})$$

以及

$$\sum_{m'} \chi_{\varepsilon, \bar{c}, s}^\dagger(m') \sigma_y \chi_{\varepsilon, a, s}(m') = \lambda s \delta_{\bar{c}a} \delta_{ss}. \quad (\text{B.18})$$

我们可以得到  $k_b = \sqrt{\varepsilon - q_b^2} = \sqrt{\bar{\varepsilon} - q_{\bar{d}}^2} = \bar{\varepsilon}_{\bar{d}}$ , 因此方程(B.2)变成

$$\mathcal{U} = \frac{-2\lambda\pi i}{(2\pi\hbar v_F)^2} \sum_{\bar{c}} t_{b\bar{c}} \lambda s \delta_{\bar{c}a} \lambda s = \frac{-i\lambda}{2\pi\hbar^2 v_F^2} t_{ba}. \quad (\text{B.19})$$

那么我们可以得到石墨烯中的 Fisher-Lee 关系

$$t_{ba} = i2\pi\hbar^2 v_F^2 \sum_{m,m'} \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)\dagger}(m,y) \sigma_y G(m,y,m',y';\varepsilon) \sigma_y \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(m',y'). \quad (\text{B.20})$$

## B.2 扰动方法中的积分

在本小节中, 我们计算出对探针电势扰动处理过程中出现的一些积分。我们首先介绍这些结果

$$\sum_{m=0}^{M+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)\dagger}(m,y) \sigma_y \varphi_{2,\bar{\varepsilon},\bar{b}}^{(+)}(m,y) f_1(\varepsilon, \bar{\varepsilon}) = -\frac{i}{\hbar v_F} \delta_{b,\bar{b}} f_1(\varepsilon, \bar{\varepsilon}), \quad (\text{B.21a})$$

$$\sum_{m'=0}^{M+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \varphi_{1,\bar{\varepsilon},\bar{a}}^{(-)\dagger}(m',y') \sigma_y \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(m',y') f_2(\varepsilon, \bar{\varepsilon}) = -\frac{i}{\hbar v_F} \delta_{a,\bar{a}} f_2(\varepsilon, \bar{\varepsilon}), \quad (\text{B.21b})$$

$$\sum_{m=0}^{M+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)\dagger}(m,y) \sigma_y \varphi_{2,\bar{\varepsilon},\bar{b}}^{(-)}(m,y) f_3(\varepsilon, \bar{\varepsilon}) = 0, \quad (\text{B.21c})$$

$$\sum_{m'=0}^{M+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \varphi_{1,\bar{\varepsilon},\bar{a}}^{(-)\dagger}(m',y') \sigma_y \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(m',y') f_4(\varepsilon, \bar{\varepsilon}) = 0, \quad (\text{B.21d})$$

其中  $y' < 0$  以及  $y > 0$ , 而  $f_i(\varepsilon, \bar{\varepsilon})$  (其中  $i = 1, \dots, 4$ ) 为任意形式的关于  $\varepsilon$  和  $\bar{\varepsilon}$  平滑变化的函数。

根据(3.35)对导线态的定义, 在方程(B.21a)的积分中, 我们有  $\lambda s = \bar{\lambda} \bar{s} = 1$ 。对  $m$  的加和导致了  $b = \bar{b}$ 。由于积分主要取决于  $\bar{\varepsilon} = \varepsilon$ , 我们能够限制积分到  $\bar{\lambda} = \lambda$  (因此  $\bar{s} = s$ )。做从  $\bar{\varepsilon}$  到  $\bar{k}_b$  的变换可以得到

$$\bar{\xi} = \bar{\varepsilon}/\hbar v_F = \bar{\lambda} \sqrt{\bar{k}_b^2 + q_b^2}, \quad (\text{B.22})$$

方程(B.21a)的左边可以写成

$$\begin{aligned} & -\frac{i\delta_{b,\bar{b}}\lambda}{4\pi\hbar v_F} \int_0^\infty d\bar{k}_b \left( \frac{\bar{k}_b}{k_b} \right)^{1/2} \left| \frac{\xi}{\bar{\xi}} \right|^{1/2} \left( \frac{q_b - isk_b}{\xi} - \frac{q_b + is\bar{k}_b}{\bar{\xi}} \right) \left( \sqrt{\bar{k}_b^2 + q_b^2} + \sqrt{k_b^2 + q_b^2} \right) \\ & \times \frac{1}{\bar{k}_b - (k_b + i\lambda\eta)} \frac{1}{\bar{k}_b + (k_b + i\lambda\eta)} e^{is(\bar{k}^{(+)} - k_b^{(-)})y} f_1(\varepsilon, \bar{\varepsilon}). \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

上述积分可以通过  $\bar{k}_b$  复平面中的围道积分解决。在  $\lambda = s = 1$  ( $\lambda = s = -1$ ) 的情况下，围道应该在上(下)半平面上闭合，对应的  $\text{Im}\{\bar{k}_b\}$  值正(负)，以便于对垂直和四分之一圆段上大的  $y$  值的贡献消失(见图 B-1)。这样的围道避开了在  $\bar{k}_b = \pm iq_b$  处的其他极点，以及与平方根相关的割线。这样一来，围道积分由极点  $k_b \pm i\eta$  决定，并且我们能够得到方程(B.21a)的结果。而对于方程(B.21b)，也有  $\lambda s = \bar{\lambda} \bar{s} = 1$ ，遵循与前一种情况相同的思路。

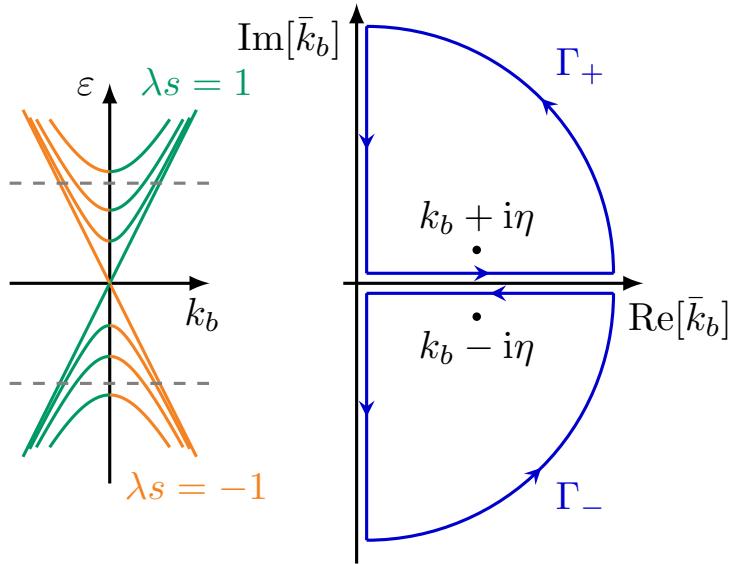


图 B-1: 左边: 金属性扶手椅 GNR 的最低能量导线态的色散关系, 绿色表示向上移动 ( $\lambda s = 1$ ), 橙色表示向下运动 ( $\lambda s = -1$ )。恒定能量为  $\varepsilon$  的灰色虚线确定传播模式允许的纵波矢量  $k_b$ 。右边: 对于方程(B.23)和(B.24)的复数  $\bar{k}_b$  平面的积分。对于方程(B.23)的积分, 上(下)轮廓  $\Gamma_+$  ( $\Gamma_-$ ) 被用于  $\lambda = s = 1$  ( $\lambda = s = -1$ ) 的情况。对于方程(B.24)采用相反的积分围道的选择。

在方程(B.21c)的积分中, 我们有  $\lambda s = -\bar{\lambda} \bar{s} = 1$ , 并且通过  $m'$  的求和导致  $b = b'$ 。通过限制能量积分的区间, 使得  $\bar{\lambda} = \lambda$  (因此  $\bar{s} = -s$ ), 并执行上面指定的相同变量转变, 方程(B.21c)的左侧可以写成

$$\begin{aligned} & \frac{i\delta_{b,\bar{b}}\lambda}{4\pi\hbar v_F} \int_0^\infty d\bar{k}_b \left(\frac{\bar{k}_b}{k_b}\right)^{1/2} \left|\frac{\xi}{\bar{\xi}}\right|^{1/2} \left(\frac{q_b + isk_b}{\xi} - \frac{q_b + is\bar{k}_b}{\bar{\xi}}\right) \left(\sqrt{\bar{k}_b^2 + q_b^2} + \sqrt{k_b^2 + q_b^2}\right) \\ & \times \frac{1}{\bar{k}_b - (k_b + i\lambda\eta)} \frac{1}{\bar{k}_b + (k_b + i\lambda\eta)} e^{-is(\bar{k}_b^{(-)} + k_b^{(-)})y} f_3(\varepsilon, \bar{\varepsilon}). \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

在  $\lambda = s = 1$  ( $\lambda = s = -1$ ) 的情况下, 围道应该在下(上)半平面上闭合, 对应的  $\text{Im}\{\bar{k}_b\}$  值负(正), 以便于对垂直和四分之一圆段上大的  $y$  值的贡献消失

(见图 B-1)，围道内没有极点导致积分为零，可得方程(B.21c)的结果。对于方程(B.21d)，我们也可得到  $\lambda s = -\bar{\lambda} \bar{s} = 1$ ，遵循与前一种情况相同的思路。

### B.3 零横向能量模式的 SGM 响应

我们继续证明关于金属性扶手椅 GNR 的零横向能量模式的重要验证：

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}) \mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\bar{\varepsilon}, \varepsilon) = -i\pi [\mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\varepsilon, \varepsilon)]^2. \quad (\text{B.25})$$

考虑到上述与  $\bar{\varepsilon}$  的积分项，我们需要计算

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \chi_{1, \bar{\varepsilon}, a^*}(m, y) \chi_{1, \bar{\varepsilon}, a^*}^\dagger \\ &= \frac{1}{\pi \hbar v_F} \frac{1}{M+1} \sin\left(\frac{\pi a^* m}{M+1}\right) \sin\left(\frac{\pi a^* m'}{M+1}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} e^{i\bar{\lambda} \bar{k}_{a^*}(y-y')}. \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

其中  $\bar{\varepsilon} = \hbar v_F \bar{\lambda} \bar{k}_{a^*}$  以及  $\varepsilon = \hbar v_F \lambda k_{a^*}$ 。上述  $\bar{\varepsilon}$  积分可以通过  $\bar{k}_{a^*}$  复平面的围道积分轻松完成，因此

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}} \mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}) \mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\bar{\varepsilon}, \varepsilon) \\ &= -\frac{2i}{\hbar v_F} \frac{1}{M+1} \sum_{m=0}^{M+1} \sum_{m'=0}^{M+1} \sin\left(\frac{\pi a^* m}{M+1}\right) \sin\left(\frac{\pi a^* m'}{M+1}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dy' \\ & \times \vartheta(y-y') \chi_{1, \varepsilon, a^*}^\dagger(m, y) U_T(ma_0, y) e^{i\lambda k_{a^*}(y-y')} U_T(m'a_0, y') \chi_{1, \varepsilon, a^*}(m', y'), \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

其中  $\vartheta$  为 Heaviside 阶梯函数。由于关于  $(y, y')$  的积分是  $U_T(ma_0, y)U_T(m'a_0, y')$ ，可以看出关于  $(y, y')$  的积分是不受限制的，可在  $\vartheta(y-y')$  乘以系数  $1/2$ 。因此，方程(B.27)可以写成是两个探针势矩阵元的乘积，并且根据方程(B.25)，可以得到主积分为零。

方程(B.25)的结果可以推广到  $n-1$  个中间能量积分，导致

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}_2}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}_3}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}_3} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\varepsilon}_n}{\varepsilon^+ - \bar{\varepsilon}_n} \\ & \times \mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\varepsilon, \bar{\varepsilon}_2) \mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\bar{\varepsilon}_2, \bar{\varepsilon}_3) \cdots \mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\bar{\varepsilon}_n, \varepsilon) \\ &= [-i\pi]^{n-1} [\mathcal{U}_{a^*, a^*}^{1,1}(\varepsilon, \varepsilon)]^n. \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

这样的结果可以通过用相应波函数的矩阵元来获得，然后可以独立的进行能量积分，将会产生  $[-2\pi i]^{n-1}$  的因子和  $\vartheta(y_1 - y_2)\vartheta(y_2 - y_3) \cdots \vartheta(y_{n-1} - y_n)$  的约束。之前，因为探针势  $U_T$  的存在，因此积分只与  $(y_1, y_2, \dots, y_n)$  有关，从而使得  $(y_1, y_2, \dots, y_n)$  积分可以通过在 Heaviside 阶梯函数前加上  $1/2^n$  的系数变得不受限制，即会得到矩阵元的  $n$  阶项。

## 附录 C 横向部分的加和

开始做横向部分的求和

$$\begin{aligned}
 \mathcal{N} &= \sum_{m=0}^M \sin\left(\frac{a\pi}{M+1}m\right) \sin\left(\frac{a'\pi}{M+1}m\right) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{m=0}^M \left[ \cos\left(\frac{\pi m}{M+1}\Delta a\right) - \cos\left(\frac{\pi m}{M+1}\mathcal{A}\right) \right] \\
 &= \frac{1}{2} \left[ \cos\left(\frac{\pi\Delta a}{2}\frac{M}{M+1}\right) \frac{\sin(\pi\Delta a/2)}{\sin(\pi\Delta a/2(M+1))} \right. \\
 &\quad \left. - \cos\left(\frac{\pi\mathcal{A}}{2}\frac{M}{M+1}\right) \frac{\sin(\pi\mathcal{A}/2)}{\sin(\pi\mathcal{A}/2(M+1))} \right], 
 \end{aligned} \tag{C.1}$$

其中用到了

$$\begin{aligned}
 \sum_{m=0}^N \cos(km) &= \frac{1}{2} \sum_{m=0}^N (e^{ikm} + e^{-ikm}) \\
 &= \frac{1}{2} \left( \frac{1 - e^{ik(N+1)}}{1 - e^{ik}} + \frac{1 - e^{-ik(N+1)}}{1 - e^{-ik}} \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left( \frac{e^{ik(N+1)/2}}{e^{ik/2}} \frac{\sin(k(N+1)/2)}{\sin(k/2)} + \frac{e^{-ik(N+1)/2}}{e^{-ik/2}} \frac{\sin(k(N+1)/2)}{\sin(k/2)} \right) \\
 &= \frac{\sin(k(N+1)/2)}{\sin(k/2)} \cos(kN/2), 
 \end{aligned} \tag{C.2}$$

以及

$$\sum_{n=0}^{N-1} r^n = \frac{1 - r^N}{1 - r}, \tag{C.3}$$

其中  $\Delta a = a - a'$  和  $\mathcal{A} = a + a'$ 。这里，我们需要注意的是在我们的情况下， $\sum_{m=0}^{M+1} = \sum_{m=1}^M$ ，因为扶手椅石墨烯纳米带的横向波函数在  $m = 0$  和  $m = M + 1$  为零。为了简化，我们选择  $N = M$ 。

### 1. $a = a'$

那么，我们可以得到  $\Delta a = 0$ ，以及  $\mathcal{A}/2 = a \in \mathbb{Z}^+$ ，

$$\begin{aligned}
 \mathcal{N} &= \frac{1}{2} \sum_{m=0}^M 1 - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi\mathcal{A}}{2}\frac{M}{M+1}\right) \frac{\sin(\pi\mathcal{A}/2)}{\sin(\pi\mathcal{A}/2(M+1))} \\
 &= (M+1)/2. 
 \end{aligned} \tag{C.4}$$

## 2. $a$ 和 $a'$ 具有相同的奇偶性

那么,  $\Delta a/2, \mathcal{A}/2 \in \mathbb{Z}$ , 即  $\sin(\pi\Delta a/2) = \sin(\pi\mathcal{A}/2) = 0$ , 可得  $\mathcal{N} = 0$ 。

## 3. $a$ 和 $a'$ 具有不同的奇偶性

使得  $a = 2p + 1$  和  $a' = 2q$ , 那么

$$\sin\left(\frac{\pi\Delta a}{2}\right) = \sin\left(\pi\left(p - q + \frac{1}{2}\right)\right) = \cos(\pi(p - q)) = (-1)^{p-q}, \quad (\text{C.5})$$

以及

$$\sin\left(\frac{\pi\mathcal{A}}{2}\right) = \sin\left(\pi\left(p + q + \frac{1}{2}\right)\right) = (-1)^{p+q}, \quad (\text{C.6})$$

这样一来, 可得

$$\begin{aligned} \mathcal{N} &= \frac{1}{2} \left[ \cos\left(\frac{\pi\Delta a}{2}\left(1 - \frac{1}{M+1}\right)\right) \frac{\sin(\pi\Delta a/2)}{\sin(\pi\Delta a/2(M+1))} \right. \\ &\quad \left. \cos\left(\frac{\pi\mathcal{A}}{2}\left(1 - \frac{1}{M+1}\right)\right) \frac{\sin(\pi\mathcal{A}/2)}{\sin(\pi\mathcal{A}/2(M+1))} \right] \quad (\text{C.7}) \\ &= \frac{1}{2} [\sin^2(\pi\Delta a/2) - \sin^2(\pi\mathcal{A}/2)] = 0, \end{aligned}$$

其中用到了  $\cos(\theta - \beta) = \cos(\theta)\cos(\beta) + \sin(\theta)\sin(\beta)$ 。

因此可得

$$\sum_{m=0}^{M+1} \sin\left(\frac{a\pi}{M+1}m\right) \sin\left(\frac{a'\pi}{M+1}m\right) = \frac{M+1}{2} \delta_{a,a'}. \quad (\text{C.8})$$

## 参考文献

- [1] P. A. M. Dirac and R. H. Fowler. *The Quantum Theory of the Electron*[J]. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, 1928, 117(778):610–624.
- [2] H. Weyl. *Gravitation and The Electron*[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 1929, 15(4):323–334.
- [3] S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, J. Graf, A. V. Fedorov, C. D. Spataru, R. D. Diehl, Y. Kopelevich, D.-H. Lee, S. G. Louie, and A. Lanzara. *First Direct Observation of Dirac Fermions in Graphite*[J]. Nature Physics, 2006, 2(9):595–599.
- [4] G. W. Semenoff. *Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly*[J]. Physical Review Letters, 1984, 53(26):2449–2452.
- [5] F. D. M. Haldane. *Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly"*[J]. Physical Review Letters, 1988, 61(18):2015–2018.
- [6] H. P. Boehm, A. Clauss, G. O. Fischer, and U. Hofmann. *Das Adsorptionsverhalten sehr dünner Kohlenstoff-Folien*[J]. Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie, 1962, 316(3-4):119–127.
- [7] H. P. Boehm, R. Setton, and E. Stumpp. *Nomenclature and Terminology of Graphite Intercalation Compounds*[J]. Carbon, 1986, 24(2):241–245.
- [8] X. Lu, M. Yu, H. Huang, and R. S. Ruoff. *Tailoring Graphite with the Goal of Achieving Single Sheets*[J]. Nanotechnology, 1999, 10(3):269–272.
- [9] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov. *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*[J]. Science, 2004, 306(5696):666–669.
- [10] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov. *Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene*[J]. Nature, 2005, 438(7065):197–200.
- [11] A. K. Geim. *Nobel Lecture: Random Walk to Graphene*[J]. Reviews of Modern Physics, 2011, 83(3):851–862.
- [12] M. L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski, C. Berger, and W. A. de Heer. *Landau Level Spectroscopy of Ultrathin Graphite Layers*[J]. Physical Review Letters, 2006, 97(26):266405.
- [13] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. *Chiral Tunnelling and the Klein Paradox in Graphene*[J]. Nature Physics, 2006, 2(9):620–625.
- [14] M. I. Katsnelson. *Graphene: Carbon in Two Dimensions*[J]. Materials Today, 2007, 10(1):20–27.
- [15] A. F. Young and P. Kim. *Quantum Interference and Klein Tunnelling in Graphene Heterojunctions*[J]. Nature Physics, 2009, 5(3):222–226.

- [16] N. Stander, B. Huard, and D. Goldhaber-Gordon. *Evidence for Klein Tunneling in Graphene p-n Junctions*[J]. Physical Review Letters, 2009, 102(2):026807.
- [17] V. N. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira, F. Guinea, and A. H. Castro Neto. *Electron-Electron Interactions in Graphene: Current Status and Perspectives*[J]. Reviews of Modern Physics, 2012, 84(3):1067–1125.
- [18] S. Sorella and E. Tosatti. *Semi-Metal-Insulator Transition of the Hubbard Model in the Honeycomb Lattice*[J]. Europhysics Letters, 1992, 19(8):699.
- [19] S. Sorella, Y. Otsuka, and S. Yunoki. *Absence of a Spin Liquid Phase in the Hubbard Model on the Honeycomb Lattice*[J]. Scientific Reports, 2012, 2(1):992.
- [20] Y.-C. Lai, H.-Y. Xu, L. Huang, and C. Grebogi. *Relativistic Quantum Chaos—An Emergent Interdisciplinary Field*[J]. Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, 2018, 28(5):052101.
- [21] L. Huang, H.-Y. Xu, C. Grebogi, and Y.-C. Lai. *Relativistic Quantum Chaos*[J]. Physics Reports, 2018, 753:1–128.
- [22] L. Huang and Y.-C. Lai. *Perspectives on Relativistic Quantum Chaos*[J]. Communications in Theoretical Physics, 2020, 72(4):047601.
- [23] L. Huang, Y.-C. Lai, D. K. Ferry, S. M. Goodnick, and R. Akis. *Relativistic Quantum Scars*[J]. Physical Review Letters, 2009, 103(5):054101.
- [24] X. Ni, L. Huang, Y.-C. Lai, and C. Grebogi. *Scarring of Dirac Fermions in Chaotic Billiards*[J]. Physical Review E, 2012, 86(1):016702.
- [25] H. Xu, L. Huang, Y.-C. Lai, and C. Grebogi. *Chiral Scars in Chaotic Dirac Fermion Systems*[J]. Physical Review Letters, 2013, 110(6):064102.
- [26] C.-Z. Wang, L. Huang, and K. Chang. *Scars in Dirac Fermion Systems: The Influence of an Aharonov–Bohm Flux*[J]. New Journal of Physics, 2017, 19(1):013018.
- [27] L. Huang, Y.-C. Lai, and C. Grebogi. *Relativistic Quantum Level-Spacing Statistics in Chaotic Graphene Billiards*[J]. Physical Review E, 2010, 81(5):055203.
- [28] M. Wimmer, A. R. Akhmerov, and F. Guinea. *Robustness of Edge States in Graphene Quantum Dots*[J]. Physical Review B, 2010, 82(4):045409.
- [29] K. Wakabayashi, S. Okada, R. Tomita, S. Fujimoto, and Y. Natsume. *Edge States and Flat Bands of Graphene Nanoribbons with Edge Modification*[J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2010, 79(3):034706.
- [30] L. Huang, Y.-C. Lai, and C. Grebogi. *Characteristics of Level-Spacing Statistics in Chaotic Graphene Billiards*[J]. Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, 2011, 21(1):013102.
- [31] L. Ying, G. Wang, L. Huang, and Y.-C. Lai. *Quantum Chaotic Tunneling in Graphene Systems with Electron-Electron Interactions*[J]. Physical Review B, 2014, 90(22):224301.
- [32] I. Hagymási, P. Vancsó, A. Pálkás, and Z. Osváth. *Interaction Effects in a Chaotic Graphene Quantum Billiard*[J]. Physical Review B, 2017, 95(7):075123.
- [33] S. W. McDonald. *Wave Dynamics of Regular and Chaotic Rays*[D]. University of California, September, 1983.

- [34] E. J. Heller. *Bound-State Eigenfunctions of Classically Chaotic Hamiltonian Systems: Scars of Periodic Orbits*[J]. Physical Review Letters, 1984, 53(16):1515–1518.
- [35] P. O'Connor, J. Gehlen, and E. J. Heller. *Properties of Random Superpositions of Plane Waves*[J]. Physical Review Letters, 1987, 58(13):1296–1299.
- [36] M. Toma and N. Yoshinaga. *Scars in Nonintegrable and Rational Billiards*[J]. Journal of Statistical Physics, 1996, 83(1):215–242.
- [37] F. Haake, M. Kus, P. Seba, H.-J. Stöckmann, and U. Stoffregen. *Microwave Billiards with Broken Time Reversal Invariance*[J]. Journal of Physics A: Mathematical and General, 1996, 29(18):5745.
- [38] A. Bäcker, S. Fürstberger, R. Schubert, and F. Steiner. *Behaviour of Boundary Functions for Quantum Billiards*[J]. Journal of Physics A: Mathematical and General, 2002, 35(48):10293.
- [39] A. Csordás, J. Cserti, A. Pályi, and U. Zölle. *Rashba Billiards*[J]. The European Physical Journal B, 2006, 54(2):189–200.
- [40] E. J. Heller. *The Semiclassical Way to Dynamics and Spectroscopy*[M]. Princeton: Princeton University Press, June, 2018.
- [41] W. Li, L. E. Reichl, and B. Wu. *Quantum Chaos in a Ripple Billiard*[J]. Physical Review E, 2002, 65(5):056220.
- [42] S. W. McDonald and A. N. Kaufman. *Spectrum and Eigenfunctions for a Hamiltonian with Stochastic Trajectories*[J]. Physical Review Letters, 1979, 42(18):1189–1191.
- [43] S. W. McDonald and A. N. Kaufman. *Wave Chaos in the Stadium: Statistical Properties of Short-Wave Solutions of the Helmholtz Equation*[J]. Physical Review A, 1988, 37(8):3067–3086.
- [44] B. Brun, V.-H. Nguyen, N. Moreau, S. Somanchi, K. Watanabe, T. Taniguchi, J.-C. Charlier, C. Stampfer, and B. Hackens. *Graphene Whispertronics: Transducing Whispering Gallery Modes into Electronic Transport*[J]. Nano Letters, 2022, 22(1):128–134.
- [45] M. A. Eriksson, R. G. Beck, M. Topinka, J. A. Katine, R. M. Westervelt, K. L. Campman, and A. C. Gossard. *Cryogenic Scanning Probe Characterization of Semiconductor Nanostructures*[J]. Applied Physics Letters, 1996, 69(5):671–673.
- [46] M. A. Topinka, B. J. LeRoy, S. E. J. Shaw, E. J. Heller, R. M. Westervelt, K. D. Maranowski, and A. C. Gossard. *Imaging Coherent Electron Flow from a Quantum Point Contact*[J]. Science, 2000, 289(5488):2323.
- [47] A. Iagallo, N. Paradiso, S. Roddaro, C. Reichl, W. Wegscheider, G. Biasiol, L. Sorba, F. Beltram, and S. Heun. *Scanning Gate Imaging of Quantum Point Contacts and the Origin of the 0.7 Anomaly*[J]. Nano Research, 2015, 8(3):948–956.
- [48] B. J. LeRoy, A. C. Bleszynski, K. E. Aidala, R. M. Westervelt, A. Kalben, E. J. Heller, S. E. J. Shaw, K. D. Maranowski, and A. C. Gossard. *Imaging Electron Interferometer*[J]. Physical Review Letters, 2005, 94(12):126801.
- [49] B. Hackens, F. Martins, T. Ouisse, H. Sellier, S. Bollaert, X. Wallart, A. Cappy, J. Chevrier, V. Bayot, and S. Huant. *Imaging and Controlling Electron Transport inside a Quantum Ring*[J]. Nature Physics, 2006, 2(12):826–830.

- [50] C. R. da Cunha, N. Aoki, T. Morimoto, Y. Ochiai, R. Akis, and D. K. Ferry. *Imaging of Quantum Interference Patterns within a Quantum Point Contact*[J]. Applied Physics Letters, 2006, 89(24):242109.
- [51] F. Martins, B. Hackens, M. G. Pala, T. Ouisse, H. Sellier, X. Wallart, S. Bollaert, A. Cappy, J. Chevrier, V. Bayot, and S. Huant. *Imaging Electron Wave Functions Inside Open Quantum Rings*[J]. Physical Review Letters, 2007, 99(13):136807.
- [52] M. P. Jura, M. A. Topinka, M. Grobis, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and D. Goldhaber-Gordon. *Electron Interferometer Formed with a Scanning Probe Tip and Quantum Point Contact*[J]. Physical Review B, 2009, 80(4):041303.
- [53] M. P. Jura, M. Grobis, M. A. Topinka, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and D. Goldhaber-Gordon. *Spatially Probed Electron-Electron Scattering in a Two-Dimensional Electron Gas*[J]. Physical Review B, 2010, 82(15):155328.
- [54] R. Crook, C. G. Smith, C. H. W. Barnes, M. Y. Simmons, and D. A. Ritchie. *Imaging Diffraction-Limited Electronic Collimation from a Non-Equilibrium One-Dimensional Ballistic Constriction*[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2000, 12(8):L167.
- [55] B. Brun, F. Martins, S. Faniel, B. Hackens, G. Bachelier, A. Cavanna, C. Ulysse, A. Ouerghi, U. Gennser, D. Mailly, S. Huant, V. Bayot, M. Sanquer, and H. Sellier. *Wigner and Kondo Physics in Quantum Point Contacts Revealed by Scanning Gate Microscopy*[J]. Nature Communications, 2014, 5(1):4290.
- [56] B. Brun, F. Martins, S. Faniel, B. Hackens, A. Cavanna, C. Ulysse, A. Ouerghi, U. Gennser, D. Mailly, P. Simon, S. Huant, V. Bayot, M. Sanquer, and H. Sellier. *Electron Phase Shift at the Zero-Bias Anomaly of Quantum Point Contacts*[J]. Physical Review Letters, 2016, 116(13):136801.
- [57] B. Brun, F. Martins, S. Faniel, A. Cavanna, C. Ulysse, A. Ouerghi, U. Gennser, D. Mailly, P. Simon, S. Huant, M. Sanquer, H. Sellier, V. Bayot, and B. Hackens. *Thermoelectric Scanning-Gate Interferometry on a Quantum Point Contact*[J]. Physical Review Applied, 2019, 11(3):034069.
- [58] M. T. Woodside, C. Vale, P. L. McEuen, C. Kadow, K. D. Maranowski, and A. C. Gossard. *Imaging Interedge-State Scattering Centers in the Quantum Hall Regime*[J]. Physical Review B, 2001, 64(4):041310.
- [59] N. Aoki, C. R. da Cunha, R. Akis, D. K. Ferry, and Y. Ochiai. *Imaging of Integer Quantum Hall Edge State in a Quantum Point Contact via Scanning Gate Microscopy*[J]. Physical Review B, 2005, 72(15):155327.
- [60] A. Baumgartner, T. Ihn, K. Ensslin, K. Maranowski, and A. C. Gossard. *Quantum Hall Effect Transition in Scanning Gate Experiments*[J]. Physical Review B, 2007, 76(8):085316.
- [61] N. Paradiso, S. Heun, S. Roddaro, D. Venturelli, F. Taddei, V. Giovannetti, R. Fazio, G. Biasiol, L. Sorba, and F. Beltram. *Spatially Resolved Analysis of Edge-Channel Equilibration in Quantum Hall Circuits*[J]. Physical Review B, 2011, 83(15):155305.
- [62] N. Paradiso, S. Heun, S. Roddaro, L. Sorba, F. Beltram, G. Biasiol, L. N. Pfeiffer, and K. W. West. *Imaging Fractional Incompressible Stripes in Integer Quantum Hall Systems*[J]. Physical Review Letters, 2012, 108(24):246801.
- [63] N. Pascher, F. Timpu, C. Rössler, T. Ihn, K. Ensslin, C. Reichl, and W. Wegscheider. *Resonant Electron Tunneling in a Tip-Controlled Potential Landscape*[J]. Physical Review B, 2014, 89(24):245408.

- [64] N. Pascher, C. Rössler, T. Ihn, K. Ensslin, C. Reichl, and W. Wegscheider. *Imaging the Conductance of Integer and Fractional Quantum Hall Edge States*[J]. Physical Review X, 2014, 4(1):011014.
- [65] T. Tomimatsu, K. Hashimoto, S. Taninaka, S. Nomura, and Y. Hirayama. *Probing the Breakdown of Topological Protection: Filling-factor-dependent Evolution of Robust Quantum Hall Incompressible Phases*[J]. Physical Review Research, 2020, 2(1):013128.
- [66] P. Fallahi, A. C. Bleszynski, R. M. Westervelt, J. Huang, J. D. Walls, E. J. Heller, M. Hanson, and A. C. Gossard. *Imaging a Single-Electron Quantum Dot*[J]. Nano Letters, 2005, 5(2):223–226.
- [67] B. Hackens, F. Martins, S. Faniel, C. A. Dutu, H. Sellier, S. Huant, M. Pala, L. Desplanque, X. Wallart, and V. Bayot. *Imaging Coulomb Islands in a Quantum Hall Interferometer*[J]. Nature Communications, 2010, 1(1):39.
- [68] F. Martins, S. Faniel, B. Rosenow, M. G. Pala, H. Sellier, S. Huant, L. Desplanque, X. Wallart, V. Bayot, and B. Hackens. *Scanning Gate Spectroscopy of Transport across a Quantum Hall Nano-Island*[J]. New Journal of Physics, 2013, 15(1):013049.
- [69] F. Martins, S. Faniel, B. Rosenow, H. Sellier, S. Huant, M. G. Pala, L. Desplanque, X. Wallart, V. Bayot, and B. Hackens. *Coherent Tunnelling across a Quantum Point Contact in the Quantum Hall Regime*[J]. Scientific Reports, 2013, 3(1):1416.
- [70] N. Aoki, C. R. Da Cunha, R. Akis, D. K. Ferry, and Y. Ochiai. *Scanning Gate Microscopy Investigations on an InGaAs Quantum Point Contact*[J]. Applied Physics Letters, 2005, 87(22):223501.
- [71] M. P. Jura, M. A. Topinka, L. Urban, A. Yazdani, H. Shtrikman, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and D. Goldhaber-Gordon. *Unexpected Features of Branched Flow through High-Mobility Two-Dimensional Electron Gases*[J]. Nature Physics, 2007, 3(12):841–845.
- [72] A. Pioda, S. Kičin, D. Brunner, T. Ihn, M. Sigrist, K. Ensslin, M. Reinwald, and W. Wegscheider. *Discrete Charging of Traps Visualized by Scanning Gate Experiments on a Quantum Point Contact*[J]. Physical Review B, 2007, 75(4):045433.
- [73] J. Berezovsky, M. F. Borunda, E. J. Heller, and R. M. Westervelt. *Imaging Coherent Transport in Graphene (Part I): Mapping Universal Conductance Fluctuations*[J]. Nanotechnology, 2010, 21(27):274013.
- [74] S. Bhandari, G.-H. Lee, A. Klales, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Heller, P. Kim, and R. M. Westervelt. *Imaging Cyclotron Orbits of Electrons in Graphene*[J]. Nano Letters, 2016, 16(3):1690.
- [75] S. Bhandari, G. H. Lee, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Kim, and R. M. Westervelt. *Imaging Electron Flow from Collimating Contacts in Graphene*[J]. 2D Materials, 2018, 5(2):021003.
- [76] S. Bhandari, G.-H. Lee, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Kim, and R. M. Westervelt. *Imaging Andreev Reflection in Graphene*[J]. Nano Letters, 2020, 20(7):4890–4894.
- [77] A. G. F. Garcia, M. König, D. Goldhaber-Gordon, and K. Todd. *Scanning Gate Microscopy of Localized States in Wide Graphene Constrictions*[J]. Physical Review B, 2013, 87(8):085446.

- [78] M. König, M. Baenninger, A. G. F. Garcia, N. Harjee, B. L. Pruitt, C. Ames, P. Leubner, C. Brüne, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, and D. Goldhaber-Gordon. *Spatially Resolved Study of Backscattering in the Quantum Spin Hall State*[J]. Physical Review X, 2013, 3(2):021003.
- [79] M. R. Connolly, K. L. Chiou, C. G. Smith, D. Anderson, G. a. C. Jones, A. Lombardo, A. Fasoli, and A. C. Ferrari. *Scanning Gate Microscopy of Current-Annealed Single Layer Graphene*[J]. Applied Physics Letters, 2010, 96(11):113501.
- [80] Z. Dou, S. Morikawa, A. Cresti, S.-W. Wang, C. G. Smith, C. Melios, O. Kazakova, K. Watanabe, T. Taniguchi, S. Masubuchi, T. Machida, and M. R. Connolly. *Imaging Bulk and Edge Transport near the Dirac Point in Graphene Moiré Superlattices*[J]. Nano Letters, 2018, 18(4):2530–2537.
- [81] S. Morikawa, Z. Dou, S.-W. Wang, C. G. Smith, K. Watanabe, T. Taniguchi, S. Masubuchi, T. Machida, and M. R. Connolly. *Imaging Ballistic Carrier Trajectories in Graphene Using Scanning Gate Microscopy*[J]. Applied Physics Letters, 2015, 107(24):243102.
- [82] S. Schnez, J. Güttinger, M. Huefner, C. Stampfer, K. Ensslin, and T. Ihn. *Imaging Localized States in Graphene Nanostructures*[J]. Physical Review B, 2010, 82(16):165445.
- [83] L. Bours, S. Guiducci, A. Mreńica-Kolasińska, B. Szafran, J. C. Maan, and S. Heun. *Manipulating Quantum Hall Edge Channels in Graphene through Scanning Gate Microscopy*[J]. Physical Review B, 2017, 96(19):195423.
- [84] C. Gold, A. Kurzmann, K. Watanabe, T. Taniguchi, K. Ensslin, and T. Ihn. *Scanning Gate Microscopy of Localized States in a Gate-Defined Bilayer Graphene Channel*[J]. Physical Review Research, 2020, 2(4):043380.
- [85] C. Gold, A. Knothe, A. Kurzmann, A. Garcia-Ruiz, K. Watanabe, T. Taniguchi, V. Fal'ko, K. Ensslin, and T. Ihn. *Coherent Jetting from a Gate-Defined Channel in Bilayer Graphene*[J]. Physical Review Letters, 2021, 127(4):046801.
- [86] C. Chuang, M. Matsunaga, F.-H. Liu, T.-P. Woo, N. Aoki, L.-H. Lin, B.-Y. Wu, Y. Ochiai, and C.-T. Liang. *Probing Weak Localization in Chemical Vapor Deposition Graphene Wide Constriction Using Scanning Gate Microscopy*[J]. Nanotechnology, 2016, 27(7):075601.
- [87] D. Cabosart, S. Faniel, F. Martins, B. Brun, A. Felten, V. Bayot, and B. Hackens. *Imaging Coherent Transport in a Mesoscopic Graphene Ring*[J]. Physical Review B, 2014, 90(20):205433.
- [88] B. Brun, N. Moreau, S. Somanchi, V.-H. Nguyen, K. Watanabe, T. Taniguchi, J.-C. Charlier, C. Stampfer, and B. Hackens. *Imaging Dirac Fermions Flow through a Circular Veselago Lens*[J]. Physical Review B, 2019, 100(4):041401(R).
- [89] B. Liu and E. J. Heller. *Stability of Branched Flow from a Quantum Point Contact*[J]. Physical Review Letters, 2013, 111(23):236804.
- [90] E. Heller. *Warning from the Deep*[J]. Nature Physics, 2016, 12(9):824–825.
- [91] M. G. Pala, B. Hackens, F. Martins, H. Sellier, V. Bayot, S. Huant, and T. Ouisse. *Local Density of States in Mesoscopic Samples from Scanning Gate Microscopy*[J]. Physical Review B, 2008, 77(12):125310.
- [92] M. G. Pala, S. Baltazar, F. Martins, B. Hackens, H. Sellier, T. Ouisse, V. Bayot, and S. Huant. *Scanning Gate Microscopy of Quantum Rings: Effects of an External Magnetic Field and of Charged Defects*[J]. Nanotechnology, 2009, 20(26):264021.

- [93] M. G. Pala, S. Baltazar, P. Liu, H. Sellier, B. Hackens, F. Martins, V. Bayot, X. Wallart, L. Desplante, and S. Huant. *Transport Inefficiency in Branched-Out Mesoscopic Networks: An Analog of the Braess Paradox*[J]. Physical Review Letters, 2012, 108(7):076802.
- [94] A. Freyn, I. Kleftogiannis, and J.-L. Pichard. *Scanning Gate Microscopy of a Nanostructure Where Electrons Interact*[J]. Physical Review Letters, 2008, 100(22):226802.
- [95] A. Abbout, G. Lemarié, and J.-L. Pichard. *Thermal Enhancement of Interference Effects in Quantum Point Contacts*[J]. Physical Review Letters, 2011, 106(15):156810.
- [96] A. Kleshchonok, G. Fleury, J.-L. Pichard, and G. Lemarié. *Scanning Gate Microscopy of Quantum Contacts under Parallel Magnetic Field: Beating Patterns between Spin-Split Transmission Peaks or Channel Openings*[J]. Physical Review B, 2015, 91(12):125416.
- [97] B. Szafran. *Scanning Gate Microscopy Simulations for Quantum Rings: Effective Potential of the Tip and Conductance Maps*[J]. Physical Review B, 2011, 84(7):075336.
- [98] T. Chwiej and B. Szafran. *Schrödinger-Poisson Calculations for Scanning Gate Microscopy of Quantum Rings Based on Etched Two-Dimensional Electron Gas*[J]. Physical Review B, 2013, 87(8):085302.
- [99] E. Wach, D. P. Żebrowski, and B. Szafran. *Charge Density Mapping of Strongly-Correlated Few-Electron Two-Dimensional Quantum Dots by the Scanning Probe Technique*[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2013, 25(33):335801.
- [100] K. Kolasiński and B. Szafran. *Wave-Function Description of Conductance Mapping for a Quantum Hall Electron Interferometer*[J]. Physical Review B, 2014, 89(16):165306.
- [101] K. Kolasiński, B. Szafran, and M. P. Nowak. *Imaging of Double Slit Interference by Scanning Gate Microscopy*[J]. Physical Review B, 2014, 90(16):165303.
- [102] K. Kolasiński, B. Szafran, B. Brun, and H. Sellier. *Interference Features in Scanning Gate Conductance Maps of Quantum Point Contacts with Disorder*[J]. Physical Review B, 2016, 94(7):075301.
- [103] R. A. Jalabert, W. Szewc, S. Tomsovic, and D. Weinmann. *What Is Measured in the Scanning Gate Microscopy of a Quantum Point Contact?*[J]. Physical Review Letters, 2010, 105(16):166802.
- [104] C. Gorini, R. A. Jalabert, W. Szewc, S. Tomsovic, and D. Weinmann. *Theory of Scanning Gate Microscopy*[J]. Physical Review B, 2013, 88(3):035406.
- [105] C. Gorini, D. Weinmann, and R. A. Jalabert. *Scanning-Gate-Induced Effects in Nonlinear Transport through Nanostructures*[J]. Physical Review B, 2014, 89(11):115414.
- [106] C. Pörtl, A. Kozikov, K. Ensslin, T. Ihn, R. A. Jalabert, C. Reichl, W. Wegscheider, and D. Weinmann. *Classical Origin of Conductance Oscillations in an Integrable Cavity*[J]. Physical Review B, 2016, 94(19):195304.
- [107] A. Mreńca-Kolasińska, S. Heun, and B. Szafran. *Aharonov-Bohm Interferometer Based on n-p Junctions in Graphene Nanoribbons*[J]. Physical Review B, 2016, 93(12):125411.
- [108] K. Kolasiński, A. Mreńca-Kolasińska, and B. Szafran. *Imaging Snake Orbits at Graphene n-p Junctions*[J]. Physical Review B, 2017, 95(4):045304.

- [109] X. Chen, G. Weick, D. Weinmann, and R. A. Jalabert. *Scanning Gate Microscopy in Graphene Nanostructures*[J]. Physical Review B, 2023, 107(8):085420.
- [110] R. Landauer. *Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction*[J]. IBM Journal of Research and Development, 1988, 32(3):306–316.
- [111] M. Büttiker. *Four-Terminal Phase-Coherent Conductance*[J]. Physical Review Letters, 1986, 57(14):1761–1764.
- [112] Y. Imry. *Physics of Mesoscopic Systems*[C]. Proceedings of Directions in Condensed Matter Physics. World Scientific, August, 1986: 101–163.
- [113] P. W. Anderson. *Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*[J]. Physical Review, 1958, 109(5):1492–1505.
- [114] S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi. *Electronic Transport in Two-Dimensional Graphene*[J]. Reviews of Modern Physics, 2011, 83(2):407–470.
- [115] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan. *Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions*[J]. Physical Review Letters, 1979, 42(10):673–676.
- [116] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan. *Disordered Electronic Systems*[J]. Reviews of Modern Physics, 1985, 57(2):287–337.
- [117] X. Du, I. Skachko, A. Barker, and E. Y. Andrei. *Approaching Ballistic Transport in Suspended Graphene*[J]. Nature Nanotechnology, 2008, 3(8):491–495.
- [118] J. R. Barker. *Hot Electron Phenomena and Electroluminescence*[J]. Journal of Luminescence, 1981, 23(1):101–126.
- [119] R. Akis, J. P. Bird, and D. K. Ferry. *The Persistence of Eigenstates in Open Quantum Dots*[J]. Applied Physics Letters, 2002, 81(1):129–131.
- [120] R. A. Jalabert, H. U. Baranger, and A. D. Stone. *Conductance Fluctuations in the Ballistic Regime: A Probe of Quantum Chaos?*[J]. Physical Review Letters, 1990, 65(19):2442–2445.
- [121] R. Akis, D. K. Ferry, and J. P. Bird. *Magnetotransport Fluctuations in Regular Semiconductor Ballistic Quantum Dots*[J]. Physical Review B, 1996, 54(24):17705–17715.
- [122] R. Akis, D. K. Ferry, and J. P. Bird. *Wave Function Scarring Effects in Open Stadium Shaped Quantum Dots*[J]. Physical Review Letters, 1997, 79(1):123–126.
- [123] J. P. Bird, R. Akis, D. K. Ferry, D. Vasileska, J. Cooper, Y. Aoyagi, and T. Sugano. *Lead-Orientation-Dependent Wave Function Scarring in Open Quantum Dots*[J]. Physical Review Letters, 1999, 82(23):4691–4694.
- [124] J. P. Bird, R. Akis, and D. K. Ferry. *Magnetoprobing of the Discrete Level Spectrum of Open Quantum Dots*[J]. Physical Review B, 1999, 60(19):13676–13681.
- [125] I. V. Zozoulenko, R. Schuster, K. F. Berggren, and K. Ensslin. *Ballistic Electrons in an Open Square Geometry: Selective Probing of Resonant-Energy States*[J]. Physical Review B, 1997, 55(16):R10209–R10212.

- [126] I. V. Zozoulenko, A. S. Sachrajda, C. Gould, K.-F. Berggren, P. Zawadzki, Y. Feng, and Z. Wasilewski. *Few-Electron Open Dots: Single Level Transport*[J]. Physical Review Letters, 1999, 83(9):1838–1841.
- [127] W. H. Zurek. *Decoherence, Einselection, and the Quantum Origins of the Classical*[J]. Reviews of Modern Physics, 2003, 75(3):715–775.
- [128] D. K. Ferry, R. Akis, and R. Brunner. *Probing the Quantum–Classical Connection with Open Quantum Dots*[J]. Physica Scripta, 2015, 2015(T165):014010.
- [129] H.-J. Stöckmann. *Quantum Chaos: An Introduction*[M]. New York: Cambridge University Press, October, 1999.
- [130] F. Haake. *Quantum Signatures of Chaos*[M], volume 54 of *Springer Series in Synergetics*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2010.
- [131] G. Casati and B. Chirikov, (eds.). *Quantum Chaos: Between Order and Disorder*[M]. New York: Cambridge University Press, November, 2006.
- [132] M. C. Gutzwiller. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*[M], volume 1 of *Interdisciplinary Applied Mathematics*. New York: Springer, 1990.
- [133] M. V. Berry. *Semiclassical Theory of Spectral Rigidity*[J]. Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences, 1985, 400(1819):229–251.
- [134] O. Bohigas, M. J. Giannoni, and C. Schmit. *Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation Laws*[J]. Physical Review Letters, 1984, 52(1):1–4.
- [135] H. A. Weidenmüller and G. E. Mitchell. *Random Matrices and Chaos in Nuclear Physics: Nuclear Structure*[J]. Reviews of Modern Physics, 2009, 81(2):539–589.
- [136] C. W. J. Beenakker. *Colloquium: Andreev Reflection and Klein Tunneling in Graphene*[J]. Reviews of Modern Physics, 2008, 80(4):1337–1354.
- [137] A. R. Akhmerov and C. W. J. Beenakker. *Boundary Conditions for Dirac Fermions on a Terminated Honeycomb Lattice*[J]. Physical Review B, 2008, 77(8):085423.
- [138] D. Xiao, W. Yao, and Q. Niu. *Valley-Contrasting Physics in Graphene: Magnetic Moment and Topological Transport*[J]. Physical Review Letters, 2007, 99(23):236809.
- [139] J. L. Garcia-Pomar, A. Cortijo, and M. Nieto-Vesperinas. *Fully Valley-Polarized Electron Beams in Graphene*[J]. Physical Review Letters, 2008, 100(23):236801.
- [140] F. Miao, S. Wijeratne, Y. Zhang, U. C. Coskun, W. Bao, and C. N. Lau. *Phase-Coherent Transport in Graphene Quantum Billiards*[J]. Science, 2007, 317(5844):1530–1533.
- [141] L. A. Ponomarenko, F. Schedin, M. I. Katsnelson, R. Yang, E. W. Hill, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. *Chaotic Dirac Billiard in Graphene Quantum Dots*[J]. Science, 2008, 320(5874):356–358.
- [142] C. Stampfer, E. Schurtenberger, F. Molitor, J. Güttinger, T. Ihn, and K. Ensslin. *Tunable Graphene Single Electron Transistor*[J]. Nano Letters, 2008, 8(8):2378–2383.
- [143] M. V. Berry, M. Tabor, and J. M. Ziman. *Level Clustering in the Regular Spectrum*[J]. Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences, 1977, 356(1686):375–394.

- [144] M. L. Mehta. *Random Matrices*[M]. 3rd edition ed., London: Academic Press, November, 2004.
- [145] J. Hubbard and B. H. Flowers. *Electron Correlations in Narrow Energy Bands*[J]. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, 1963, 276(1365):238–257.
- [146] G. Montambaux, D. Poilblanc, J. Bellissard, and C. Sire. *Quantum Chaos in Spin-Fermion Models*[J]. Physical Review Letters, 1993, 70(4):497–500.
- [147] T. C. Hsu and J. C. Angles d'Auriac. *Level Repulsion in Integrable and Almost-Integrable Quantum Spin Models*[J]. Physical Review B, 1993, 47(21):14291–14296.
- [148] M. Faas, B. D. Simons, X. Zotos, and B. L. Altshuler. *Universality in the Spectra of Strongly Correlated Systems*[J]. Physical Review B, 1993, 48(8):5439–5443.
- [149] H. Bruus and J.-C. A. d'Auriac. *The Spectrum of the Two-Dimensional Hubbard Model at Low Filling*[J]. Europhysics Letters, 1996, 35(5):321.
- [150] H. Bruus and J.-C. Angles d'Auriac. *Energy Level Statistics of the Two-Dimensional Hubbard Model at Low Filling*[J]. Physical Review B, 1997, 55(14):9142–9159.
- [151] A. R. Kolovsky and A. Buchleitner. *Floquet-Bloch Operator for the Bose-Hubbard Model with Static Field*[J]. Physical Review E, 2003, 68(5):056213.
- [152] A. R. Kolovsky and A. Buchleitner. *Quantum Chaos in the Bose-Hubbard Model*[J]. Europhysics Letters, 2004, 68(5):632.
- [153] A. R. Kolovsky. *Semiclassical Quantization of the Bogoliubov Spectrum*[J]. Physical Review Letters, 2007, 99(2):020401.
- [154] C. Kollath, G. Roux, G. Biroli, and A. M. Läuchli. *Statistical Properties of the Spectrum of the Extended Bose–Hubbard Model*[J]. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2010, 2010(08):P08011.
- [155] D. Fischer, D. Hoffmann, and S. Wimberger. *Spectral Analysis of Two-Dimensional Bose-Hubbard Models*[J]. Physical Review A, 2016, 93(4):043620.
- [156] C. Zhang, J. Liu, M. G. Raizen, and Q. Niu. *Quantum Chaos of Bogoliubov Waves for a Bose-Einstein Condensate in Stadium Billiards*[J]. Physical Review Letters, 2004, 93(7):074101.
- [157] O. V. Yazyev. *Emergence of Magnetism in Graphene Materials and Nanostructures*[J]. Reports on Progress in Physics, 2010, 73(5):056501.
- [158] M. S. Dresselhaus. *Fifty Years in Studying Carbon-Based Materials*[J]. Physica Scripta, 2012, T146:014002.
- [159] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim. *Experimental Observation of the Quantum Hall Effect and Berry's Phase in Graphene*[J]. Nature, 2005, 438(7065):201–204.
- [160] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. *The Electronic Properties of Graphene*[J]. Reviews of Modern Physics, 2009, 81(1):109–162.
- [161] M. A. H. Vozmediano and F. Guinea. *Effect of Coulomb Interactions on the Physical Observables of Graphene*[J]. Physica Scripta, 2012, 2012(T146):014015.

- [162] A. H. MacDonald, J. Jung, and F. Zhang. *Pseudospin Order in Monolayer, Bilayer and Double-Layer Graphene*[J]. *Physica Scripta*, 2012, T146:014012.
- [163] M. I. Katsnelson. *The Physics of Graphene*[M]. 2nd edition ed., New York: Cambridge University Press, April, 2020.
- [164] H. Aoki and M. S. Dresselhaus, (eds.). *Physics of Graphene*[M]. 2014th edition ed., London: Springer, December, 2013.
- [165] A. D. Güçlü, P. Potasz, M. Korkusinski, and P. Hawrylak. *Graphene Quantum Dots*[M]. NanoScience and Technology, Berlin, Heidelberg: Springer, 2014.
- [166] L. E. F. F. Torres, S. Roche, and J.-C. Charlier. *Introduction to graphene-based nanomaterials: From electronic structure to quantum transport*[M]. New York: Cambridge University Press, January, 2020.
- [167] J. Wurm, M. Wimmer, İ. Adagideli, K. Richter, and H. U. Baranger. *Interfaces within Graphene Nanoribbons*[J]. *New Journal of Physics*, 2009, 11(9):095022.
- [168] A. Bergvall. *Quantum Transport Theory in Graphene*[D]. Chalmers University of Technology, 2014.
- [169] L. Ying, L. Huang, Y.-C. Lai, and C. Grebogi. *Conductance Fluctuations in Graphene Systems: The Relevance of Classical Dynamics*[J]. *Physical Review B*, 2012, 85(24):245448.
- [170] M. V. Berry and R. J. Mondragon. *Neutrino Billiards: Time-reversal Symmetry-Breaking without Magnetic Fields*[J]. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 1987, 412(1842):53–74.
- [171] D. Loss and D. P. DiVincenzo. *Quantum Computation with Quantum Dots*[J]. *Physical Review A*, 1998, 57(1):120–126.
- [172] J. M. Elzerman, R. Hanson, L. H. Willems van Beveren, B. Witkamp, L. M. K. Vandersypen, and L. P. Kouwenhoven. *Single-Shot Read-out of an Individual Electron Spin in a Quantum Dot*[J]. *Nature*, 2004, 430(6998):431–435.
- [173] R. Hanson, L. H. W. van Beveren, I. T. Vink, J. M. Elzerman, W. J. M. Naber, F. H. L. Koppens, L. P. Kouwenhoven, and L. M. K. Vandersypen. *Single-Shot Readout of Electron Spin States in a Quantum Dot Using Spin-Dependent Tunnel Rates*[J]. *Physical Review Letters*, 2005, 94(19):196802.
- [174] F. H. L. Koppens, C. Buizert, K. J. Tielrooij, I. T. Vink, K. C. Nowack, T. Meunier, L. P. Kouwenhoven, and L. M. K. Vandersypen. *Driven Coherent Oscillations of a Single Electron Spin in a Quantum Dot*[J]. *Nature*, 2006, 442(7104):766–771.
- [175] J. R. Petta, A. C. Johnson, J. M. Taylor, E. A. Laird, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard. *Coherent Manipulation of Coupled Electron Spins in Semiconductor Quantum Dots*[J]. *Science*, 2005, 309(5744):2180–2184.
- [176] B. Trauzettel, D. V. Bulaev, D. Loss, and G. Burkard. *Spin Qubits in Graphene Quantum Dots*[J]. *Nature Physics*, 2007, 3(3):192–196.
- [177] J. Lee, D. Wong, J. Velasco Jr, J. F. Rodriguez-Nieva, S. Kahn, H.-Z. Tsai, T. Taniguchi, K. Watanabe, A. Zettl, F. Wang, L. S. Levitov, and M. F. Crommie. *Imaging Electrostatically Confined Dirac Fermions in Graphene Quantum Dots*[J]. *Nature Physics*, 2016, 12(11):1032–1036.

- [178] C. Gutiérrez, L. Brown, C.-J. Kim, J. Park, and A. N. Pasupathy. *Klein Tunnelling and Electron Trapping in Nanometre-Scale Graphene Quantum Dots*[J]. Nature Physics, 2016, 12(11):1069–1075.
- [179] P. G. Silvestrov and K. B. Efetov. *Quantum Dots in Graphene*[J]. Physical Review Letters, 2007, 98(1):016802.
- [180] K.-K. Bai, J.-J. Zhou, Y.-C. Wei, J.-B. Qiao, Y.-W. Liu, H.-W. Liu, H. Jiang, and L. He. *Generating Atomically Sharp p-n Junctions in Graphene and Testing Quantum Electron Optics on the Nanoscale*[J]. Physical Review B, 2018, 97(4):045413.
- [181] Y. Jiang, J. Mao, D. Moldovan, M. R. Masir, G. Li, K. Watanabe, T. Taniguchi, F. M. Peeters, and E. Y. Andrei. *Tuning a Circular p–n Junction in Graphene from Quantum Confinement to Optical Guiding*[J]. Nature Nanotechnology, 2017, 12(11):1045–1049.
- [182] F. Ghahari, D. Walkup, C. Gutiérrez, J. F. Rodriguez-Nieva, Y. Zhao, J. Wyrick, F. D. Natterer, W. G. Cullen, K. Watanabe, T. Taniguchi, L. S. Levitov, N. B. Zhiteney, and J. A. Stroscio. *An on/off Berry Phase Switch in Circular Graphene Resonators*[J]. Science, 2017, 356(6340):845–849.
- [183] Y.-W. Liu, Z. Hou, S.-Y. Li, Q.-F. Sun, and L. He. *Movable Valley Switch Driven by Berry Phase in Bilayer-Graphene Resonators*[J]. Physical Review Letters, 2020, 124(16):166801.
- [184] Z.-Q. Fu, K.-K. Bai, Y.-N. Ren, J.-J. Zhou, and L. He. *Coulomb Interaction in Quasibound States of Graphene Quantum Dots*[J]. Physical Review B, 2020, 101(23):235310.
- [185] R. Yang, L. Huang, Y.-C. Lai, and C. Grebogi. *Quantum Chaotic Scattering in Graphene Systems*[J]. Europhysics Letters, 2011, 94(4):40004.
- [186] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, and X. Waintal. *Kwant: A Software Package for Quantum Transport*[J]. New Journal of Physics, 2014, 16(6):063065.
- [187] F. Muñoz-Rojas, D. Jacob, J. Fernández-Rossier, and J. J. Palacios. *Coherent Transport in Graphene Nanoconstrictions*[J]. Physical Review B, 2006, 74(19):195417.
- [188] T. C. Li and S.-P. Lu. *Quantum Conductance of Graphene Nanoribbons with Edge Defects*[J]. Physical Review B, 2008, 77(8):085408.
- [189] P. R. Wallace. *The Band Theory of Graphite*[J]. Physical Review, 1947, 71(9):622–634.
- [190] S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen, and P. Ordejón. *Tight-Binding Description of Graphene*[J]. Physical Review B, 2002, 66(3):035412.
- [191] A. Kretinin, G. L. Yu, R. Jalil, Y. Cao, F. Withers, A. Mishchenko, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, A. K. Geim, and F. Guinea. *Quantum Capacitance Measurements of Electron-Hole Asymmetry and next-Nearest-Neighbor Hopping in Graphene*[J]. Physical Review B, 2013, 88(16):165427.
- [192] L. Huang, Y.-C. Lai, D. K. Ferry, R. Akis, and S. M. Goodnick. *Transmission and Scarring in Graphene Quantum Dots*[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2009, 21(34):344203.
- [193] M. P. L. Sancho, J. M. L. Sancho, J. M. L. Sancho, and J. Rubio. *Highly Convergent Schemes for the Calculation of Bulk and Surface Green Functions*[J]. Journal of Physics F: Metal Physics, 1985, 15(4):851.

- [194] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*[M]. New York: Cambridge University Press, May, 1997.
- [195] Dean Moldovan, Miša Andelković, and Francois Peeters. *Pybinding v0.9.5: A Python Package for Tight-Binding Calculations*[Z], 2020.
- [196] N. M. R. Peres. *Colloquium: The Transport Properties of Graphene: An Introduction*[J]. Reviews of Modern Physics, 2010, 82(3):2673–2700.
- [197] H. Sellier, B. Hackens, M. G. Pala, F. Martins, S. Baltazar, X. Wallart, L. Desplanque, V. Bayot, and S. Huant. *On the Imaging of Electron Transport in Semiconductor Quantum Structures by Scanning-Gate Microscopy: Successes and Limitations*[J]. Semiconductor Science and Technology, 2011, 26:064008.
- [198] N. Pascher, D. Bischoff, T. Ihn, and K. Ensslin. *Scanning Gate Microscopy on a Graphene Nanoribbon*[J]. Applied Physics Letters, 2012, 101(6):063101.
- [199] R. Jalilian, L. A. Jauregui, G. Lopez, J. Tian, C. Roecker, M. M. Yazdanpanah, R. W. Cohn, I. Jovanovic, and Y. P. Chen. *Scanning Gate Microscopy on Graphene: Charge Inhomogeneity and Extrinsic Doping*[J]. Nanotechnology, 2011, 22(29):295705.
- [200] D. Cabosart, A. Felten, N. Reckinger, A. Iordanescu, S. Toussaint, S. Faniel, and B. Hackens. *Recurrent Quantum Scars in a Mesoscopic Graphene Ring*[J]. Nano Letters, 2017, 17(3):1344.
- [201] S. Neubeck, L. A. Ponomarenko, A. S. Mayorov, S. V. Morozov, R. Yang, and K. S. Novoselov. *Scanning Gate Microscopy on a Graphene Quantum Point Contact*[J]. Physica E-low-dimensional Systems & Nanostructures, 2012, 44(6):1002.
- [202] M. Guerra. *Electron Optics in Ballistic Graphene Studied by Scanning Gate Microscopy*[D]. France: Université Grenoble Alpes, 2021.
- [203] N. Moreau, B. Brun, S. Somanchi, K. Watanabe, T. Taniguchi, C. Stampfer, and B. Hackens. *Upstream Modes and Antidots Poison Graphene Quantum Hall Effect*[J]. Nature Communications, 2021, 12:4265.
- [204] N. Moreau. *Scanning Gate Imaging and Tuning of Quantum Electronic Transport in Graphene*[D]. Université catholique de Louvain, 2022.
- [205] A. Mreńca, K. Kolasiński, and B. Szafran. *Conductance Response of Graphene Nanoribbons and Quantum Point Contacts in Scanning Gate Measurements*[J]. Semiconductor Science and Technology, 2015, 30(8):085003.
- [206] A. Mreńca-Kolasińska and B. Szafran. *Imaging Backscattering in Graphene Quantum Point Contacts*[J]. Physical Review B, 2017, 96(16):165310.
- [207] Y.-M. Lin, V. Perebeinos, Z. Chen, and P. Avouris. *Electrical Observation of Subband Formation in Graphene Nanoribbons*[J]. Physical Review B, 2008, 78(16):161409.
- [208] L. Jiao, L. Zhang, X. Wang, G. Diankov, and H. Dai. *Narrow Graphene Nanoribbons from Carbon Nanotubes*[J]. Nature, 2009, 458(7240):877–880.
- [209] C. Lian, K. Tahy, T. Fang, G. Li, H. Xing, and D. Jena. *Quantum Transport in Graphene Nanoribbons Patterned by Metal Masks*[J]. Applied Physics Letters, 2010, 96(6):103109.

- [210] J. Cai, P. Ruffieux, R. Jaafar, M. Bieri, T. Braun, S. Blankenburg, M. Muoth, A. P. Seitsonen, M. Saleh, X. Feng, K. Müllen, and R. Fasel. *Atomically Precise Bottom-up Fabrication of Graphene Nanoribbons*[J]. Nature, 2010, 466:470.
- [211] J. Baringhaus, M. Ruan, F. Edler, A. Tejeda, M. Sicot, A. Taleb-Ibrahimi, A.-P. Li, Z. Jiang, E. H. Conrad, C. Berger, C. Tegenkamp, and W. A. de Heer. *Exceptional Ballistic Transport in Epitaxial Graphene Nanoribbons*[J]. Nature, 2014, 506:349.
- [212] D. J. Rizzo, G. Veber, J. Jiang, R. McCurdy, T. Cao, C. Bronner, T. Chen, S. G. Louie, F. R. Fischer, and M. F. Crommie. *Inducing Metallicity in Graphene Nanoribbons via Zero-Mode Superlattices*[J]. Science, 2020, 369:1597.
- [213] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus. *Edge State in Graphene Ribbons: Nanometer Size Effect and Edge Shape Dependence*[J]. Physical Review B, 1996, 54(24):17954.
- [214] L. Brey and H. A. Fertig. *Electronic States of Graphene Nanoribbons Studied with the Dirac Equation*[J]. Physical Review B, 2006, 73(23):235411.
- [215] J. Wurm, A. Rycerz, İ. Adagideli, M. Wimmer, K. Richter, and H. U. Baranger. *Symmetry Classes in Graphene Quantum Dots: Universal Spectral Statistics, Weak Localization, and Conductance Fluctuations*[J]. Physical Review Letters, 2009, 102(5):056806.
- [216] M. Yamamoto, Y. Takane, and K. Wakabayashi. *Nearly Perfect Single-Channel Conduction in Disordered Armchair Nanoribbons*[J]. Physical Review B, 2009, 79(12):125421.
- [217] K. Wakabayashi, K. Sasaki, T. Nakanishi, and T. Enoki. *Electronic States of Graphene Nanoribbons and Analytical Solutions*[J]. Science and Technology of Advanced Materials, 2010, 11(5):054504.
- [218] J. Wurm, M. Wimmer, and K. Richter. *Symmetries and the Conductance of Graphene Nanoribbons with Long-Range Disorder*[J]. Physical Review B, 2012, 85(24):245418.
- [219] T. Cao, F. Zhao, and S. G. Louie. *Topological Phases in Graphene Nanoribbons: Junction States, Spin Centers, and Quantum Spin Chains*[J]. Physical Review Letters, 2017, 119(7):076401.
- [220] E. R. Mucciolo, A. H. Castro Neto, and C. H. Lewenkopf. *Conductance Quantization and Transport Gaps in Disordered Graphene Nanoribbons*[J]. Physical Review B, 2009, 79(7):075407.
- [221] S. Ihnatsenka and G. Kirczenow. *Conductance Quantization in Strongly Disordered Graphene Ribbons*[J]. Physical Review B, 2009, 80(20):201407.
- [222] A. Orlof, J. Ruseckas, and I. V. Zozoulenko. *Effect of Zigzag and Armchair Edges on the Electronic Transport in Single-Layer and Bilayer Graphene Nanoribbons with Defects*[J]. Physical Review B, 2013, 88(12):125409.
- [223] P. Ruffieux, S. Wang, B. Yang, C. Sánchez-Sánchez, J. Liu, T. Dienel, L. Talirz, P. Shinde, C. A. Pignedoli, D. Passerone, T. Dumslaff, X. Feng, K. Müllen, and R. Fasel. *On-Surface Synthesis of Graphene Nanoribbons with Zigzag Edge Topology*[J]. Nature, 2016, 531(7595):489.
- [224] M. Kolmer, A.-K. Steiner, I. Izquierdo, W. Ko, M. Engelund, M. Szymonski, A.-P. Li, and K. Amsharov. *Rational Synthesis of Atomically Precise Graphene Nanoribbons Directly on Metal Oxide Surfaces*[J]. Science, 2020, 369(6503):571.

- [225] H. Wang, H. S. Wang, C. Ma, L. Chen, C. Jiang, C. Chen, X. Xie, A.-P. Li, and X. Wang. *Graphene Nanoribbons for Quantum Electronics*[J]. Nature Reviews Physics, 2021, 3(12):791–802.
- [226] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon. *Quantized Conductance of Point Contacts in a Two-Dimensional Electron Gas*[J]. Physical Review Letters, 1988, 60(9):848.
- [227] D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, and G. A. C. Jones. *One-Dimensional Transport and the Quantisation of the Ballistic Resistance*[J]. Journal of Physics C: Solid State Physics, 1988, 21(8):L209.
- [228] N. Tombros, A. Veligura, J. Junesch, M. H. D. Guimarães, I. J. Vera-Marun, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees. *Quantized Conductance of a Suspended Graphene Nanoconstriction*[J]. Nature Physics, 2011, 7(9):697.
- [229] B. Terrés, L. A. Chizhova, F. Libisch, J. Peiro, D. Jörger, S. Engels, A. Girschik, K. Watanabe, T. Taniguchi, S. V. Rotkin, J. Burgdörfer, and C. Stampfer. *Size Quantization of Dirac Fermions in Graphene Constrictions*[J]. Nature Communications, 2016, 7(1):11528.
- [230] A. Kinikar, T. Phanindra Sai, S. Bhattacharyya, A. Agarwala, T. Biswas, S. K. Sarker, H. R. Krishnamurthy, M. Jain, V. B. Shenoy, and A. Ghosh. *Quantized Edge Modes in Atomic-Scale Point Contacts in Graphene*[J]. Nature Nanotechnology, 2017, 12(6):564.
- [231] P. Kun, B. Fülöp, G. Dobrik, P. Nemes-Incze, I. E. Lukács, S. Csonka, C. Hwang, and L. Tapasztó. *Robust Quantum Point Contact Operation of Narrow Graphene Constrictions Patterned by AFM Cleavage Lithography*[J]. NPJ 2D Mater. Appl., 2020, 4(1):43.
- [232] V. Clericò, J. A. Delgado-Notario, M. Saiz-Bretín, C. Hernández Fuentevilla, A. V. Malyshev, J. D. Lejarreta, E. Diez, and F. Domínguez-Adame. *Quantized Electron Transport through Graphene Nanoconstrictions*[J]. Physica Status Solidi A, 2018, 215(19):1701065.
- [233] L. I. Glazman, G. B. Lesovik, D. E. Khmel'Nitskiĭ, and R. I. Shekhter. *Reflectionless Quantum Transport and Fundamental Ballistic-Resistance Steps in Microscopic Constrictions*[J]. Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters, 1988, 48:238.
- [234] A. Szafer and A. D. Stone. *Theory of Quantum Conduction through a Constriction*[J]. Physical Review Letters, 1989, 62(3):300.
- [235] S. Ihnatsenka and G. Kirczenow. *Conductance Quantization in Graphene Nanoconstrictions with Mesoscopically Smooth but Atomically Stepped Boundaries*[J]. Physical Review B, 2012, 85(12):121407.
- [236] C. Yannouleas, I. Romanovsky, and U. Landman. *Interplay of Relativistic and Nonrelativistic Transport in Atomically Precise Segmented Graphene Nanoribbons*[J]. Scientific Reports, 2015, 5:7893.
- [237] M. H. D. Guimarães, O. Shevtsov, X. Waintal, and B. J. van Wees. *From Quantum Confinement to Quantum Hall Effect in Graphene Nanostructures*[J]. Physical Review B, 2012, 85(7):075424.

- [238] Y.-J. Xiong and B.-K. Xiong. *Resonant Transport through Graphene Nanoribbon Quantum Dots*[J]. Journal of Applied Physics, 2011, 109(10):103707.
- [239] H.-Y. Deng, K. Wakabayashi, and C.-H. Lam. *Formation Mechanism of Bound States in Graphene Point Contacts*[J]. Physical Review B, 2014, 89(4):045423.
- [240] R. A. Jalabert. *Mesoscopic Transport and Quantum Chaos*[J]. Scholarpedia, 2016, 11(1):30946.
- [241] B. Brun, N. Moreau, S. Somanchi, V.-H. Nguyen, A. Mreńca-Kolasińska, K. Watanabe, T. Taniguchi, J.-C. Charlier, C. Stampfer, and B. Hackens. *Optimizing Dirac Fermions Quasi-Confinement by Potential Smoothness Engineering*[J]. 2D Materials, 2020, 7(2):025037.
- [242] A. Mreńca-Kolasińska, K. Kolasiński, and B. Szafran. *Corrigendum: Conductance Response of Graphene Nanoribbons and Quantum Point Contacts in Scanning Gate Measurements (2015 Semicond. Sci. Technol. 30 085003)*[J]. Semiconductor Science and Technology, 2022, 37(4):049501.
- [243] C. A. Downing, D. A. Stone, and M. E. Portnoi. *Zero-Energy States in Graphene Quantum Dots and Rings*[J]. Physical Review B, 2011, 84(15):155437.
- [244] M. Schneider and P. W. Brouwer. *Density of States as a Probe of Electrostatic Confinement in Graphene*[J]. Physical Review B, 2014, 89(20):205437.
- [245] O. Ly, R. A. Jalabert, S. Tomsovic, and D. Weinmann. *Partial Local Density of States from Scanning Gate Microscopy*[J]. Physical Review B, 2017, 96(12):125439.
- [246] A. Jenkins, S. Baumann, H. Zhou, S. A. Meynell, Y. Daipeng, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. Lucas, A. F. Young, and A. C. Bleszynski Jayich. *Imaging the Breakdown of Ohmic Transport in Graphene*[J]. Physical Review Letters, 2022, 129(8):087701.
- [247] M. Zarea and N. Sandler. *Graphene Zigzag Ribbons, Square Lattice Models and Quantum Spin Chains*[J]. New Journal of Physics, 2009, 11(9):095014.
- [248] K. Wakabayashi and S. Dutta. *Nanoscale and Edge Effect on Electronic Properties of Graphene*[J]. Solid State Communications, 2012, 152(15):1420.
- [249] A. Talkachov and E. Babaev. *Wave Functions and Edge States in Rectangular Honeycomb Lattices Revisited: Nanoflakes, Armchair and Zigzag Nanoribbons, and Nanotubes*[J]. Physical Review B, 2023, 107(4):045419.
- [250] J. Cserti, A. Pályi, and C. Péterfalvi. *Caustics Due to a Negative Refractive Index in Circular Graphene p-n Junctions*[J]. Physical Review Letters, 2007, 99(24):246801.
- [251] E. Paredes-Rocha, Y. Betancur-Ocampo, N. Szpak, and T. Stegmann. *Gradient-Index Electron Optics in Graphene p-n Junctions*[J]. Physical Review B, 2021, 103(4):045404.
- [252] S. Xiang, A. Mreńca-Kolasińska, V. Miseikis, S. Guiducci, K. Kolasiński, C. Coletti, B. Szafran, F. Beltram, S. Roddar, and S. Heun. *Interedge Backscattering in Buried Split-Gate-Defined Graphene Quantum Point Contacts*[J]. Physical Review B, 2016, 94(15):155446.
- [253] E. B. Bogomolny. *Smoothed Wave Functions of Chaotic Quantum Systems*[J]. Physica D: Nonlinear Phenomena, 1988, 31(2):169–189.

- [254] M. V. Berry. *Quantum Scars of Classical Closed Orbits in Phase Space*[J]. Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences, 1997, 423(1864):219–231.
- [255] M. Robnik and M. V. Berry. *Classical Billiards in Magnetic Fields*[J]. Journal of Physics A: Mathematical and General, 1985, 18(9):1361.
- [256] N. Berglund and H. Kunz. *Integrability and Ergodicity of Classical Billiards in a Magnetic Field*[J]. Journal of Statistical Physics, 1996, 83(1):81–126.
- [257] G. Angelone, P. Facchi, and D. Lonigro. *Quantum Magnetic Billiards: Boundary Conditions and Gauge Transformations*[J]. Annals of Physics, 2022, 442:168914.
- [258] C. V. Morfonios and P. Schmelcher. *Control of Magnetotransport in Quantum Billiards: Theory, Computation and Applications*[M], volume 927 of *Lecture Notes in Physics*. Cham: Springer International Publishing, 2017.
- [259] D. Yoshioka. *The Quantum Hall Effect*[M], volume 133 of *Springer Series in Solid-State Sciences*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2002.
- [260] R. A. Serota. *Chaotic Quantum Billiards in Magnetic Field: A Semiclassical Analysis of Mesoscopic Effects*[J]. Solid State Communications, 1992, 84(8):843–845.
- [261] K. Nakamura, (eds.). *Quantum versus Chaos: Questions Emerging from Mesoscopic Cosmos*[M]. Fundamental Theories of Physics, Dordrecht: Springer Netherlands, 2002.
- [262] Z.-L. Ji and K.-F. Berggren. *Transition from Chaotic to Regular Behavior of Electrons in a Stadium-Shaped Quantum Dot in a Perpendicular Magnetic Field*[J]. Physical Review B, 1995, 52(3):1745–1750.
- [263] K. Hornberger and U. Smilansky. *Spectral Cross Correlations of Magnetic Edge States*[J]. Physical Review Letters, 2001, 88(2):024101.
- [264] K. Hornberger and U. Smilansky. *The Exterior and Interior Edge States of Magnetic Billiards: Spectral Statistics and Correlations*[J]. Physica Scripta, 2001, 2001(T90):64.
- [265] K. Hornberger and U. Smilansky. *Magnetic Edge States*[J]. Physics Reports, 2002, 367(4):249–385.
- [266] H. Ollivier, D. Poulin, and W. H. Zurek. *Objective Properties from Subjective Quantum States: Environment as a Witness*[J]. Physical Review Letters, 2004, 93(22):220401.
- [267] C. M. Marcus, A. J. Rimberg, R. M. Westervelt, P. F. Hopkins, and A. C. Gossard. *Conductance Fluctuations and Chaotic Scattering in Ballistic Microstructures*[J]. Physical Review Letters, 1992, 69(3):506–509.
- [268] A. M. Chang, H. U. Baranger, L. N. Pfeiffer, and K. W. West. *Weak Localization in Chaotic versus Nonchaotic Cavities: A Striking Difference in the Line Shape*[J]. Physical Review Letters, 1994, 73(15):2111–2114.
- [269] P. A. Lee, A. D. Stone, and H. Fukuyama. *Universal Conductance Fluctuations in Metals: Effects of Finite Temperature, Interactions, and Magnetic Field*[J]. Physical Review B, 1987, 35(3):1039–1070.
- [270] G. Q. Zhang, X. Chen, L. Lin, H. Peng, Z. Liu, L. Huang, N. Kang, and H. Q. Xu. *Transport Signatures of Relativistic Quantum Scars in a Graphene Cavity*[J]. Physical Review B, 2020, 101(8):085404.

- [271] J. Dauber, M. Oellers, F. Venn, A. Epping, K. Watanabe, T. Taniguchi, F. Hassler, and C. Stampfer. *Aharonov-Bohm Oscillations and Magnetic Focusing in Ballistic Graphene Rings*[J]. Physical Review B, 2017, 96(20):205407.
- [272] D. K. Ferry, R. Akis, and J. P. Bird. *Einselection in Action: Decoherence and Pointer States in Open Quantum Dots*[J]. Physical Review Letters, 2004, 93(2):026803.
- [273] L. Huang, Y.-C. Lai, H.-G. Luo, and C. Grebogi. *Universal Formalism of Fano Resonance*[J]. AIP Advances, 2015, 5(1):017137.
- [274] S. C. Creagh, J. M. Robbins, and R. G. Littlejohn. *Geometrical Properties of Maslov Indices in the Semiclassical Trace Formula for the Density of States*[J]. Physical Review A, 1990, 42(4):1907–1922.
- [275] J. Xue, J. Sanchez-Yamagishi, D. Bulmash, P. Jacquod, A. Deshpande, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Jarillo-Herrero, and B. J. LeRoy. *Scanning Tunnelling Microscopy and Spectroscopy of Ultra-Flat Graphene on Hexagonal Boron Nitride*[J]. Nature Materials, 2011, 10(4):282–285.
- [276] J. Keski-Rahkonen, P. J. J. Luukko, S. Åberg, and E. Räsänen. *Effects of Scarring on Quantum Chaos in Disordered Quantum Wells*[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2019, 31(10):105301.
- [277] D. K. Ferry, L. Huang, R. Yang, Y.-C. Lai, and R. Akis. *Open Quantum Dots in Graphene: Scaling Relativistic Pointer States*[J]. Journal of Physics: Conference Series, 2010, 220(1):012015.
- [278] N. Holmberg, R. Akis, D. P. P. Jr, J. P. Bird, and D. K. Ferry. *Size-Dependent Effects on the Magnetotransport Fluctuations of Square Quantum Dots*[J]. Semiconductor Science and Technology, 1998, 13(8A):A21.
- [279] N. Holmberg, R. Akis, and D. Ferry. *The Effect of Size Scaling on the Magneto-Transport Fluctuations in Ballistic Quantum Dots*[C]. Proceedings of 1998 Sixth International Workshop on Computational Electronics. Extended Abstracts (Cat. No.98EX116), 1998. 38–41.
- [280] P. Yu, Z.-Y. Li, H.-Y. Xu, L. Huang, B. Dietz, C. Grebogi, and Y.-C. Lai. *Gaussian Orthogonal Ensemble Statistics in Graphene Billiards with the Shape of Classically Integrable Billiards*[J]. Physical Review E, 2016, 94(6):062214.
- [281] D. A. Abanin, E. Altman, I. Bloch, and M. Serbyn. *Colloquium: Many-body Localization, Thermalization, and Entanglement*[J]. Reviews of Modern Physics, 2019, 91(2):021001.
- [282] Y. Alhassid. *The Statistical Theory of Quantum Dots*[J]. Reviews of Modern Physics, 2000, 72(4):895–968.
- [283] L. D’Alessio, Y. Kafri, A. Polkovnikov, and M. Rigol. *From Quantum Chaos and Eigenstate Thermalization to Statistical Mechanics and Thermodynamics*[J]. Advances in Physics, 2016, 65(3):239–362.
- [284] C. Berger, Z. Song, T. Li, X. Li, A. Y. Ogbazghi, R. Feng, Z. Dai, A. N. Marchenkov, E. H. Conrad, P. N. First, and W. A. de Heer. *Ultrathin Epitaxial Graphite: 2D Electron Gas Properties and a Route toward Graphene-based Nanoelectronics*[J]. The Journal of Physical Chemistry B, 2004, 108(52):19912–19916.

- [285] G. Casati, F. Valz-Gris, and I. Guarneri. *On the Connection between Quantization of Nonintegrable Systems and Statistical Theory of Spectra*[J]. Lettere al Nuovo Cimento (1971-1985), 1980, 28(8):279–282.
- [286] S. Müller, S. Heusler, P. Braun, F. Haake, and A. Altland. *Semiclassical Foundation of Universality in Quantum Chaos*[J]. Physical Review Letters, 2004, 93(1):014103.
- [287] L. Huang, H.-Y. Xu, Y.-C. Lai, and C. Grebogi. *Level Spacing Statistics for Two-Dimensional Massless Dirac Billiards*[J]. Chinese Physics B, 2014, 23(7):070507.
- [288] B. Dietz, T. Klaus, M. Miski-Oglu, and A. Richter. *Spectral Properties of Superconducting Microwave Photonic Crystals Modeling Dirac Billiards*[J]. Physical Review B, 2015, 91(3):035411.
- [289] N. Mott. *Metal-Insulator Transitions*[M]. 1st edition ed., London ; New York: CRC Press, August, 1990.
- [290] F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, and V. E. Korepin. *The One-Dimensional Hubbard Model*[M]. New York: Cambridge University Press, February, 2005.
- [291] A. Altland and B. D. Simons. *Condensed Matter Field Theory*[M]. Second ed., Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
- [292] A. Reich and L. M. Falicov. *Heavy-Fermion System: Superconducting and Magnetic Fluctuations within a Periodic-Cluster Hubbard Model*[J]. Physical Review B, 1988, 38(16):11199–11208.
- [293] D. J. Scalapino. *A Common Thread: The Pairing Interaction for Unconventional Superconductors*[J]. Reviews of Modern Physics, 2012, 84(4):1383–1417.
- [294] C. C. Tsuei and J. R. Kirtley. *Phase-Sensitive Evidence for d-Wave Pairing Symmetry in Electron-Doped Cuprate Superconductors*[J]. Physical Review Letters, 2000, 85(1):182–185.
- [295] T. A. Maier, M. Jarrell, and D. J. Scalapino. *Pairing Interaction in the Two-Dimensional Hubbard Model Studied with a Dynamic Cluster Quantum Monte Carlo Approximation*[J]. Physical Review B, 2006, 74(9):094513.
- [296] H. Feldner, Z. Y. Meng, T. C. Lang, F. F. Assaad, S. Wessel, and A. Honecker. *Dynamical Signatures of Edge-State Magnetism on Graphene Nanoribbons*[J]. Physical Review Letters, 2011, 106(22):226401.
- [297] C. Tao, L. Jiao, O. V. Yazyev, Y.-C. Chen, J. Feng, X. Zhang, R. B. Capaz, J. M. Tour, A. Zettl, S. G. Louie, H. Dai, and M. F. Crommie. *Spatially Resolving Edge States of Chiral Graphene Nanoribbons*[J]. Nature Physics, 2011, 7(8):616–620.
- [298] M. Golor, T. C. Lang, and S. Wessel. *Quantum Monte Carlo Studies of Edge Magnetism in Chiral Graphene Nanoribbons*[J]. Physical Review B, 2013, 87(15):155441.
- [299] C. Koop and M. J. Schmidt. *Effective Spin Theories for Edge Magnetism in Graphene Zigzag Ribbons*[J]. Physical Review B, 2015, 92(12):125416.
- [300] Y. Zheng, C. Li, Y. Zhao, D. Beyer, G. Wang, C. Xu, X. Yue, Y. Chen, D.-D. Guan, Y.-Y. Li, H. Zheng, C. Liu, W. Luo, X. Feng, S. Wang, and J. Jia. *Engineering of Magnetic Coupling in Nanographene*[J]. Physical Review Letters, 2020, 124(14):147206.

- [301] G. Lenz and F. Haake. *Reliability of Small Matrices for Large Spectra with Nonuniversal Fluctuations*[J]. Physical Review Letters, 1991, 67(1):1–4.
- [302] B. Dietz, A. Heusler, K. H. Maier, A. Richter, and B. A. Brown. *Chaos and Regularity in the Doubly Magic Nucleus 208 Pb*[J]. Physical Review Letters, 2017, 118(1):012501.
- [303] J. S. Nascimento, D. R. da Costa, M. Zarenia, A. Chaves, and J. M. Pereira. *Magnetic Properties of Bilayer Graphene Quantum Dots in the Presence of Uniaxial Strain*[J]. Physical Review B, 2017, 96(11):115428.
- [304] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe. *Peculiar Localized State at Zigzag Graphite Edge*[J]. Journal of the Physical Society of Japan, 1996, 65(7):1920–1923.
- [305] J. Fernández-Rossier and J. J. Palacios. *Magnetism in Graphene Nanoislands*[J]. Physical Review Letters, 2007, 99(17):177204.
- [306] Y. Hancock, A. Uppstu, K. Salorium, A. Harju, and M. J. Puska. *Generalized Tight-Binding Transport Model for Graphene Nanoribbon-Based Systems*[J]. Physical Review B, 2010, 81(24):245402.
- [307] H. Feldner, Z. Y. Meng, A. Honecker, D. Cabra, S. Wessel, and F. F. Assaad. *Magnetism of Finite Graphene Samples: Mean-field Theory Compared with Exact Diagonalization and Quantum Monte Carlo Simulations*[J]. Physical Review B, 2010, 81(11):115416.
- [308] F. Liu, Y. Li, X. Liu, and J. Kang. *Gate Voltage Induced Spin-Filtering Effect in a Junction Based on Zigzag Graphene Nanoribbons*[J]. Applied Physics Letters, 2011, 99(24):243503.
- [309] Y. C. Chang and S. Haas. *Defect-Induced Resonances and Magnetic Patterns in Graphene*[J]. Physical Review B, 2011, 83(8):085406.
- [310] D. Gunlycke, D. A. Areshkin, J. Li, J. W. Mintmire, and C. T. White. *Graphene Nanostrip Digital Memory Device*[J]. Nano Letters, 2007, 7(12):3608–3611.
- [311] L. Pisani, J. A. Chan, B. Montanari, and N. M. Harrison. *Electronic Structure and Magnetic Properties of Graphitic Ribbons*[J]. Physical Review B, 2007, 75(6):064418.
- [312] S. Bhowmick and V. B. Shenoy. *Edge State Magnetism of Single Layer Graphene Nanostructures*[J]. The Journal of Chemical Physics, 2008, 128(24):244717.
- [313] S. Cheng, J. Yu, T. Ma, and N. M. R. Peres. *Strain-Induced Edge Magnetism at the Zigzag Edge of a Graphene Quantum Dot*[J]. Physical Review B, 2015, 91(7):075410.
- [314] J. J. Palacios, J. Fernández-Rossier, and L. Brey. *Vacancy-Induced Magnetism in Graphene and Graphene Ribbons*[J]. Physical Review B, 2008, 77(19):195428.
- [315] P. Potasz, A. D. Güçlü, A. Wójs, and P. Hawrylak. *Electronic Properties of Gated Triangular Graphene Quantum Dots: Magnetism, Correlations, and Geometrical Effects*[J]. Physical Review B, 2012, 85(7):075431.
- [316] W.-L. Ma and S.-S. Li. *Electric-Field-Induced Spin Depolarization in Graphene Quantum Dots*[J]. Physical Review B, 2012, 86(4):045449.
- [317] G. Fano, F. Ortolani, and A. Parola. *Hole-Hole Effective Interaction in the Two-Dimensional Hubbard Model*[J]. Physical Review B, 1990, 42(10):6877–6880.

- [318] P. W. Leung, Z. Liu, E. Manousakis, M. A. Novotny, and P. E. Oppenheimer. *Density of States of the Two-Dimensional Hubbard Model on a 4X4 Lattice*[J]. Physical Review B, 1992, 46(18):11779–11786.
- [319] P. Potasz, A. D. Güçlü, O. Voznyy, J. A. Folk, and P. Hawrylak. *Electronic and Magnetic Properties of Triangular Graphene Quantum Rings*[J]. Physical Review B, 2011, 83(17):174441.
- [320] E. B. Bogomolny, U. Gerland, and C. Schmit. *Models of Intermediate Spectral Statistics*[J]. Physical Review E, 1999, 59(2):R1315–R1318.
- [321] S. Sahu and G. C. Rout. *Band Gap Opening in Graphene: A Short Theoretical Study*[J]. International Nano Letters, 2017, 7(2):81–89.
- [322] L. M. Martelo, M. Dzierzawa, L. Siffert, and D. Baeriswyl. *Mott-Hubbard Transition and Antiferromagnetism on the Honeycomb Lattice*[J]. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 1996, 103(2):335–338.
- [323] S. Rachel and K. Le Hur. *Topological Insulators and Mott Physics from the Hubbard Interaction*[J]. Physical Review B, 2010, 82(7):075106.
- [324] R. Nandkishore and D. A. Huse. *Many-Body Localization and Thermalization in Quantum Statistical Mechanics*[J]. Annual Review of Condensed Matter Physics, 2015, 6(1):15–38.
- [325] M. Serbyn and J. E. Moore. *Spectral Statistics across the Many-Body Localization Transition*[J]. Physical Review B, 2016, 93(4):041424.
- [326] P. Sierant and J. Zakrzewski. *Level Statistics across the Many-Body Localization Transition*[J]. Physical Review B, 2019, 99(10):104205.
- [327] D. J. Thouless. *Electrons in Disordered Systems and the Theory of Localization*[J]. Physics Reports, 1974, 13(3):93–142.
- [328] B. I. Shklovskii, B. Shapiro, B. R. Sears, P. Lambrianides, and H. B. Shore. *Statistics of Spectra of Disordered Systems near the Metal-Insulator Transition*[J]. Physical Review B, 1993, 47(17):11487–11490.
- [329] D. J. Mason, M. F. Borunda, and E. J. Heller. *Quantum Flux and Reverse Engineering of Quantum Wave Functions*[J]. EPL (Europhysics Letters), 2013, 102(6):60005.
- [330] D. J. Mason, M. F. Borunda, and E. J. Heller. *Semiclassical Deconstruction of Quantum States in Graphene*[J]. Physical Review B, 2013, 88(16):165421.
- [331] N. Moreau, B. Brun, S. Somanchi, K. Watanabe, T. Taniguchi, C. Stampfer, and B. Hackens. *Quantum Hall Nano-Interferometer in Graphene*[Z], October, 2021.
- [332] D. J. Mason, M. F. Borunda, and E. J. Heller. *Revealing the Flux: Using Processed Husimi Maps to Visualize Dynamics of Bound Systems and Mesoscopic Transport*[J]. Physical Review B, 2015, 91(16):165405.



## 在学期间的研究成果

- [1] *Scanning gate microscopy in graphene nanostructures*, Phys. Rev. B **107**, 085420 (2023). (第一作者, 文中第四章)
- [2] *Transport signatures of relativistic quantum scars in a graphene cavity*, Phys. Rev. B **101**, 085404 (2020). (共同一作, 文中第五章)
- [3] *Many-body spectral statistics of relativistic quantum billiard systems*, Phys. Rev. Research **5**, 013050 (2023). (第一作者, 文中第六章)
- [4] *Quantization condition of scarring states in complex soft-wall quantum billiards*, Acta Phys. Sin. **69**, 080506 (2020). (第二作者)
- [5] *Enhancing von Neumann entropy by chaos in spin-orbit entanglement*, Chin. Phys. B **28**, 10 (2019). (第三作者)
- [6] *Effect of chaos on two-dimensional spin transport*, Phys. Rev. B **98**, 115305 (2018). (第二作者)

