

Особенности временной эволюции локализованных квантовых состояний в графене

© M.J. Majid*, С.С. Савинский†, +

* University of Basrah,
IRAQ-Basrah

+ Удмуртский государственный университет,
426034 Ижевск, Россия

(Получена 15 апреля 2012 г. Принята к печати 25 апреля 2012 г.)

В гейзенберговском представлении анализируются явления интерференции квантовых состояний проводящей и валентной зон графена, возникающие для локализованных электронных волновых пакетов. Интерференция приводит к временным осцилляциям средних значений физических величин.

Известно, что при теоретическом исследовании локализованных состояний свободного электрона, являющихся решениями одночастичного релятивистского уравнения Дирака, возникают явления, связанные с понятием Zitterbewegung (циттербеверунг — ZB — пер. с нем. буквально „дрожание“, см., например [1]), которые проявляются на относительно малых пространственных масштабах порядка комптоновской длины волны и малых временных масштабах, обратно пропорциональных величине энергетической щели $\Delta t \approx \hbar/(2mc^2) \approx 10^{-21}$ с, m — масса электрона, c — скорость света в вакууме, $\hbar$ — постоянная Планка.

Для локализованного электронного волнового пакета в графене можно оценить временной масштаб ZB, используя соотношение неопределенностей, $\Delta t \approx 1/(V_F k_0)$, где V_F — скорость электрона, $\hbar k_0$ — определяет импульс электрона, в разумных пределах Δt может быть порядка 10^{-15} с. Причиной временных осцилляций квантовых состояний электрона в графене является интерференция состояний проводящей и валентной полос, из которых сформировано пространственно-локализованное квантовое состояние. Впервые эта задача для графена теоретически анализировалась в работе [2], в которой было указано на сходный характер ZB для свободных релятивистских электронов и электронов в графене, в работе [3] в шредингеровском представлении проведен анализ ZB для графена. В работе [4] сделано обобщение явлений ZB на двойной графеновый слой и углеродную нанотрубку. Динамика локализованного электронного квантового состояния графена в магнитном поле рассмотрена в [5].

В предлагаемой работе используется гейзенберговское представление для вычисления средних значений координат локализованных электронных состояний графена и шредингеровское представление для интерпретации результатов ZB.

Для исследования электронного спектра графена используем приближение сильной связи, в рассматриваемом приближении энергия π -электронов может быть

представлена в виде

$$E(k_x, k_y) = \pm \left| \beta_0 + \beta_2 \exp(-i(k_x a_{1x} + k_y a_{1y})) + \beta_1 \exp(-i(k_x a_{2x} + k_y a_{2y})) \right|, \quad (1)$$

где $\beta_{0,1,2}$ — матричные элементы оператора гамильтониана, построенные на атомных волновых функциях, определяющие амплитуды перехода электрона между ближайшими соседними атомами, которые относятся к атомным подрешеткам A и B графена; $\mathbf{k}(k_x, k_y)$ — квазиволновой вектор; $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$ — базисные векторы элементарной ячейки. Из (1) следует: электронные состояния в графене вблизи точек высокой симметрии $\mathbf{K}$, в которых энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости обращается в нуль, могут быть получены из линейного по оператору импульса гамильтониана [6]

$$H = V_F \sigma p, \quad (2)$$

где $p(p_x, p_y)$ — оператор импульса, $\sigma(\sigma_x, \sigma_y)$ — матрицы Паули. Собственные функции оператора гамильтониана (2) представим в виде двухкомпонентных псевдоспиноров

$$|\psi_{k,S}\rangle = \frac{1}{2\pi\sqrt{2}} \exp(i(k_x x + k_y y)) \begin{pmatrix} 1 \\ S \exp(i\theta) \end{pmatrix},$$

$$E_{kS} = \hbar V_F S |k|, \quad (3)$$

параметр $S = \pm 1$ — определяет положительную и отрицательную ветви энергии (1) электронного спектра, θ — угол между квазиволновым вектором $\mathbf{k}$ и осью OX, E_{kS} — энергия состояния. Квадраты модулей первой и второй псевдоспиновых компонент волновой функции (3) определяют плотности вероятностей нахождения электрона на атомных подрешетках A и B графена. Заметим, что для функций (3) условие ортогональности имеет вид

$$\langle \psi_{k,S} | \psi_{k',S'} \rangle = \delta(k - k') \delta_{SS'},$$

где в правой части равенства стоит произведение δ -функции Дирака и символа Кронекера.

† E-mail: savinsky@uni.udm.ru