

Universitatea Babeș-Bolyai  
Facultatea de Fizică

**Sisteme de Grafene Dezordonate și  
Dicalcogenide ale Metalelor de Tranziție.  
Un Studiu Teoretic Asupra Structurilor 2D.**

**- Rezumat -**

Teodor-Lucian Biter

Conducător Științific:  
Prof. Dr. Ioan Grosu

Cluj-Napoca  
- 2021 -



## Abstract

Au trecut aproape două decenii de la descoperirea grafenei. În urma descoperirii, structurile bidimensionale au primit o atenție deosebită, rezultând în publicare a nenumărate articole cu această tematică. Datorită potențialului imens teoretic și experimental, acest tip de structuri necesită să fie studiate în continuare. Un scop al acestei teze este explicarea măsurătorilor magnetice efectuate pe grafene fluorurate. Acesta a fost atins lucrând în aproximațiile Born și matricii  $T$  pentru a analiza susceptibilitatea statică de spin a sistemelor de grafene cu bandă interzisă, în prezența dezordinii și cu împrăștieri slabe. Rezultate obținute au reușit să atingă o concordanță calitativă cu datele experimentale. Un alt model pentru studiul susceptibilității statice de spin propune sisteme de grafene în prezența dezordinii și cu împrăștieri puternice (limita unitară), considerând o bandă interzisă mică. Acest model este propus drept test pentru limita unitară în sisteme de grafene dezordonate, alături de modele noastre pentru timpul de relaxare spin-rețea și capacitatea calorică electronică. În cele trei studii în care am lucrat în limita unitară, am observat anumite schimbări de comportament care depind de concentrația de impurități. Pe lângă grafene, au fost studiate și proprietățile termodinamice a dicalcogenidelor ale metalelor de tranziție plasate pe un substrat. Au fost analizate efectele substratului asupra benzii interzise supraconductoare, căldurii specifice și saltului căldurii specifice, și asupra câmpului critic.

**Cuvinte cheie:** Grafene, Dezordine, Bandă interzisă, Aproximația matricii  $T$ , Aproximația Born, Limita unitară, Dezordine critică, Susceptibilitate de spin, Relaxare spin-rețea, Capacitatea calorică electronică, Dicalcogenide ale metalelor de tranziție, Substrat, Spectru "masiv" cu bandă interzisă, Bandă interzisă supraconductoare, Căldura specifică, Câmp critic.



# Cuprins

<b>Abstract</b>	<b>i</b>
<b>1 Introducere</b>	<b>1</b>
<b>2 Sisteme de grafene dezordonate cu împrăştieri slabe</b>	<b>4</b>
2.1 Grafene . . . . .	4
2.2 Susceptibilitatea de spin a sistemelor de grafene dezordonate . . . . .	6
<b>3 Sisteme de grafene dezordonate cu împrăştieri puternice</b>	<b>10</b>
3.1 Introducere . . . . .	10
3.2 Susceptibilitate de spin ca test pentru limita unitară în sisteme de grafene dezordonate . . . . .	10
3.3 Timpul de relaxare spin-reţea în sisteme de grafene dezordonate . . . . .	13
3.4 Capacitatea calorică electronică în sisteme de grafene dezordonate . . . . .	15
<b>4 Dicalcogenide ale metalelor de tranziţie supraconductoare</b>	<b>19</b>
4.1 Introducere . . . . .	19
4.2 Concepte generale . . . . .	20
4.2.1 Superconductibilitatea în dicalcogenidele ale metalelor de tranziţie . . . . .	21

4.3	Proprietăți termodinamice ale dicalcogenidelor ale metalelor de tranziție pe un substrat . . . . .	22
<b>5</b>	<b>Concluzii și perspective</b>	<b>27</b>
	<b>Bibliografie</b>	<b>29</b>

# Capitolul 1

## Introducere

Grafena este primul material bidimensional sintetizat și este un strat de un atom grosime format din atomi de carboni dispuși într-o rețea hexagonală de tip fagure de miere [1]. Proprietățile neobișnuite ale grafenei se datorează structurii de benzi de tip Dirac, unde banda de valență întâlnește banda de conducție în cele șase puncte ale colțurilor zonei Brillouin [2, 3], împărțite în punctele non-echivalente  $K$  și  $K'$ , numite punctele Dirac [4]. Dispersia liniară a energiei din jurul punctelor Dirac duce la apariția multor fenomene fizice interesante [4, 5]. În pofida proprietăților sale excepționale, grafena curată nu este de folos în multe aplicații tehnologice datorită benzii interzise zero. În același timp, trebuie să luăm în considerare faptul că probele de grafene manufacturate nu sunt lipsite de defecte structurale și că proprietățile grafenei sunt influențate de prezența dezordinii. Densitatea de stări este una dintre ele, care la rândul ei influențează multe alte proprietăți. De când a fost sintetizată grafena, problema dezordinii a fost studiată în nenumărate studii teoretice publicate cu scopul de a explica rezultatele obținute experimental [4–10]. Pentru a-și atinge scopul, autorii au folosit diverse aproximații, precum: aproximația Born, aproximația Born self-consistentă, aproximația matricii  $T$ , aproximația matricii  $T$  self-consistentă, și limita unitară. Pentru a obține rezultate mai bune pentru puterea termoelectrică în grafene, s-a ținut cont de spectrul energetic cu bandă interzisă [11] (spectru "masiv" cu bandă interzisă). Pentru a explica mai multe măsurători experimentale [12], a fost introdus și spectrul "nemasiv" cu bandă interzisă [13]. Cel din urmă reconciliază spectrul energetic cu bandă interzisă cu caracterul nemasiv al particulelor din grafene.

Nu cu mult timp în urma, măsurătorile magnetice pe grafene fluorurate au dezvăluit magnetism puternic în astfel de structuri bazate pe grafene [14]. Așadar, pentru a analiza într-un mod

calitativ susceptibilitatea magnetică de spin măsurată în grafene fluorurate, am considerat un sistem de grafenă cu bandă interzisă și am lucrat în aproximațiile Born și matricii  $T$  [15].

Considerând limita unitară (împrăștieri puternice), Ostrovsky et.al. [7] au reușit să obțină rezultate teoretice asemănătoare cu cele observate experimental pentru conductivitatea în grafene [16, 17]. Lucrând în limita unitară, am propus utilizarea dependenței susceptibilității statice de spin de temperatură pentru a dezvălui prezența mecanismelor de împrăștiere [18].

Rezonanța magnetică nucleară (RMN) este o metodă experimentală cu aplicații în domeniile științifice cât și industriale. În sistemele formate dintr-un singur strat de grafene au fost raportate deviații puternice de la parametrii RMN din metale [19, 20]. Diferențele apar de la termenul de contact Fermi în interacția spin-nucleu. Având în vedere acest lucru, ne-am propus să studiem timpul de relaxare spin-rețea în cazul sistemelor de grafene dezordonate cu împrăștieri puternice (limita unitară) [21].

Când considerăm posibile aplicații tehnologice, trebuie să ținem cont și de proprietățile termice ale materialelor. Așadar, studiul proprietăților termice ale grafenei este de interes (e.g., capacitatea calorică și conductivitatea termică) [22, 23]. Deși capacitatea calorică în grafene este dominată de contribuția fononilor, nu ar trebui să desconsiderăm importanța capacității calorice a electronilor. Prin urmare, ne-am propus să studiem capacitatea calorică a electronilor în grafene în prezența dezordinii, lucrând în limita unitară [24].

Prima sinteză a grafenei din grafit a fost urmată de o creștere masivă a numărului de articole publicate pe grafene. Acest interes în grafene și proprietățile sale fascinante au acaparat comunitatea științifică și a revigorat cercetarea asupra materialelor bidimensionale. Dicalcogenidele ale metalelor de tranziție sunt o clasă de materiale cvasi-bidimensionale, legate cu forțe van der Waals, cu o istorie bogată de mai bine de 50 de ani [25] și care a beneficiat de această perioadă de avânt. La temperaturi scăzute, aceste materiale manifesta supraconductibilitate de tip  $s$ -wave și stările supraconductoare co-există cu unde de densitate de sarcină [26]. Alte studii au scos la iveală proprietăți similare cu cele ale supraconductorilor de înaltă temperatură, precum comportamentul timpului de viață a cvasi-particulelor și dependența liniară de temperatură a rezistivității stării normale. Pe de altă parte, în regiunea unde banda interzisă



---

a unei densități de sarcină dispăre, se creează cvasi-particule de fermioni Dirac. În acest caz, supraconductibilitatea este dată de aceste particule care formează perechi Cooper mediate de fononi [27, 28]. Acestea seamănă cu proprietățile supraconductoare în grafene [29, 30]. Urmând metoda dată în Ref. [28], am propus studiul mai multor proprietăți termodinamice a dicalcogenidelor ale metalelor de tranziție supraconductoare crescute pe un substrat. În prezența substratului apare o asimetrie în Hamiltonian care poate ridica degenerarea de la punctele Dirac, având drept consecință deschiderea unei benzi interzise non-supraconductoare  $E_0$  în spectrul energetic [20, 31]. Aproape de punctele Dirac, aceasta duce la spectrul energetic "masiv" care este și cazul pe care ni l-am propus să îl studiem, și nu cel al spectrului energetic "nemasiv" [13] folosit în Ref. [32] pentru a discuta ecuația benzii interzise, a temperaturii critice, și al raportului Geilikman-Kresin [33, 34].

# Capitolul 2

## Sisteme de grafene dezordonate cu împrăștieri slabe

În acest capitol vom începe cu o scurtă prezentare a grafenelor. După, vom rezuma rezultatele obținute pentru susceptibilitatea statică de spin în sisteme de grafene dezordonate.

### 2.1 Grafene

Carbonul este un element chimic nemetalic tetravalent care este o componentă cheie pentru viața așa cum o știm. Un alotrop al carbonului, cu hibridizare  $sp^2$ , este grafena, o structura bidimensională dispusă într-o rețea hexagonală de tip fagure de miere, care poate fi considerată drept două rețele triunghiulare intercalate, după cum se vede în Fig 2.1.1.

Deși grafena a fost sintetizată pentru prima dată cu aproape două decenii în urma de către Novoselov et al. [35,36] (în 2010 Andre Geim și Konstantin Novoselov au primit premiul Nobel pentru studiile experimentale pe grafene), ea a fost în continuu studiată datorită proprietăților sale remarcabile. Structura de benzi a fost calculată pentru prima dată în 1947 [2] utilizând aproximația tight-binding pentru a explica proprietățile grafitului, un material care era folosit în reactoarele nucleare; grafena fiind o structură pur teoretică deoarece teoria prezicea că astfel de structuri uni- și bi-dimensionale ar fi instabile [37,38]. După aproape un deceniu după studiile lui Wallace a apărut modelul Slonczewski-Weiss-McClure (SWM) pentru structura de benzi a grafitului [39,40] care descria proprietățile electronice ale grafitului și care a reușit să descrie cu succes datele experimentale. Acest model avea o problemă cu asignarea stărilor electronilor și golurilor în material, problemă care a fost rezolvată în 1968 [41]. Modelul SWN nu reușea să descrie interacțiunile de tip van der Waals dintre straturile de grafene, ceea ce

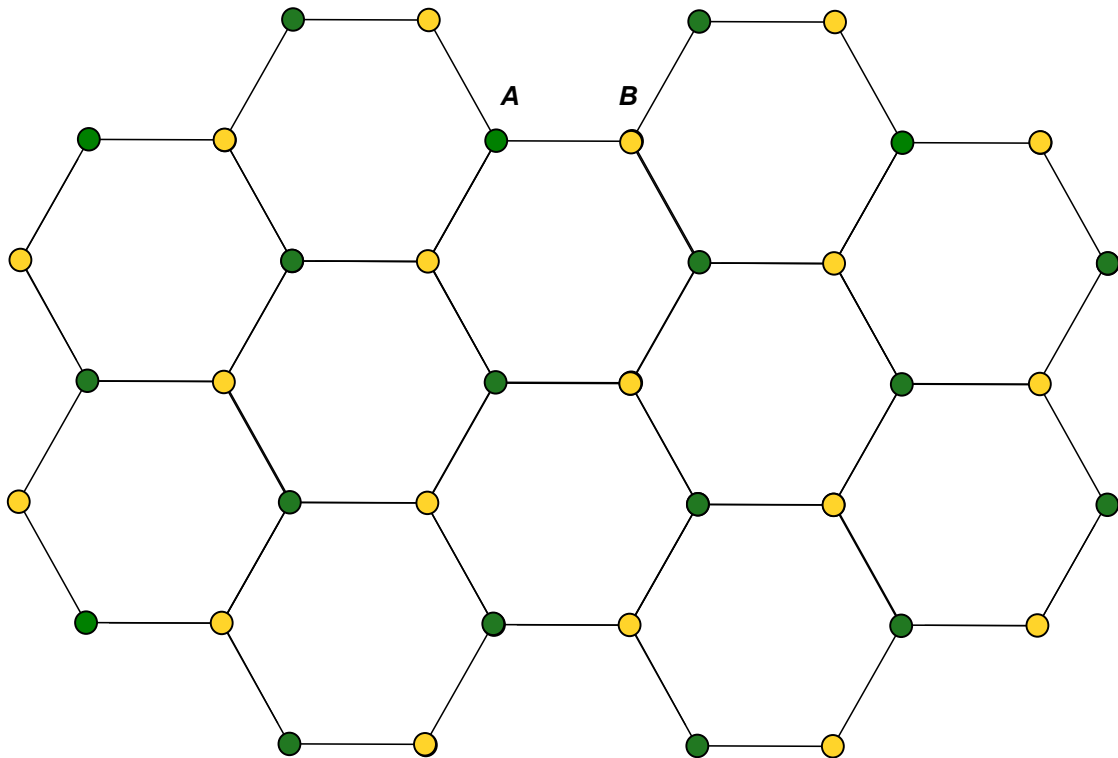


Figura 2.1.1: Rețeaua de timp fagure de miere a grafenei,  $A$  și  $B$  sunt atomii de carbon care aparțin rețelelor triunghiulare considerate.

prezenta o problemă majoră, dar acest model a fost revizuit în 2003 [42]. Acest subiect este încă cercetat [43–45] și, deși, valorile obținute prin teoria funcționalei de densitate sunt destul de împrăștiate, după cum reiese din aceste studii comparative [46,47], încep să apară și rezultate experimentale [48,49]. Chiar dacă nu ne lovim de această problemă în cazul unui singur strat de grafenă, în cazul multi-strat ea este prezentă și de interes pentru că structurile stratificate pot avea proprietăți electronice complet diferite. Deși aceste structuri stratificate sunt la fel de interesate, ele nu prezintă subiectul acestei teze.

Excitațiile cvasi-particulelor de energie joasă sunt una dintre caracteristicile notabile ale grafenei, deoarece sunt fermioni Dirac chirali și fără masă care au o dispersie liniară în jurul punctelor Dirac. Acest aspect este responsabil pentru multe fenomene interesante, pentru că imită fermionii fără masă descriși de electrodinamica cuantică, cu viteza luminii  $c$  fiind considerată viteza Fermi  $v_F$ , care este de aproximativ 300 de ori mai mică. Acest lucru duce la prezența electrodinamicii cuantice în grafene [50]. Pentru cititorul curios, mai multe detalii din punct de vedere teoretic, cât și experimental pot fi găsite în Refs. [4,51].

## 2.2 Susceptibilitatea de spin a sistemelor de grafene dezordonate

Funcțiile Green nu reușesc să descrie atât de bine împrăștierea unei particule pe o singură impuritate. Schimbările energiei unei particule sunt calculate din interacțiunile sale cu ajutorul ecuației Dyson, în care self-energia unei particule conține energia rezultată din interacțiunile dintre particulă și mediul înconjurător. În sisteme foarte mari, o singură impuritate ar induce o schimbare a energiei particulei care este invers proporțională cu volumul sistemului  $V$ . Prin adăugarea a  $N_i$  impurități (cu  $N_i/V = n_i$  atunci când  $V \rightarrow \infty$ ), energia particulei ar putea fi schimbată. Dacă facem acest lucru, energia particulei devine o funcție de concentrația de impurități  $n_i$ . Pentru a studia cazul unei impurități izolate, trebuie găsită self-energia pentru  $n_i$  după care luăm limita  $n_i \rightarrow 0$  [52].

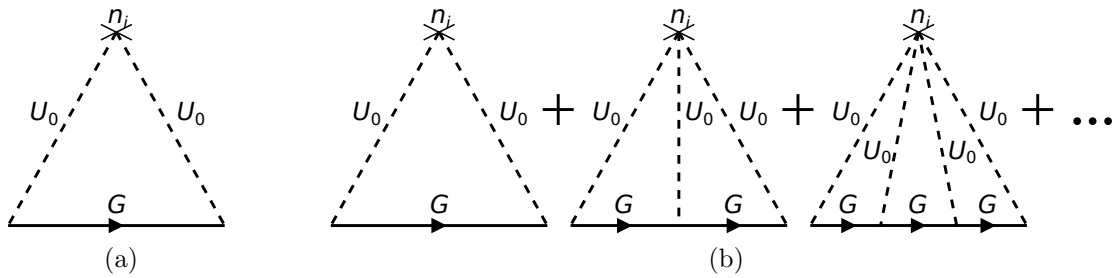


Figura 2.2.1: Diagrame Feynman pentru self-energia în (a) aproximația Born și (b) aproximația matricii  $T$ .

În Fig. 2.2.1 avem diagramele Feynman pentru self-energia în aproximația Born și aproximația matricii  $T$ . Aproximația Born rămâne valabilă pentru concentrații de impurități mici și fără evenimente de împrăștiere multiple. În cazul aproximației matricii  $T$ , trebuie considerată însumarea întregii serii de diagrame Feynman. Densitatea de stări a fost calculată utilizând self-energia. Densitățile de stări obținute pentru fiecare aproximație în parte au fost folosite pentru a determina susceptibilitatea statică de spin pentru aproximațiile respective.

În Fig. 2.2.2, am plotat dependența de temperatură a susceptibilității de spin pentru aproximația Born folosind densitatea de stări și self-energia corespunzătoare. Am ales să folosim potențialul chimic  $\mu$  drept parametru, dar această presupunere nu este adevărată pe tot intervalul de temperaturi. Cu toate acestea, în cazul nostru, unde temperaturile sunt mai mici de 300K, aproximarea potențialului chimic cu o constantă este acceptabilă dacă considerăm cazul grafenei

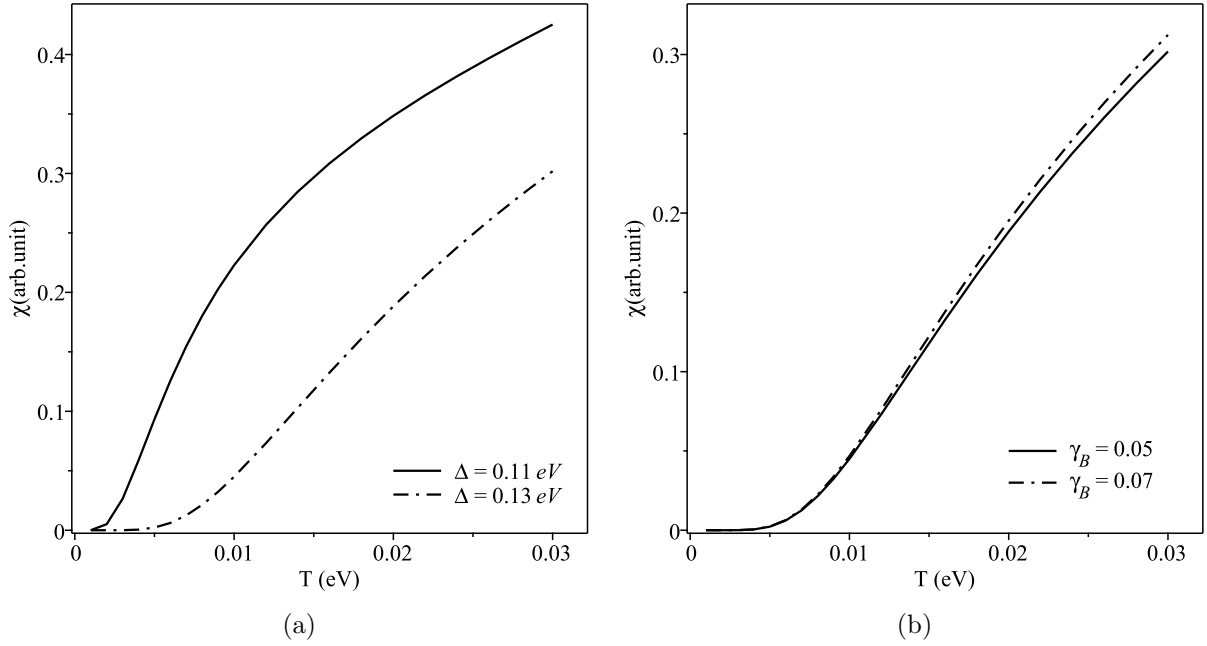


Figura 2.2.2: Susceptibilitatea de spin în funcție de temperatură, în aproximația Born, pentru (a)  $\Delta = 0.11$  eV (linie continuă) și  $\Delta = 0.13$  eV (linie-punct), folosind  $\varepsilon_c = 5$  eV,  $\mu = 0.1$  eV,  $\gamma_B = 0.05$  și (b)  $\gamma_B = 0.05$  (linie continuă) și  $\gamma_B = 0.07$  (linie-punct), folosind  $\varepsilon_c = 5$  eV,  $\mu = 0.1$  eV,  $\Delta = 0.13$  eV.

extrinseci și dezordine mică (vezi Refs. [10,53]). Pentru cazul grafenei curate și în limita extrinsecă, am găsit că  $\mu(T = 200 \text{ K}) \simeq 0.75E_F$ , ceea ce înseamnă că estimările noastre numerice cu o valoare constantă pentru potențialul chimic ( $\mu \approx E_F$ ) sunt mai puțin de încredere aproape de temperatura camerei. Totuși, scăderea potențialului chimic în acest interval de temperaturi poate explica structura de platou a dependenței de temperatură a susceptibilității statice de spin din experimente [14]. În prezența dezordinii, calculul potențialului chimic este dificil datorită formei complicate a densității de stări pe care am calculat-o. Acest calcul ar necesita un studiu separat, folosind metode numerice. Totuși, în limita dezordinii scăzute am folosit aproximația de mai sus, considerând efectul impurităților a fi unul mic. Datorită formei simetrice a densității de stări, aceste rezultate nu se modifică dacă  $\mu \rightarrow -\mu$  (contribuția golurilor). În Fig. 2.2.2(b) analizăm efectele dezordinii slabe asupra dependenței de temperatură a susceptibilității de spin. Acest efect este foarte mic atât timp cât considerăm doar cazul dezordinii slabe, când  $\gamma_B$  este mic. Presupunerea dezordinii slabe înseamnă că concentrația de impurități este mică, așadar, dezordinea poate fi considerată gaussiană și  $\gamma_B \ll 1$  (vezi Refs. [7, 9]). De exemplu, pentru densitatea de impurități  $n_i \sim 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  și un potențial de împrăștiere  $U_0 \sim 1 \text{ KeV}\text{\AA}^2$ , puterea

dezordinii este  $\gamma_B \sim 0.1$  [9]. În estimările noastre presupunem o densitate de impurități mai mică decât  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$  puterile de ordine  $\gamma_B = 0.05$  și  $\gamma_B = 0.07$  sunt considerate de încredere.

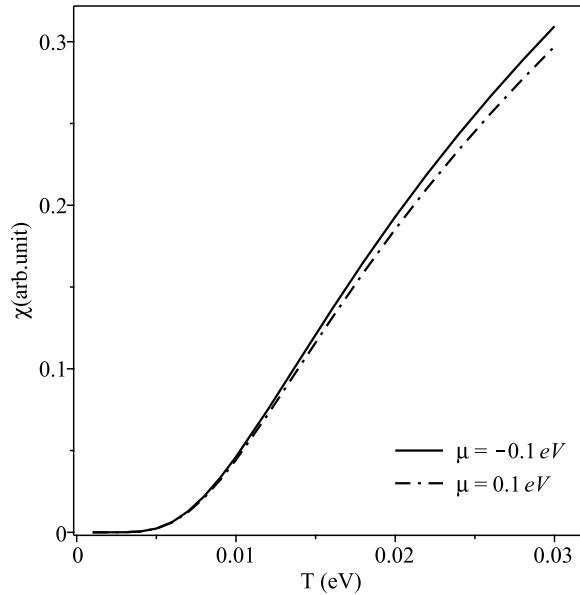


Figura 2.2.3: Susceptibilitatea de spin în funcție de temperatură, în aproximația matricii  $T$ , pentru  $\mu = -0.1 \text{ eV}$  (linie continuă) și  $\mu = 0.1 \text{ eV}$  (linie-punct), folosind  $\varepsilon_c = 5 \text{ eV}$ ,  $\gamma_B = 0.05$ ,  $\Delta = 0.13 \text{ eV}$ ,  $u = 1 \text{ (eV)}^{-1}$ .

În cazul aproximației matricii  $T$ , din nou, distanța dintre banda interzisă și potențialul chimic este importantă și densitatea de stări nu mai este simetrică (în energie) și dependența de temperatură a susceptibilității de spin este diferită pentru cazurile  $\mu > 0$  și  $\mu < 0$ , după cum se vede și în Fig. 2.2.3. Aici, efectul dezordinii slabe asupra dependenței de temperatură a susceptibilității de spin este unul mic.

Chiar dacă modelul nostru este simplificat, el reușește să scoată la iveală informații suplimentare despre cum diferiți parametri influențează dependența de temperatură a susceptibilității de spin (autorii din Ref. [14] au folosit doar o simplă dependență exponențială de temperatură în prezența unei benzi interzise). Prin urmare, prima informație importantă prezentă din modelul nostru este efectul pe care îl are poziția potențialului chimic față de bandă interzisă asupra dependenței de temperatură a susceptibilității de spin. Acest efect produce modificări importante în dependența de temperatură a susceptibilității de spin atât pentru aproximația Born, cât și pentru aproximația matricii  $T$ . Acest lucru era de așteptat, deoarece, la temperaturi finite, poziția relativă a potențialului chimic față de banda interzisă influențează numărul de

electroni (goluri) din sistem. A doua informație este legată de cum influențează dezordinea slabă dependența de temperatură a susceptibilității de spin. Efectul dezordinii slabe este unul mic pentru ambele aproximații considerate (cu micile diferențe deja menționate). Deși am reușit să obținem un acord calitativ între teorie și experiment, în capitolul următor, pe lângă alte proprietăți, vom sumariza și rezultatele obținute pentru cazul opus, atunci când considerăm împrăștieri puternice.

# Capitolul 3

## Sisteme de grafene dezordonate cu împrăstieri puternice

### 3.1 Introducere

În capitolul anterior am văzut că am reușit să obținem un acord calitativ între teorie și experiment pentru susceptibilitatea statică de spin. În acest capitol vom prezenta pe scurt rezultatele obținute pentru susceptibilitatea statică de spin, timpul de relaxare spin-rețea  $T_1$ , și capacitatea calorică electronică ale sistemelor de grafene dezordonate atunci când considerăm împrăstieri puternice (i.e., limita unitară  $U_0 \rightarrow \infty$ ). Studiul lui Ostrovsky et.al. [7] a demonstrat că limita unitară poate fi folosită cu succes pentru a explica datele experimentale, reușind să obțină rezultate comparabile cu cele observate experimental pentru dependența liniară de concentrația electronilor a conductivității în grafene [16, 17].

### 3.2 Susceptibilitate de spin ca test pentru limita unitară în sisteme de grafene dezordonate

Susceptibilitatea statică de spin a sistemelor de grafene a fost analizată în prezența dezordinii și a unei benzi interzise mici. Am investigat efectele temperaturii și a concentrației de impurități asupra susceptibilității statice de spin. Am considerat mecanismele de împrăstiere în limita unitară a fi de importanță principală, iar banda interzisă mică de importanță secundară. Pentru a ne atinge scopul, mai întâi am calculat self-energia electronului, lucrând în limita unitară și considerând o bandă interzisă mică. Aceste rezultate au fost folosite pentru calcularea densității de stări, cu al cărui ajutor am determinat susceptibilitatea statică de spin.

Pentru a determina self-energia electronului, am considerat dezordine indusă de impurități



distribuite aleatoriu. Self-energia  $\Sigma$ , în prezența impurităților, este dată de matricea  $T$  completă pentru impurități [7, 9, 54]. De obicei, self-energia reprezintă contribuția la energia particulei din interacțiunea dintre particulă și mediu (evenimentele de împrăștiere, în cazul nostru). În prezența impurităților, stările proprii ale momentului nu mai sunt stări proprii ale energiei. Drept consecință, funcția Green a electronului, în spațiul real, se descompune exponențial (în locul unei legi polinomiale pentru cazul grafenei curate).  $U_0$  corespunde transformatei Fourier a potențialului impurității, care poate fi de rază scurtă sau lungă (ecranat sau neecranat). Noi am considerat impurități de rază scurtă care rezultă din defectele structurale localizate din rețeaua de tip fagure de miere. Acest tip de impurități sunt aproximativ pe scala de lungime a constantei de rețea, când este acceptabil să aproximăm  $U(\vec{k}) = U_0$ , o constantă reală. Defectele punctiforme pot nuclea câteva stări de electroni în vecinătatea lor, ceea ce duce la schimbarea densității de electroni și la o amplificare a densității de stări la punctele Dirac, contrar cazului grafenei curate în care densitatea de stări tinde către zero.

Potențialul chimic  $v$ -a varia puțin în intervalul de temperaturi de la  $T = 0$  K până la temperatura camerei, în cazul nostru  $\mu = E_F$  pentru  $T = 0$  K și  $\mu = 0.7E_F$  pentru  $T = 300$  K, unde  $E_F$  este energia Fermi. Ținând cont de această variație, în Fig. 3.2.1 am plotat dependența de temperatură a susceptibilității statice de spin pentru două concentrații de impurități adimensionale,  $\eta < \eta_c$  și  $\eta > \eta_c$ . Unde,  $\eta_c$  este o valoare critică a concentrației de impurități pe care am determinat-o analitic. Susceptibilitatea de spin are valori finite, nenule, la  $T = 0$  K datorită faptului că, în grafenele dezordonate, aproape de punctul Dirac, densitatea de stări este amplificată de către impurități în loc să fie suprimată atunci când  $|E|$  ( $E \rightarrow 0$ ), rezultat valabil pentru cazul grafenei curate. În Fig. 3.2.2 am plotat dependența de temperatură a susceptibilității de spin pentru mai multe valori a concentrației de impurități adimensionale. Observăm două comportamente diferite. Dacă gradul de dezordine este mai mic decât valoarea critică  $\eta_c$  (pentru valorile folosite  $\eta_c = 0.031$ ), dependența de temperatură a susceptibilității de spin pornește dintr-un singur punct, care este determinat în mare de energia Fermi. Dacă gradul de dezordine este mărit ( $\eta > \eta_c$ ), comportamentul la  $T = 0$  K este diferit, fiind dependent de dezordine. Acest comportament rămâne valabil și atunci când banda interzisă tinde spre zero. Acest tip de dependență de temperatură a susceptibilității statice de spin ar putea fi un

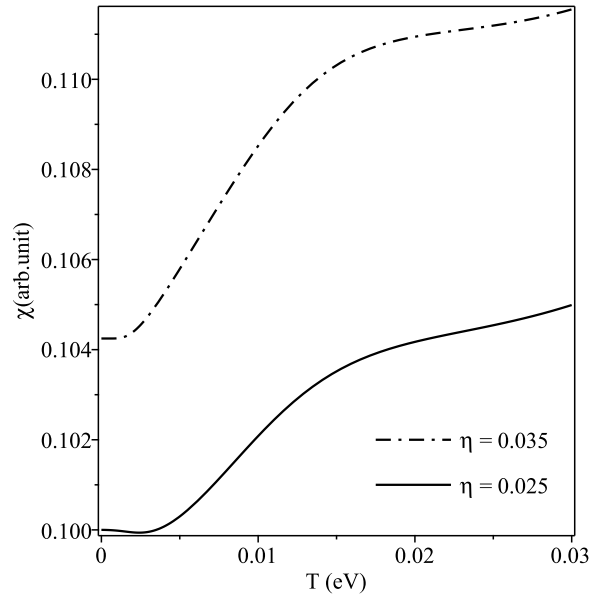


Figura 3.2.1: Dependenta de temperatură a susceptibilității statice de spin pentru:  $\eta = 0.035$  ( $\eta > \eta_c$ ), și  $\eta = 0.025$  ( $\eta < \eta_c$ ), folosind:  $\Delta = 0.05$  eV;  $E_F = 0.1$  eV;  $E_c = 1$  eV

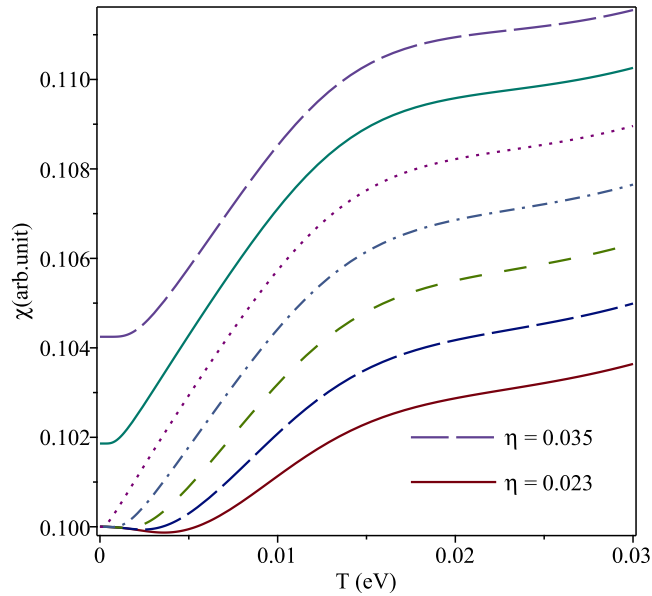


Figura 3.2.2: Dependenta de temperatură a susceptibilității statice de spin pentru mai multe valori ale lui  $\eta$  (cu un increment de 0.002). Curba inferioară corespunde valorii  $\eta = 0.023$ , curba superioară valorii  $\eta = 0.035$ , iar cea punctată valorii critice  $\eta_c = 0.031$ , folosind:  $\Delta = 0.05$  eV;  $E_F = 0.1$  eV,  $E_c = 1$  eV.

test adițional pentru prezența centrelor de împrăștiere puternice în sistemele de grafene. Dar, rezultatele experimentale din Ref. [14], sunt mai apropiate de cele obținute pentru aproximația Born (împrăștiere slabe, dezordine gaussiană) în prezența unei benzi interzise decât cele pentru limita unitară; i.e., analiza din capitolul anterior Ref. [15], în care am evidențiat mai degrabă importanța benzii interzise și nu influența scăzută a dezordinii. Chiar și așa, în Ref. [14] se

presupune că prezența dezordinii este mai degrabă accidentală și nu proiectată de către autori. Modelul dezvoltat în acest capitol surprinde importanța creșterii (aproape liniare) a susceptibilității de spin cu temperatura, care este o semnătură a prezenței fermionilor Dirac prin densitatea de stări corespunzătoare (vezi Ref. [6]).

Dacă limita unitară este într-adevăr importantă, am putea observa acest comportament în viitoare măsurători experimentale prin proiectarea minuțioasă a dezordinii în sistemele de grafene. Graficul plotat pentru susceptibilitatea magnetică în funcție de temperatură dezvăluie prezența fermionilor Dirac prin partea liniară a graficului și faptul că susceptibilitatea statică de spin a grafenei crește cu temperatura și cu numărul de impurități. Acesta pare a fi un rezultat general care apare și pentru valori finite ale lui  $U_0$  [6].

### 3.3 Timpul de relaxare spin-rețea în sisteme de grafene dezordonate

Rezonanța magnetică nucleară (RMN) este o tehnică experimentală importantă pentru domeniul științific cât și pentru cel industrial. Fenomenul apare atunci când asupra nucleelor polarizate ale unei probe, de către un câmp magnetic puternic, este aplicat un alt câmp magnetic perpendicular slab care oscilează la frecvența de rezonanță care induce o tranziție în sistemul nuclear, după care este studiată relaxarea magnetică nucleară [55, 56]. Procesul de relaxare spin-rețea, când nucleele interacționează cu rețeaua pentru a reveni la un nivel de energie mai scăzut, este caracterizat de timpul de relaxare spin-rețea (într-un metal obișnuit  $1/(T_1T) \sim const$ ). În grafene, a fost raportată o deviație puternică a parametrilor RMN de la cei din metale [19, 20]. Parametrii RMN pentru sistemele de electroni Dirac tridimensionale în prezența interacțiilor orbitale și cuadrupolare au fost și ele studiate [57]. În cele ce urmează vom sumariza analiza noastră asupra timpului de relaxare spin-rețea a sistemelor de grafene în prezența dezordinii cu împrăștiere puternice (limita unitară), dar de data aceasta vom considera un sistem cu banda interzisă zero.

Densitatea de stări a fost obținută urmărind aceiași pași ca în secțiunea anterioară. Și în cazul acesta, potențialul chimic va varia puțin în intervalul de temperaturi care pleacă de la  $T = 0$  K, până la temperatura camerei ( $\mu = E_F$  pentru  $T = 0$  K și  $\mu = 0.7E_F$  pentru  $T = 300$  K), unde

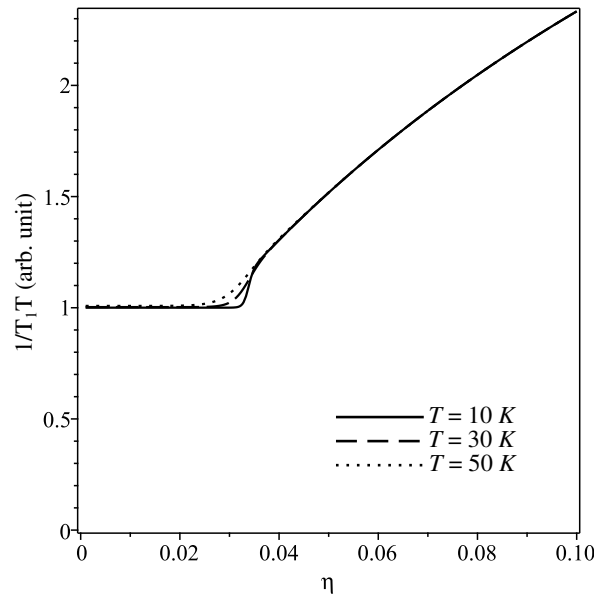


Figura 3.3.1: Rata de relaxare spin-rețea în funcție de temperatură pentru:  $T_F = 1000 K$ ,  $T_c = 10000 K$ , și pentru:  $T = 10 K$  (linie continuă),  $T = 30 K$  (linie întreruptă),  $T = 50 K$  (linie punctată)

$E_F$  este energia Fermi. Pentru că suntem interesați de efectele dezordinii asupra timpului de relaxare spin-rețea la temperaturi scăzute, vom aproxima potențialul chimic la valoarea  $\mu \simeq E_F$ .

În Fig. 3.3.1 am plotat rata de relaxare spin-rețea în funcție de dezordine  $\eta$  pentru trei temperaturi scăzute. Atât timp cât dezordinea este mică, rata de relaxare spin-rețea reproduce comportamentul unui gaz Fermi. Acest rezultat este în acord cu studiile anterioare [19, 58]. Însă, în modelul nostru, chiar și în limita de dezordinii slabe, există o valoare critică a dezordinii  $\eta_c$  care reprezintă pragul dintre comportamentul metalic (gaz Fermi) și un comportament puternic non-Fermi. Pentru parametrii folosiți, aceasta valoare este în jur de  $\eta_c = 0.03$  și este ușor dependentă de temperatură.

Descoperirile noastre arată că o dezordine mică duce la un comportament al ratei de relaxare asemănător cu cel al gazului Fermi. Acest comportament se modifică drastic o dată ce concentrația de impurități trece peste o valoare critică  $\eta_c$ . Alături de studiul anterior [18], acest rezultat ar putea fi folosit pentru a testa importanța limitei unitare în sistemele de grafene, astfel, completând și alte rezultate anterioare [7, 59].

### 3.4 Capacitatea calorică electronică în sisteme de grafene dezordonate

Interesul constant pentru materiale noi care să poată fi utilizate în aplicații tehnologice implică necesitatea studiului experimental și teoretic al acestui tip de materiale. Acestea includ și proprietățile termice, care pot avea o importanță primară în anumite aplicații. Grafena este un astfel de material și este de interes să-i fie studiate proprietățile termice (e.g., capacitatea calorică și conductivitatea termică) [22, 23]. Aproape de punctele Dirac, în mono-straturile de grafene relația de dispersie a energiei este una liniară, care duce la o dependență pătratică de temperatură a capacității calorice [60]. Contribuția majoră la capacitatea calorică este adusă de fononi, dar asta nu înseamnă că contribuția electronilor nu este importantă. În cele ce urmează vom sumariza rezultatele noastre pentru capacitatea calorică electronică a sistemelor de grafene în prezența dezordinii.

Densitatea de stări folosită pentru calculul capacității calorice electronice este cea determinată în secțiunea anterioară. În Fig. 3.4.1 am plotat capacitatea calorică scalată  $C(T, \eta)/C_0$  (cu  $C_0 = k_B^3 T_c^2 / (\pi v_F^2)$ , unde  $k_B$  este constanta Boltzmann,  $v_F$  este viteza Fermi, și  $T_c = E_c/k_B$  cu  $E_c$  fiind energia de tăiere) în funcție de temperatură pentru concentrația de impurități  $\eta = 0.003$  și pentru cazul grafenei curate. Pentru cazul grafenei curate am obținut  $C(T, \eta = 0) \sim T^2$ , un rezultat așteptat care este în acord cu Refs. [60–62]. Pe de altă parte, în prezența dezordinii și la temperaturi joase, comportamentul capacității calorice electronice se modifică în  $C(T, \eta) \sim T$ . Pentru a obține forma analitică a acestor rezultate, am introdus parametrul variabil  $x = (T_c/T)\sqrt{\eta/\ln(1/\eta)}$ . Primul caz considerat a fost atunci când  $x \ll 1$ . Acest caz ne permite să trecem rezultatul final la limita  $\eta \rightarrow 0$ , care corespunde grafenei curate. Pentru valori foarte mici ale lui  $\eta$ , am obținut:

$$C(T, \eta) \simeq \frac{9\zeta(3)k_B^3 T^2}{\pi v_F^2} \left[ 1 - \frac{1}{54\pi\zeta(3)} \left(\frac{T_c}{T}\right)^4 \frac{\eta^2}{\ln \eta} \left(1 + \frac{3\pi}{4 \ln \eta}\right) \right] \quad (3.4.1)$$

care se reduce la:

$$C(T, \eta = 0) = 9\zeta(3)C_0 \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \quad (3.4.2)$$

când  $\eta = 0$ , în acord cu Ref. [60]. Însă, datorită faptului că  $f(\eta) = (\eta^2/\ln \eta)(1 + 3\pi/(4 \ln \eta)) < 1$

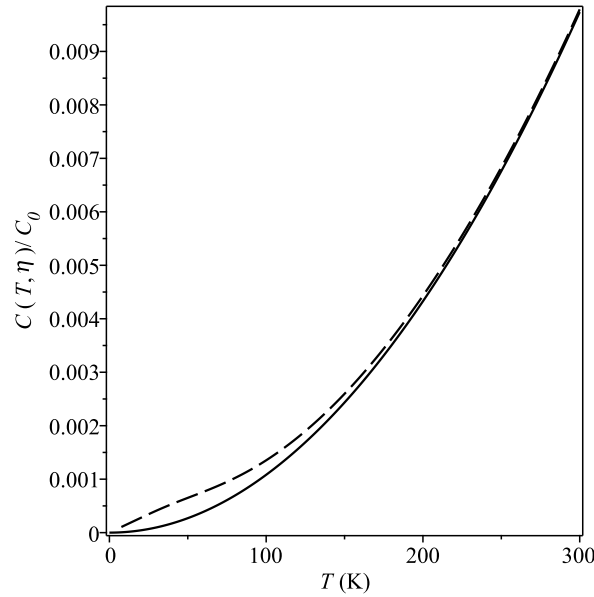


Figura 3.4.1: Capacitatea calorică electronică în funcție de temperatură cu linie continuă pentru grafena curată ( $\eta = 0$ ) și cu linie întreruptă în prezența dezordinii ( $\eta = 0.003$ ), folosind  $T_c = 10000$  K

pentru valori mici ale lui  $\eta$ , prezența dezordinii va mări capacitatea calorică electronică, chiar și pentru o dezordine foarte mică. Această mărire este foarte mică și se datorează puținelor stări de electroni care pot nuclea pe impurități. Ar trebui să menționăm că  $f(\eta) < 1$  pentru  $\eta$  între 0 și  $e^{-3\pi/4} \simeq 0.095$ . Pentru această limită superioară, dacă luăm  $T_c \sim 10000$  K și  $T \sim 300$  K (temperatura camerei), parametrul  $x \simeq 6.7$ . Putem conchide că Eq. (3.4.1) rămâne valabilă pentru grade de dezordine mult mai mici decât  $\eta = 0.095$ , pentru a rămâne în acord cu considerația  $x \ll 1$ . În cazul opus, considerăm  $x \gg 1$ . Acest caz corespunde prezenței dezordinii (cu  $\eta$  finit și pozitiv) și  $T_c/T \gg 1$  (temperaturi scăzute). Capacitatea calorică electronică va fi:

$$C(T, \eta) \simeq \frac{\pi}{3} C_0 \sqrt{-\eta \ln \eta} \frac{T}{T_c} \quad (3.4.3)$$

în acord cu graficul din Fig. 3.4.1. Stările de electroni care vor nuclea la temperaturi scăzute duc la mărirea capacității calorice electronice. O dată cu creșterea temperaturii, aceste stări vor dispărea și capacitatea calorică electronică devine comparabilă cu cea a grafenei curate.

În continuare, vom considera cazul grafenei extrinseci, când  $\mu \neq 0$ , temperatura Fermi  $T_F \sim 1000$  K. În acest caz, capacitatea calorică electronică are un potențial chimic dependent de temperatură. Însă, pentru valorile folosite aici:  $T_c \sim 10000$  K,  $T_F \sim 1000$  K, și  $\eta \sim 0.003$ ;

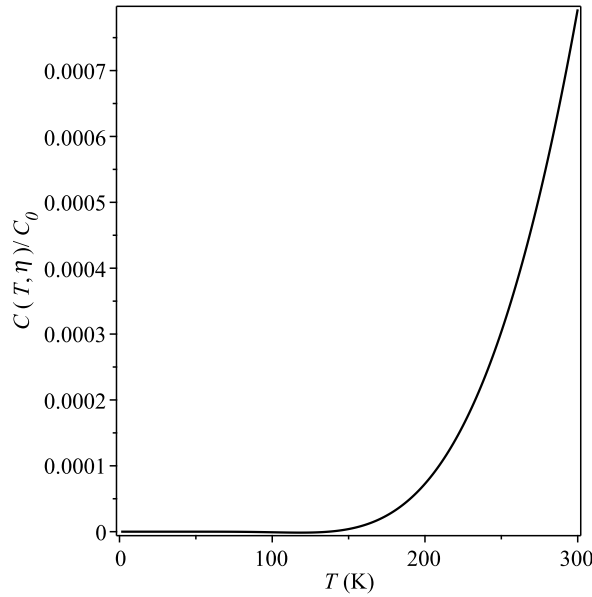


Figura 3.4.2: Capacitatea calorică electronică scalată în funcție de temperatură plotată pentru grafene dezordonate extrinseci folosind:  $T_c = 10000$  K,  $T_F = 1000$  K, și  $\eta = 0.003$

potențialul chimic la temperatura camerei este evaluat la valoarea  $\mu(T = 300 \text{ K}) \simeq 0.85 \cdot E_F$  și vom lua valoarea  $\mu \approx E_F$  în intervalul de temperaturi  $0 - 300 \text{ K}$ . În Fig. 3.4.2 am plotat capacitatea calorică scalată în funcție de temperatură pentru cazul grafenei extrinseci. În acest caz, capacitatea calorică electronică este neglijabil de mică într-un interval mare de temperaturi scăzute.

Așadar, folosindu-ne de parametrul  $x$ , am determinat că ar putea fi un comportament pătratic în temperatură al capacității electronice de spin (cu mici corecții) prin ecuația Eq (3.4.1) sau linear prin ecuația Eq (3.4.3). Am văzut că o cantitate redusă de impurități ar putea duce la o creștere a capacității calorice electronice, în timp ce, pentru cazul grafenei extrinseci, capacitatea calorică electronică a putea fi neglijabil de mică într-un interval mare de temperaturi scăzute. Am găsit un rezultat similar și în Ref. [63]. În Ref. [64], folosind metoda Random Phase Approximation, au găsit că capacitatea calorică electronică are o dependență liniară în temperatură pentru grafenele dopate. Un rezultat similar cu al nostru.

Aici se conchid studiile noastre pe sisteme de grafene dezordonate cu impurități puternice. Suportul pentru utilizarea limitei unitare se regăsește în Ref. [7]. Alături de alte studii teoretice (e.g., Ref. [59]) am propus alte trei metode de a testa dacă centrele de împrăștiere dominante sunt în limita unitară prin studiul susceptibilității statice de spin [18], timpul de relaxare spin-

rețea [21], și a capacității calorice electronice [24].



# Capitolul 4

## Dicalcogenide ale metalelor de tranziție supraconductoare

### 4.1 Introducere

Dicalcogenidele ale metalelor de tranziție sunt o clasă de straturi cvasi-bidimensionale, legate prin forțe de tip van der Waals, care au o istorie bogată care începe cu mai bine de 50 de ani în urmă [25]. Sinteza primului mono-strat de grafenă [1] a demonstrat că materialele bidimensionale de sine stătătoare pot exista și, în plus, că este un material excepțional cu proprietăți remarcabile. Această descoperire a revigorat cercetările care se desfășurau pe dicalcogenidele ale metalelor de tranziție. Interesul în această clasă de materiale se datorează implicațiilor teoretice și experimentale (precum aplicații în nano-electronică [65]). La temperaturi scăzute, aceste materiale manifestă supraconductibilitate de tip *s-wave* și stările de supraconductibilitate co-exista cu undele de densitate de sarcină [26]. Alte studii au scos la iveală proprietăți asemănătoare cu cele a supraconductorilor de temperatură înaltă. Pe de altă parte, în regiunea unde banda interzisă a undele de densitate de sarcină dispăre, sunt create cvasi-particule fermioni Dirac. În acest caz, supraconductibilitatea este dată de aceste particule care formează perechi Cooper mediate de fononi [27, 28]. Acestea seamănă cu proprietățile supraconductoare ale grafenei [29, 30]. Superconductibilitatea în dicalcogenidele ale metalelor de tranziție a fost subiectul multor studii [66–68]. În acest capitol vom sumariza rezultatele găsite pentru dicalcogenidele ale metalelor de tranziție supraconductoare pe un substrat.

În prezența unui substrat, apare o asimetrie în Hamiltonian. Aceasta poate ridica degenerarea de la punctele Dirac, ceea ce duce la deschiderea unei benzi interzise non-supraconductoare  $E_0$  în spectrul energetic [20, 31]. Aproape de punctele Dirac, aceasta duce la spectrul ”masiv” cu

bandă interzisă, cazul propus în acest studiu și nu spectrul "nemasiv" cu bandă interzisă [13] folosit în Ref. [32] pentru a discuta ecuația benzii interzise, temperatura critică, și raportul Geilikman-Kresin [33, 34]. Vom sumariza efectele pe care le are un substrat asupra benzii supraconductoare interzise la  $T = 0$  K și aproape de temperatura critică. Vom prezenta și rezultatele pentru căldura specifică, saltul căldurii specifice și câmpul critic.

## 4.2 Concepte generale

În 1911, H. Kamerlingh Onnes a fost cel care a descoperit supraconductibilitatea [69]. Descoperirea acestui fenomen straniu al unor metale și aliaje manifestat prin scăderea bruscă la zero a rezistivității electrice și de a intra în starea supraconductoare a acaparat atenția comunității științifice. Până la formularea unui model satisfăcător a trecut aproape un deceniu de la descoperire. Rezistivitatea electrică zero a fost demonstrată prin măsurarea căderii curentului electric în solenoide. Au conchis că ar dura mai mult de 100,000 de ani pentru ca acesta să dispară.

Din aceste experimente, oamenii de știință au descoperit că aceste materiale se comportau ca un diamagnet perfect [70]. Au mai descoperit și că la răcirea supraconductorului sub temperatura critica, câmpul magnetic este expulzat din material și nici un alt câmp magnetic nu mai reușea să-l penetreze. Acest fenomen a fost numit efectul Meissner și este sugerat că diamagnetismul perfect este un efect distinctiv al stării supraconductoare. Dar acest efect are loc doar pentru câmpuri magnetice sub o anumită valoare, deasupra căreia starea supraconductoare este distrusă. Tranziția în jurul acestei valori critice este reversibilă.

Primii care au reușit să descrie conductivitatea perfectă și efectul Meissner au fost frații London în 1935 (ecuațiile London) [71]. Folosindu-se de rezultatele fraților London, Pippard a propus un model îmbunătățit [72]. Utilizând acest model, au observat că puteau fi datele experimentale pentru staniu și aluminiu [73]. Ecuațiile London au dus și la definirea a altei proprietăți fundamentale a supraconductorilor, adâncimea de penetrare London  $\lambda_L$ . Această lungime măsoară adâncimea de penetrare a câmpului magnetic extern.

Pe lângă proprietățile magnetice, supraconductorii au și proprietăți termice distincte. În câmp zero, tranziția de la starea supraconductoare este acompaniată de o discontinuitate în căldura

specifică, care pentru stările non-supraconductoare variază liniar cu temperatura. În supraconductori, exact sub temperatura critică  $T_c$ , căldura specifică electronică crește după care scade exponențial spre zero când  $T \rightarrow 0$  [74].

### 4.2.1 Superconductibilitatea în dicalcogenidele ale metalelor de tranziție

Dicalcogenidele ale metalelor de tranziție au o istorie lungă și bogată. Cercetările deja desfășurate au dovedit valoarea lor din perspectiva teoretică și a aplicabilității lor. Are nenumăratele proprietăți demne de remarcat, precum efectele anormale ale impurităților asupra fazei supraconductoare [75]. De remarcat este și faptul că proprietățile anormale ale dicalcogenidelor ale metalelor de tranziție nu depind de probă, pentru că tind a fi materiale foarte curate [28]. Totuși, interpretarea datelor experimentale este foarte controversată pentru că în teoria lui Peierls unidimensională, undele de densitate de sarcină sunt formate datorită suprafețelor Fermi de tip nested, deoarece acest nesting în două dimensiuni nu este perfect, aceasta poate duce la părți cu bandă interzisă zero a suprafeței Fermi. Se pare că nu există un consens nici între rezultatele obținute prin diferite metode experimentale [28].

Discuția noastră ce urmează va fi bazată pe Ref. [28], în care au propus un model în care suprafața fermi este complet decalată. Bandă interzisă a unei de densitate de sarcină este similară cu zona Brillouin a grafenei cu noduri la punctele de trecere a benzilor  $\pi$ . Acest model a fost deja folosit cu succes pentru a descrie multiple proprietăți a dicalcogenidelor ale metalelor de tranziție bidimensionale [76].

În mod obișnuit, perechile Cooper se formează pe suprafața mării Fermi, dar în acest caz se formează în punctele de noduri. Cuplul electron-fonon este considerat a fi de natură piezoelectrică. Din ecuația benzii interzise, pentru  $\mu = 0$ , au descoperit că are un punct cuantic critic, care este o proprietate generală a lichidelor nodale. Când este modificat parametrul  $\mu$ , banda interzisă supraconductoare  $\Delta_S$  este influențată puternic și duce la suprimarea punctelor cuantice critice. Au fost găsite două regimuri pentru scalarea  $\Delta_S/\mu$ : un regim de cuplu slab ("Fermi liquid") și un regim de cuplu puternic. Saltul căldurii specifice din modelul BCS este regăsit pentru regimul lichidelor Fermi.

### 4.3 Proprietăți termodinamice ale dicalcogenidelor ale metalelor de tranziție pe un substrat

#### a) Banda interzisă supraconductoare

Am analizat banda interzisă supraconductoare  $\Delta_s$  la temperatura zero și temperaturi non-zero. La  $T = 0 K$ , la punctele Dirac ( $\mu = 0$ ) am obținut următorul rezultat pentru banda interzisă supraconductoare:

$$\Delta_s = v_F k_c \sqrt{\left(1 - \frac{g_c}{g}\right)^2 - \left(\frac{E_0}{v_F k_c}\right)^2} \quad (4.3.1)$$

unde  $v_F$  este viteza Fermi,  $k_c$  este momentul de tăiere,  $E_0$  reprezintă banda interzisă indusă de către substrat,  $g$  este constanta de cuplare, și cu  $g_c = 2\pi v_\Delta / k_c$ , cu condiția  $g_c/g < 1$ . În absența substratului, când  $E_0 = 0$ , re-obținem rezultatul din [28]. Însă, trebuie observat că în cazul nostru banda interzisă supraconductoare dispare când  $g_c/g = 1 - (E_0/v_F k_c)$ , altfel, în absența substratului dispare când  $g_c/g = 1$ . Acest lucru înseamnă că prezența substratului reduce valoarea benzii interzise supraconductoare. În afara punctelor Dirac ( $\mu \neq 0$ ), banda interzisă supraconductoare are o structură mult mai complicată. Aici, distingem două cazuri:

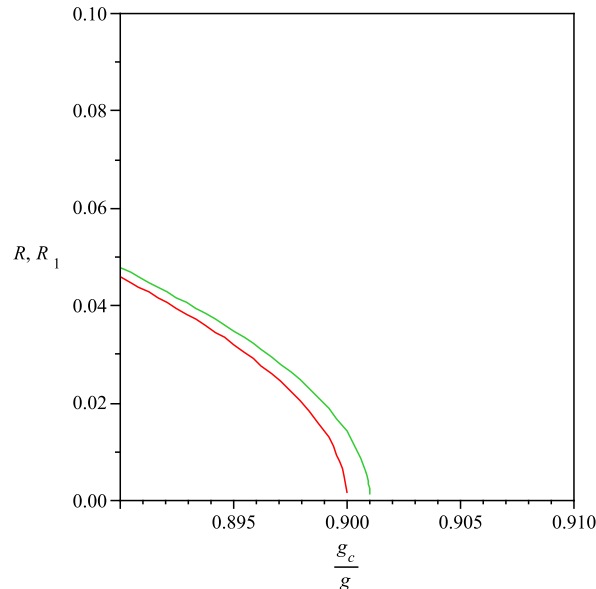


Figura 4.3.1: Raportul  $R = \Delta_s/v_F k_c$  în funcție de  $g_c/g$  pentru  $\mu = 0$  (curba inferioară -  $R_1$ ) și  $\mu/v_F k_c = 0.001$  (curba superioară -  $R$ ). În ambele cazuri am folosit  $E_0/v_F k_c = 0.01$

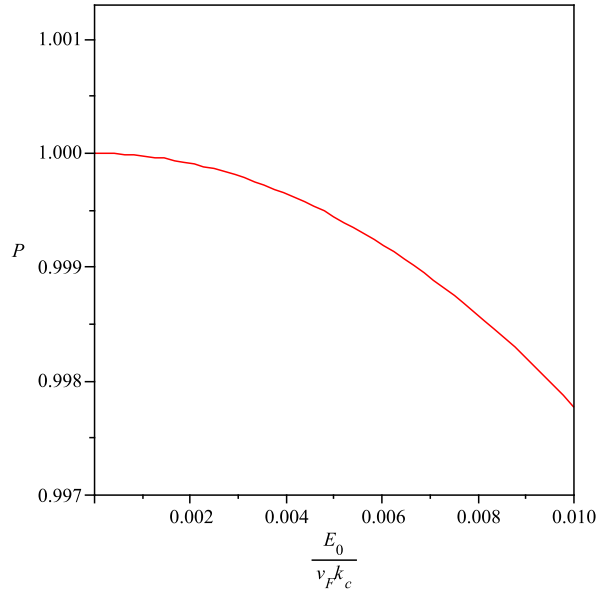


Figura 4.3.2: Raportul  $P = \Delta_s(\mu, E_0)/\Delta_s(\mu, E_0 = 0)$  în funcție de energia scalată  $E_0/v_F k_c$ , pentru  $g_c/g = 0.85$  și  $\mu/v_F k_c = 0.001$

I.) Pentru  $\mu \ll E_0$  și  $\mu \ll \Delta_s$ , banda interzisă supraconductoare a fost evaluată drept:

$$\Delta_s \simeq \frac{v_F k_c}{\sqrt{2}} \sqrt{\left(1 - \frac{g_c}{g}\right)^2 + \left(\frac{\mu}{v_F k_c}\right)^2} \sqrt{1 - \frac{2E_0^2}{a} + \sqrt{1 + \left(\frac{2\mu E_0}{a}\right)^2}} \quad (4.3.2)$$

unde am folosit notația  $a = (v_F k_c)^2 (1 - g_c/g)^2 + \mu^2$ . În Fig. 4.3.1 am plotat raportul  $R = \Delta_s/v_F k_c$  în funcție de  $g_c/g$  pentru  $\mu = 0$  (curba inferioară) și pentru  $\mu \neq 0$  (curba superioară), folosind următorii parametri:  $\mu/v_F k_c = 0.001$  și  $E_0/v_F k_c = 0.01$ . Când  $\mu \neq 0$ , banda interzisă supraconductoare este mai mare deoarece este mai favorabilă formării de perechi.

În Fig. 4.3.2 am plotat raportul  $P = \Delta_s(\mu, E_0)/\Delta_s(\mu, E_0 = 0)$  în funcție de energia scalată  $E_0/v_F k_c$ , utilizând următorii parametri:  $g_c/g = 0.85$ , și  $\mu/v_F k_c = 0.001$ . Observăm, din nou, că prezența substratului diminuează valoarea benzii interzise supraconductoare și în cazul când  $\mu \neq 0$ .

II.) Pentru  $\mu \gg E_0$  și  $\mu \gg \Delta_s$ , banda interzisă supraconductoare va fi:

$$\Delta_s \simeq 2\mu \exp \left[ \frac{2\pi v_\Delta v_F}{\mu} (g_c^{-1} - g^{-1}) - 1 - \frac{E_0^2}{2\mu^2} \right] \quad (4.3.3)$$

Având banda interzisă la temperatura zero, am calculat banda interzisă supraconductoare

la  $T \neq 0$  K. Aici, distingem două cazuri. Considerând  $\mu > E_0$ ,  $\beta_c(\mu - E_0)/2 \gg 1$ , și  $\beta_c(\mu + E_0)/2 \gg 1$  am găsit:

$$\Delta_s(T) \simeq \frac{\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}}{\sqrt{\frac{1}{2(\mu^2 - E_0^2)} + \frac{7\zeta(3)}{8(\pi k_B T_c)^2}}} \quad (4.3.4)$$

pentru  $T < T_c$  și  $T$  aproape de  $T_c$ ; unde  $\beta = 1/k_B T$  și  $k_B$  este constanta lui Boltzmann (la  $T = T_c$ :  $\beta = \beta_c$ , unde  $T_c$  este temperatura critică). Păstrând aceleași condiții pentru temperatură, dar în limita opusă  $\beta\mu \ll 1$ , banda interzisă supraconductoare va fi (unde  $\Delta_0 = \sqrt{\alpha}(1 - g_c/g)$ ):

$$\Delta_s(T) \simeq 2\sqrt{\frac{T_c - T}{T_c}} \sqrt{\frac{\Delta_0}{\beta_c} + \frac{\mu^2 - E_0^2}{2}} \quad (4.3.5)$$

Cu  $\beta_c\mu \ll 1$ , am obținut temperatura critică:

$$T_c = \frac{\Delta_0 + \sqrt{\Delta_0^2 + (\mu^2 - E_0^2) \ln 4}}{\ln 16} \quad (4.3.6)$$

Observăm că substratul influențează banda interzisă supraconductoare, cât și temperatura critică, prin reducerea efectului potențialului chimic.

## b) Căldura specifică

Saltul căldurii specifice este definit drept diferența dintre căldura specifică supraconductoare și cea normală:  $\Delta C = C_{V_S} - C_{V_N}$ . Am utilizat Eq. (4.3.4) pentru a evalua  $\Delta C|_{T=T_c}$  în limita cuplajului slab ( $\beta_c\mu \gg 1$ ). Așadar, am obținut:

$$\Delta C|_{T=T_c} \simeq \frac{k_B}{2\pi v_\Delta v_F \beta_c} \frac{\mu}{\frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} + \frac{1}{2\beta_c^2(\mu^2 - E_0^2)}} \quad (4.3.7)$$

Am calculat și căldura specifică normală și raportul  $\Delta C/C_{V_N}|_{T=T_c}$ :

$$C_{V_N}|_{\beta=\beta_c} \simeq \frac{\pi k_B \mu}{3v_\Delta v_F \beta_c}, \quad \frac{\Delta C}{C_{V_N}} \Big|_{T=T_c} \simeq \frac{3}{2\pi^2} \frac{1}{\frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} + \frac{1}{2\beta_c^2(\mu^2 - E_0^2)}} \quad (4.3.8)$$

În limita cuplajului puternic ( $\beta_c \mu \ll 1$ ), folosind Eq. (4.3.5) obținem:

$$\Delta C|_{T=T_c} \simeq \frac{8k_B}{\pi v_\Delta v_F} \left( \frac{\ln 2}{\beta_c} \right)^2 \left[ 1 + \frac{\beta_c^2 (\mu^2 - E_0^2)}{4 \ln 2} \right] \quad (4.3.9)$$

În acest caz, căldura specifică normală și raportul  $\Delta C/C_{V_N}|_{T=T_c}$  sunt:

$$C_{V_N}|_{\beta=\beta_c} \simeq \frac{9\zeta(3)k_B}{\pi v_\Delta v_F \beta_c^2}, \quad \frac{\Delta C}{C_{V_N}} \Big|_{T=T_c} \simeq \frac{8(\ln 2)^2}{9\zeta(3)} \left[ 1 + \frac{\beta_c^2 (\mu^2 - E_0^2)}{4 \ln 2} \right] \quad (4.3.10)$$

Având aceste rezultate, observăm că prezența substratului diminuează efectul potențialului chimic.

### c) Câmpul critic

Câmpul critic al unui material supraconductor este câmpul peste care starea supraconductoare nu poate exista. Acest câmp este legat strâns de temperatura critică  $T_c$  și în câmp zero este legat de diferența dintre energiile libere supraconductoare și a stărilor normale. Tranziția este reversibilă și starea supraconductoare revine atunci când câmpul magnetic scade sub câmpul critic. Pentru  $\mu = 0$ , obținem pentru câmpul critic, aproape de  $T_c$ :

$$H_c \simeq \sqrt{\frac{8}{v_\Delta v_F \beta_c}} \left( \Delta_0 - \frac{\beta_c E_0^2}{2} \right) \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right) \quad (4.3.11)$$

Se poate observa dependența liniară de temperatură a câmpului critic și faptul că prezența substratului reduce magnitudinea câmpului critic. În cazul când  $\mu \neq 0$ , aproape de  $T_c$ , câmpul critic obținut este:

$$H_c \simeq \sqrt{\frac{8}{v_\Delta v_F \beta_c} \left[ 1 + \frac{1}{6} (\beta_c \mu)^2 \right]} \left[ \Delta_0 + \frac{\beta_c}{2} (\mu^2 - E_0^2) \right] \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right) \quad (4.3.12)$$

În acest caz observăm o creștere a factorului din față la  $(1 - T/T_c)$  comparativ cu cel din Eq. (4.3.11), acest lucru se traduce printr-o creștere a câmpului critic. Acesta este un rezultat așteptat datorită faptului că un potențial chimic nenul este asociat cu un număr crescut de perechi de particule în starea supraconductoare.

#### d) Concluzii

Am sumarizat rezultatele obținute pentru mai multe proprietăți termodinamice a dicalcogenide-  
lor ale metalelor de tranziție pe un substrat. Prezența benzii interzise non-supraconductoare  $E_0$   
modifică banda interzisă supraconductoare  $\Delta_s$ . Am văzut că în prezența substratului, banda  
interzisă supraconductoare la temperatura zero scade. În cazul în care potențialul chimic nu  
este în punctele Dirac (i.e.,  $\mu \neq 0$ ), observăm o creștere a energiei de împerechere datorită  
unei creșteri a numărului de perechi de particule. La temperaturi diferite de zero, aproape de  
temperatura critică  $T_c$ , observăm că substratul influențează banda interzisă supraconductoare  
prin reducerea efectului potențialului chimic asupra benzii interzise. Temperatura critică este  
influențată în același mod. După ce am obținut rezultatele pentru căldura specifică și saltul  
căldurii specifice la  $T = T_c$ , am observat că, iarăși, substratul le influențează prin diminuarea  
efectului potențialului chimic.

Când am analizat câmpul critic, prima dată am considerat potențialul chimic la punctele Dirac  
( $\mu = 0$ ) și am observat că substratul reduce magnitudinea câmpului critic. Un potențial chimic  
nenul are un efect pozitiv asupra câmpului critic, dar efectul său este diminuat de prezența  
substratului. În ambele cazuri am observat o dependență liniară de temperatură a câmpului  
critic, dar trebuie să notăm faptul că temperatura critică din Eq. (4.3.11) este diferită de cea  
din Eq. (4.3.12). Anume, în primul caz temperatura critică este influențată doar de substrat  
(i.e.,  $T_c = T_c(E_0)$ ), în timp ce în al doilea caz este influențată de substrat și potențialul chimic  
(i.e.,  $T_c = T_c(E_0, \mu)$ ).



# Capitolul 5

## Concluzii și perspective

Domeniul materialelor bidimensionale este încă în plină dezvoltare și nevoia de teorii mai bune pentru a înțelege datele experimentale și pentru a prezice proprietățile noilor materiale nu va înceta să existe în curând. În această lucrare am dorit să oferim modele teoretice pentru mai multe proprietăți ale grafenelor și dicalcogenidelor ale metalelor de tranziție.

Capitolul 2 urmărește studiul susceptibilității statice de spin a sistemelor de grafene în prezența dezordinii și a unei benzi interzise, cu împrăstieri slabe. Am lucrat în aproximația Born și aproximația matricii  $T$  pentru a determina self-energia și densitatea de stări a unui sistem. Utilizând densitatea de stări am analizat susceptibilitatea statică de spin. Am reușit să obținem un acord calitativ între rezultatele noastre și datele experimentale. Modelul nostru a reușit să surprindă cum anumite aspecte influențează susceptibilitatea statică de spin.

Capitolul 3 urmărește studiul a mai multor proprietăți a sistemelor de grafene în prezența dezordinii cu împrăstieri puternice (limita unitară). Așadar, acesta este împărțit în mai multe secțiuni:

Secțiunea 3.2 studiază susceptibilitatea statică de spin, pentru care am văzut că are o valoare nenulă la temperatura zero și două comportamente diferite. Anume, dacă concentrația de impurități este sub o valoare critică, susceptibilitatea statică de spin pornește de la aceeași valoare; peste valoare critică, susceptibilitatea statică de spin la  $T = 0$  K este dependentă de concentrația de impurități.

Secțiunea 3.3 studiază timpul de relaxare spin-rețea. Am văzut că avem o valoare critică a concentrației de impurități care diferențiază două comportamente diferite. O dezordine

slabă duce la un comportament asemenea gazului Fermi a timpului de relaxare spin-rețea, în timp ce, peste această valoare critică, comportamentul se modifică drastic.

Secțiunea 3.4 studiază capacitatea calorică. Am arătat că, capacitatea calorică poate avea o dependență pătratică sau liniară de temperatură (care depinde de un parametru definit  $x$ ) și că o cantitate mică de impurități ar putea crește valoarea capacității calorice electronice, în timp ce, în cazul grafenei extrinseci, valoarea acesteia ar putea fi neglijabil de mică într-un interval mare de temperaturi.

Aceste rezultate ar putea fi folosite pentru a testa dacă centri de împrăștiere sunt în limita unitară și dacă am proiecta cu atenție dezordinea în sistemele de grafene, am putea verifica și experimental dacă limita unitară este într-adevăr potrivită pentru descrierea sistemelor de grafene. Trebuie menționat faptul că limita unitară a fost folosită cu succes pentru a descrie date experimentale. De asemenea, studiile recente din Ref. [77] sunt în acord cu rezultate noastre obținute pentru capacitatea calorică electronică.

Capitolul 4 este dedicat studiului proprietăților unui alt sistem bidimensional, dicalcogenidele ale metalelor de tranziție. Considerând spectrul "masiv" cu bandă interzisă, am studiat cum influențează un substrat banda interzisă supraconductoare, căldura specifică și saltului căldurii specifice, precum și câmpului critic. Substratul micșorează banda interzisă supraconductoare atunci când considerăm potențialul chimic zero, restul proprietăților sunt influențate prin reducerea efectului potențialului chimic.

Un domeniu științific în continuă creștere va avea întotdeauna loc de îmbunătățiri, fie prin explorarea a noi metode [78] sau prin îmbunătățirea modelelor deja existente. Rezultate obținute în Capitolul 2 ar putea suferi modificări dacă am merge dincolo de metodele utilizate, e.g., prin folosirea aproximației Born self-consistente sau aproximația matricii  $T$  self-consistente. În Capitolul 3, modelul ar putea fi îmbunătățit dacă am considera efectele interacției electron-electron asupra densității de stări.

# Bibliografie

- [1] A. K. Geim and K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nature Materials*, 6(3):183–191, 2007.
- [2] P. R. Wallace. The band theory of graphite. *Physical Review*, 71(9):622–634, 1947.
- [3] D P DiVincenzo and E J Mele. Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds. *Physical Review B*, 29(4):1685–1694, 1984.
- [4] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M R Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81(1):109–162, 2009.
- [5] S Das Sarma, Shaffique Adam, E H Hwang, and Enrico Rossi. Electronic transport in two-dimensional graphene. *Reviews of Modern Physics*, 83(2):407–470, 2011.
- [6] N M R Peres, F Guinea, and A H Castro Neto. Electronic properties of disordered two-dimensional carbon. *Physical Review B*, 73(12):125411, 2006.
- [7] P. M. Ostrovsky, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin. Electron transport in disordered graphene. *Physical Review B*, 74(23):235443, 2006.
- [8] Mikito Koshino and Tsuneya Ando. Diamagnetism in disordered graphene. *Physical Review B*, 75(23):235333, 2007.
- [9] Ben Yu-Kuang Hu, E. H. Hwang, and S. Das Sarma. Density of states of disordered graphene. *Physical Review B*, 78(16):165411, 2008.
- [10] E H Hwang and S Das Sarma. Screening-induced temperature-dependent transport in two-dimensional graphene. *Physical Review B*, 79(16):165404, 2009.
- [11] S. G. Sharapov and A. A. Varlamov. Anomalous growth of thermoelectric power in gapped graphene. *Physical Review B*, 86(3):035430, 2012.

- [12] Aaron Bostwick, Taisuke Ohta, Jessica L. McChesney, Konstantin V. Emtsev, Thomas Seyller, Karsten Horn, and Eli Rotenberg. Symmetry breaking in few layer graphene films. *New Journal of Physics*, 9(10):385–385, 2007.
- [13] L Benfatto and E Cappelluti. Spectroscopic signatures of massless gap opening in graphene. *Physical Review B*, 78(11):115434, 2008.
- [14] T. L. Makarova, A. L. Shelankov, A. A. Zyrianova, A. I. Veinger, T. V. Tisnek, E. Lähderanta, A. I. Shames, A. V. Okotrub, L. G. Bulusheva, G. N. Chekhova, D. V. Pinakov, I. P. Asanov, and Ž. Šljivančanin. Edge state magnetism in zigzag-interfaced graphene via spin susceptibility measurements. *Scientific Reports*, 5(1):13382, 2015.
- [15] I. Grosu and T.L. Biter. Spin susceptibility of disordered gapped graphene systems. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 86:154–157, 2017.
- [16] 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. *Nature*, 438(7065):197–200, 2005.
- [17] Yuanbo Zhang, Yan-Wen Tan, Horst L. Stormer, and Philip Kim. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry’s phase in graphene. *Nature*, 438(7065):201–204, 2005.
- [18] I. Grosu and T.-L. Biter. Spin susceptibility as a test of unitary limit in disordered graphene systems. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 97:409–413, 2018.
- [19] Balázs Dóra and Ferenc Simon. Unusual Hyperfine Interaction of Dirac Electrons and NMR Spectroscopy in Graphene. *Physical Review Letters*, 102(19):197602, 2009.
- [20] Mircea Crisan, Ioan Grosu, and Ionel Țifrea. NMR parameters in gapped graphene systems. *The European Physical Journal B*, 89(6):140, 2016.
- [21] I. Grosu and T. L. Biter. Spin-lattice Relaxation Time in Disordered Graphene Systems. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 31(6):1807–1811, 2018.

- [22] Eric Pop, Vikas Varshney, and Ajit K. Roy. Thermal properties of graphene: Fundamentals and applications. *MRS Bulletin*, 37(12):1273–1281, 2012.
- [23] F. Ma, H. B. Zheng, Y. J. Sun, D. Yang, K. W. Xu, and Paul K. Chu. Strain effect on lattice vibration, heat capacity, and thermal conductivity of graphene. *Applied Physics Letters*, 101(11):111904, 2012.
- [24] I. Grosu and T. L. Biter. Electronic heat capacity in disordered graphene systems. *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, 382(41):3042–3045, 2018.
- [25] Stephen J. McDonnell and Robert M. Wallace. Atomically-thin layered films for device applications based upon 2D TMDC materials. *Thin Solid Films*, 616:482–501, 2016.
- [26] R. L. Withers and J. A. Wilson. An examination of the formation and characteristics of charge-density waves in inorganic materials with special reference to the two- and one-dimensional transition- metal chalcogenides. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 19(25):4809–4845, 1986.
- [27] A. H. Castro Neto. Charge density wave, superconductivity, and anomalous metallic behavior in 2D transition metal dichalcogenides. *Physical Review Letters*, 86(19):4382–4385, 2001.
- [28] B. Uchoa, G. G. Cabrera, and A. H. Castro Neto. Nodal liquid and s -wave superconductivity in transition metal dichalcogenides. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 71(18):184509, may 2005.
- [29] N. B. Kopnin and E. B. Sonin. BCS Superconductivity of Dirac Electrons in Graphene Layers. *Physical Review Letters*, 100(24):246808, 2008.
- [30] Teemu J. Peltonen, Risto Ojajärvi, and Tero T. Heikkilä. Mean-field theory for superconductivity in twisted bilayer graphene. *Physical Review B*, 98(22):220504, 2018.
- [31] S. Y. Zhou, G. H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. De Heer, D. H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and A. Lanzara. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene. *Nature Materials*, 6(10):770–775, 2007.

- [32] Ioan Grosu. Role of Substrate in Transition Metal Dichalcogenides Superconductivity. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 33(10):3009–3013, 2020.
- [33] B.T. Geilikman and V.Z. Kresin. About the connection between the transition temperature and the energy gap for superconductors with strong coupling. *Physics Letters A*, 40(2):123–124, 1972.
- [34] B. Krunavakarn, P. Udomsamuthirun, S. Yoksan, I. Grosu, and M. Crisan. The gap-to-Tc ratio of a van Hove superconductor. *Journal of Superconductivity*, 11(2):271–273, 1998.
- [35] K S Novoselov, A K Geim, S V Morozov, D Jiang, Y Zhang, S V Dubonos, I V Grigorieva, and A A Firsov. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 306(5696):666–669, 2004.
- [36] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim. Two-dimensional atomic crystals. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 102(30):10451–10453, 2005.
- [37] R Peierls. Quelques propriétés typiques des corps solides. *Ann. Inst. Henri Poincaré*, 5:177–222, 1935.
- [38] L. D. Landau. On the theory of phase transitions. *Zh. Eks. Teor. Fiz.*, 7(1937):19–32, 1937.
- [39] Jw W McClure. Band Structure of Graphite and de Haas-van Alphen Effect. *Physical Review*, 108(3):612–618, 1957.
- [40] J. C. Slonczewski and P. R. Weiss. Band Structure of Graphite. *Physical Review*, 109(2):272–279, 1958.
- [41] P. R. Schroeder, M. S. Dresselhaus, and A. Javan. Location of Electron and Hole Carriers in Graphite from Laser Magnetoreflexion Data. *Physical Review Letters*, 20(23):1292–1295, 1968.

- [42] H Rydberg, M Dion, N Jacobson, E Schroder, P Hyldgaard, S I Simak, D C Langreth, and B I Lundqvist. Van der Waals density functional for layered structures. *Phys. Rev. Lett.*, 91(12):126402, 2003.
- [43] Leonardo Spanu, Sandro Sorella, and Giulia Galli. Nature and Strength of Interlayer Binding in Graphite. *Physical Review Letters*, 103(19):196401, 2009.
- [44] Xiaobin Chen, Fuyang Tian, Clas Persson, Wenhui Duan, and Nan-xian Chen. Interlayer interactions in graphites. *Scientific Reports*, 3(1):3046, 2013.
- [45] E. Mostaani, N. D. Drummond, and V. I. Fal’ko. Quantum Monte Carlo Calculation of the Binding Energy of Bilayer Graphene. *Physical Review Letters*, 115(11):115501, 2015.
- [46] Celso R C Rêgo, Luiz N Oliveira, Polina Tereshchuk, and Juarez L F Da Silva. Comparative study of van der Waals corrections to the bulk properties of graphite. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 27(41):415502, 2015.
- [47] Irina V. Lebedeva, Alexander V. Lebedev, Andrey M. Popov, and Andrey A. Knizhnik. Comparison of performance of van der Waals-corrected exchange-correlation functionals for interlayer interaction in graphene and hexagonal boron nitride. *Computational Materials Science*, 128:45–58, 2017.
- [48] Ze Liu, Jefferson Zhe Liu, Yao Cheng, Zhihong Li, Li Wang, and Quanshui Zheng. Inter-layer binding energy of graphite: A mesoscopic determination from deformation. *Physical Review B*, 85(20):205418, 2012.
- [49] Wen Wang, Shuyang Dai, Xide Li, Jiarui Yang, David J Srolovitz, and Quanshui Zheng. Measurement of the cleavage energy of graphite. *Nature Communications*, 6(1):7853, 2015.
- [50] M.I. Katsnelson and K.S. Novoselov. Graphene: New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics. *Solid State Communications*, 143(1-2):3–13, 2007.
- [51] Daniel R. Cooper, Benjamin D’Anjou, Nageswara Ghattamaneni, Benjamin Harack, Michael Hilke, Alexandre Horth, Norberto Majlis, Mathieu Massicotte, Leron Vands-

- burger, Eric Whiteway, and Victor Yu. Experimental Review of Graphene. *ISRN Condensed Matter Physics*, 2012:1–56, 2012.
- [52] Gerald D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Springer US, Boston, MA, 2000.
- [53] Tsuneya Ando. Screening Effect and Impurity Scattering in Monolayer Graphene. *Journal of the Physical Society of Japan*, 75(7):074716, 2006.
- [54] Gerald Rickayzen. *Green's Functions and Condensed Matter*. Academic Press, 1980.
- [55] Charles P. Slichter. *Principles of Magnetic Resonance*, volume 1 of *Springer Series in Solid-State Sciences*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1990.
- [56] A. Abragam. *The principles of nuclear magnetism*. Clarendon Press, Oxford, 1961.
- [57] Hideaki Maebashi, Tomoki Hirosawa, Masao Ogata, and Hidetoshi Fukuyama. Nuclear Magnetic Relaxation and Knight Shift Due to Orbital Interaction in Dirac Electron Systems. *arXiv: 1709.02617*, pages 1–12, 2017.
- [58] S. G. Sharapov, V. P. Gusynin, and H. Beck. Magnetic oscillations in planar systems with the Dirac-like spectrum of quasiparticle excitations. *Physical Review B*, 69(7):075104, 2004.
- [59] Tomas Löfwander and Mikael Fogelström. Impurity scattering and Mott's formula in graphene. *Physical Review B*, 76(19):193401, 2007.
- [60] Oskar Vafek. Anomalous Thermodynamics of Coulomb-Interacting Massless Dirac Fermions in Two Spatial Dimensions. *Physical Review Letters*, 98(21):216401, 2007.
- [61] Wei Li and Guo Zhu Liu. Coulomb interaction and semimetal-insulator transition in graphene. *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, 374(29):2957–2963, 2010.
- [62] Pei Song He, Sung Jin Oh, Yu Chen, and Guang Shan Tian. Specific heat and magnetic susceptibility of graphene: A renormalization group study. *Communications in Theoretical Physics*, 54(5):897–907, 2010.



- [63] Mohsen Yarmohammadi. Impurity doping effects on the orbital thermodynamic properties of hydrogenated graphene, graphane, in Harrison model. *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, 380(48):4062–4069, 2016.
- [64] M. R. Ramezani, M. M. Vazifeh, Reza Asgari, Marco Polini, and A. H. MacDonald. Finite-temperature screening and the specific heat of doped graphene sheets. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 42(21):214015, 2009.
- [65] Gianluca Fiori, Francesco Bonaccorso, Giuseppe Iannaccone, Tomás Palacios, Daniel Neumaier, Alan Seabaugh, Sanjay K. Banerjee, and Luigi Colombo. Electronics based on two-dimensional materials. *Nature Nanotechnology*, 9(10):768–779, 2014.
- [66] Sudipta Koley, Narayan Mohanta, and Arghya Taraphder. Charge density wave and superconductivity in transition metal dichalcogenides. *The European Physical Journal B*, 93(5):77, 2020.
- [67] Yu Zhang, Lin Li, Jin Hua Sun, Dong Hui Xu, Rong Lü, Hong Gang Luo, and Wei Qiang Chen. Kondo effect in monolayer transition metal dichalcogenide Ising superconductors. *Physical Review B*, 101(3):35124, 2020.
- [68] Carmen Rubio-Verdú, Antonio M. García-García, Hyejin Ryu, Deung-Jang Choi, Javier Zaldívar, Shujie Tang, Bo Fan, Zhi-Xun Shen, Sung-Kwan Mo, José Ignacio Pascual, and Miguel M. Ugeda. Visualization of Multifractal Superconductivity in a Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenide in the Weak-Disorder Regime. *Nano Letters*, 20(7):5111–5118, 2020.
- [69] M. Tinkham. *Introduction to Superconductivity*. McGraw-Hill, 1996.
- [70] W. Meissner and R. Ochsenfeld. Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit. *Die Naturwissenschaften*, 21(44):787–788, 1933.
- [71] H. London and F. London. The electromagnetic equations of the supraconductor. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences*, 149(866):71–88, 1935.

- [72] Alfred Brian Pippard and William Lawrence Bragg. An experimental and theoretical study of the relation between magnetic field and current in a superconductor. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 216(1127):547–568, 1953.
- [73] A. B. Pippard. An experimental and theoretical study of the relation between magnetic field and current in a superconductor. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 216(1127):547–568, 1953.
- [74] A.L. Fetter and J.D. Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill, 1971.
- [75] D. A. Whitney, R. M. Fleming, and R. V. Coleman. Magnetotransport and superconductivity in dilute Fe alloys of NbSe<sub>2</sub>, TaSe<sub>2</sub>, and TaS<sub>2</sub>. *Physical Review B*, 15(7):3405–3423, 1977.
- [76] A. H. Castro Neto. Charge Density Wave, Superconductivity, and Anomalous Metallic Behavior in 2D Transition Metal Dichalcogenides. *Physical Review Letters*, 86(19):4382–4385, 2001.
- [77] Bobenko Nadezhda, Egorushkin Valery, and Melnikova Nataliya. Electron transport in disordered graphene and bigraphene. *Synthetic Metals*, 270(September):116590, 2020.
- [78] V. N. Davydov. Role of the Lifshitz topological transitions in the thermodynamic properties of graphene. *RSC Advances*, 10(46):27387–27400, 2020.