Металлофиз. новейшие технол. / *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*
2015, т. 37, № 12, сс. 1725–1731

PACS numbers: 03.65.Pm, 72.80.Vp, 73.23.-b, 73.25.+i, 73.50.Bk, 73.50.Gr

Мінімальна провідність графену, обумовлена ефективним згасанням носіїв заряду внаслідок ефекту «дрижання» Шредингера

М. А. Рувінський, О. Б. Костюк

*Державний вищий навчальний заклад
«Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»,
вул. Шевченка, 57,
76000 Івано-Франківськ, Україна*

Визначено мінімальну провідність графенового моношару на основі кінетичного рівняння з ефективним згасанням, зумовленим релятивістським квантовим ефектом «Zitterbewegung». Розглянуто специфічний вид міжзонного електронного переходу з утворенням віртуальних електронно-діркових пар, який відбувається при звичайних внутрішньозонних переходах. Знайдений результат для мінімальної провідности підтверджується експериментально і збігається з виразом $4e^2/\pi\hbar$, одержаним теоретично іншою методою (у Ландауеровому формулюванні).

Ключові слова: моношар графену, мінімальна провідність, ефект «Zitterbewegung».

Определена минимальная проводимость монослоя графена на основе кинетического уравнения с эффективным затуханием, обусловленным релятивистским квантовым эффектом «Zitterbewegung». Рассмотрен специфический вид межзонного перехода с образованием виртуальной электронно-дырочной пары, который происходит при обычных внутризонных переходах. Найденный результат для минимальной проводимости подтверждается экспериментально и совпадает с выражением $4e^2/\pi\hbar$, полу-

Corresponding author: Mark Aunovich Ruvinskii
E-mail: markruvinskii@gmail.com

State Higher Educational Establishment 'Vasyl Stefanyk Precarpathian National University', 57 Shevchenko Str., 76025 Ivano-Frankivsk, Ukraine

M. A. Ruvinskii and O. B. Kostyuk,
The Minimal Conductivity of Graphene Caused by an Effective Attenuation of Charge Carriers Due to the Schrödinger's 'Zitterbewegung' Effect, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 12: 1725–1731 (2015) (in Ukrainian).

ченным теоретически другим методом (в формулировке Ландауэра).

Ключевые слова: монослой графена, минимальная проводимость, эффект «Zitterbewegung».

Based on the kinetic equation with effective attenuation caused by the relativistic quantum effect of 'Zitterbewegung', the minimal conductivity in graphene monolayer is determined. The relativistic quantum effect considered as a peculiar type of interband electronic transition with the formation of virtual electron–hole pair, which occurs under the usual intraband transition, is investigated. The result for the minimal conductivity is confirmed by the experimental data and coincides with the expression $4e^2/\pi\hbar$ obtained theoretically by another method (within the Landauer's formulation).

Key words: graphene monolayer, minimal conductivity, Schrödinger's 'Zitterbewegung' effect.

(Отримано 8 вересня 2015 р.; остаточн. варіант — 26 жовтня 2015 р.)

1. ВСТУП

Розглядаючи особливості вільного руху в релятивістській квантовій механіці на основі Діракового рівняння, Шредингер [1] вперше з'ясував появу мікроскопічного періодичного руху з утворенням пари частинки й античастинки. Цей рух прийнято називати Шредингеровим електронним «дрижанням» («Zitterbewegung»). Звичайна фізична інтерпретація [2–4] пов'язана також з Гайзенберґовим принципом невизначености, коли при намаганні точного визначення координати народжується електрон-позитронна пара. В роботі [5] було показано зв'язок ефекту «Zitterbewegung» з мінімальною скінченною провідністю ідеального моношару графену в двовимірному моделю безмасових Діракових ферміонів за нульових значень температури T і хемічного потенціялу μ. Було використано некомутативність операторів Гамільтона і струму та формулу Кубо для визначення провідности при $T \to 0$ і $\mu \to 0$. Одержаний таким чином формальний результат якісно підтверджує зв'язок $\sigma_{\min}$ з явищем «Zitterbewegung», однак є істотно неоднозначним, з точністю до числових факторів, пов'язаних з реґуляризацією Діракових δ-функцій. Однозначний результат одержано в [5, 7] вже іншою методою — у Ландауеровому формулюванні [6].

Метою даної роботи є знаходження мінімальної провідности графену на основі явного визначення ефективного електронного згасання за допомогою нестаціонарної теорії збурень для квантового переходу системи в станах з народженою електрон-дірковою парою з наступним підставлянням у відомий вираз фізичної кінетики.

2. ЗГАСАННЯ ДІРАКОВИХ ФЕРМІОНІВ, ЗУМОВЛЕНЕ ЕФЕКТОМ «ZITTERBEWEGUNG»

Часова еволюція електронного оператора $\hat{\psi}_p(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\psi}_p e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ має вигляд [5, 7]

$$\hat{\psi}_p(t) = \frac{u}{2L}\left[e^{-i\varepsilon_p t/\hbar}\left(1+\frac{\mathbf{p}\hat{\sigma}}{p}\right)+e^{i\varepsilon_p t/\hbar}\left(1-\frac{\mathbf{p}\hat{\sigma}}{p}\right)\right]\hat{\psi}_p, \tag{1}$$

де $\varepsilon_p = up$, u — Фермі-швидкість, характерна для графену, $\hat{\sigma}$ — матриці Паулі, L^2 — площа системи. Перший доданок в (1) відповідає матричному елементу знищення електрона в зоні провідности, а другий — знищенню електрона у валентній зоні (або «народженню дірки»). Легко бачити, що мають місце співвідношення:

$$u\hat{\sigma}\mathbf{p}\frac{1}{2}\left(1\pm\frac{\mathbf{p}\hat{\sigma}}{p}\right) = \pm\varepsilon_p\frac{1}{2}\left(1\pm\frac{\mathbf{p}\hat{\sigma}}{p}\right), \tag{2}$$

$$\left[\frac{1}{2}\left(1\pm\frac{\mathbf{p}\hat{\sigma}}{p}\right)\right]^2 = \frac{1}{2}\left(1\pm\frac{\mathbf{p}\hat{\sigma}}{p}\right). \tag{3}$$

Введемо ортонормовані хвильові функції, які характеризують періодичний рух з подвійною енергією $2\varepsilon'$ електрона в зоні провідности й у валентній зоні:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\pm 1\\ e^{i\varphi-2i\varepsilon' t/\hbar}\end{pmatrix}, \tag{4}$$

де знак «+» відповідає електрону в зоні провідности, а знак «−» — електрону валентної зони. Функціями (4) апроксимуємо стан, пов'язаний з ефектом «Zitterbewegung». Вираз

$$\hat{V}(t) = \frac{u}{2L}\left[e^{-i\varepsilon_p t/\hbar}\left(1+\frac{\mathbf{p}\hat{\sigma}}{p}\right)+e^{i\varepsilon_p t/\hbar}\left(1-\frac{\mathbf{p}\hat{\sigma}}{p}\right)\right] \tag{5}$$

будемо розглядати як збурення, що викликає квантові переходи в стани з квантовими функціями (4). Середні значення оператора $\hat{H}_0 = u\mathbf{p}\hat{\sigma}$ за хвильовими функціями (4) дорівнюють $\pm\varepsilon_p\cos(2\varepsilon' t)$. Визначимо матричний елемент для специфічних міжзонних електронних переходів [5, 7]:

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1\\ e^{-i\varphi+2i\varepsilon' t'/\hbar}\end{pmatrix}\hat{V}(t')\begin{pmatrix}1\\ e^{i\varphi-2i\varepsilon' t'/\hbar}\end{pmatrix} =$$

$$= \frac{u}{2L}\cos\left[(2\varepsilon' - \varepsilon)t' / \hbar\right] - \frac{u}{2L}\cos\left[(2\varepsilon' + \varepsilon)t' / \hbar\right]. \quad (6)$$

Після інтеґрування (6) за dt' від 0 до t одержуємо:

$$\frac{\hbar u}{2(2\varepsilon' - \varepsilon)L}\sin\left[(2\varepsilon' - \varepsilon)t / \hbar\right] - \frac{\hbar u}{2(2\varepsilon' + \varepsilon)L}\sin\left[(2\varepsilon' + \varepsilon)t / \hbar\right]. \quad (7)$$

Нехтуючи далі в (7) другим доданком і беручи до уваги перехід $t \to \infty$, для квадрата модуля матричного елемента матимемо:

$$\lim_{t\to\infty}\frac{\hbar^2 u^2}{4(2\varepsilon' - \varepsilon)^2 L^2}\sin^2\left[(2\varepsilon' - \varepsilon)t / \hbar\right] = \frac{\pi u^2}{4L^2}t\delta\left[(2\varepsilon' - \varepsilon) / \hbar\right]. \quad (8)$$

Ймовірність розглянутих переходів W_{-+} за одиницю часу дорівнює з врахуванням спінового g_s і доменного виродження g_v ($g_s = 2$ і $g_v = 2$)

$$W_{-+} = g_s g_v \sum_{\mathbf{p}'}\frac{\pi}{4}\frac{\hbar u^2}{L^2}\delta(2\varepsilon' - \varepsilon_p). \quad (9)$$

Легко переконатися, що відповідна для ймовірности за одиницю часу для альтернативних обернених переходів $W_{+-} = W_{-+}$. Повна ймовірність за одиницю часу (або обернений час релаксації $\Gamma(\varepsilon_p)$) дорівнює:

$$W = \Gamma(\varepsilon_p) = 2W_{-+} = g_s g_v \sum_{\mathbf{p}'}\frac{\pi}{2}\frac{\hbar u^2}{L^2}\delta(2\varepsilon' - \varepsilon_p). \quad (10)$$

Переходячи в (10) до інтеґрування, маємо:

$$\Gamma(\varepsilon_p) = g_s g_v \frac{L^2}{(2\pi\hbar)^2}\frac{\pi\hbar}{2L^2}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty}\delta(2\varepsilon' - \varepsilon_p)\varepsilon' d\varepsilon' = \frac{\varepsilon_p}{4\hbar}. \quad (11)$$

3. СТАТИЧНА ПРОВІДНІСТЬ ІДЕАЛЬНОГО ГРАФЕНУ ПРИ $T = 0$ і $\mu = 0$ ТА ЇЇ ОБГОВОРЕННЯ

Стосовно динамічної провідности графену різними теоретичними методами здійснено чимало робіт, наприклад [8–10], в яких було з'ясовано її універсальну поведінку в низькотемпературній і високочастотній області. Внутрішньозонну провідність можна визначити також з Больцманнового кінетичного рівняння в наближенні часу релаксації $\tau = 1 / \Gamma$ в моделю безмасових Діракових ферміонів і теорії лінійного відгуку. Загальний вираз для внутрішньозонної провідности з урахуванням енергетичної залежности оберненого часу релаксації $\Gamma(\varepsilon)$ має вигляд [10]:

$$\sigma = -g_s g_v \frac{e^2}{(2\pi\hbar)^2} \int \frac{v_x}{(\Gamma - i\omega)} \frac{\partial}{\partial p_x} (\rho_1^0 - \rho_2^0) d^2 p, \qquad (12)$$

де $v_x = up_x/p$, $\rho_1^0 = f_0(\varepsilon - \mu)$, $\rho_2^0 = f_0(-\varepsilon + \mu)$,

$$f_0(\varepsilon - \mu) = \left(\exp\left[(\varepsilon - \mu) / \theta\right] + 1\right)^{-1} \qquad (13)$$

— функція Фермі–Дірака, $\theta = k_B T$, k_B — Больцманнова стала. Для статичного випадку ідеального графену підставляємо в (12) $\omega = 0$ і значення $\Gamma(\varepsilon)$ (11), зумовлене тільки ефектом «Zitterbewegung» при достатньо малих T і μ, коли можна нехтувати іншими механізмами розсіяння. Одержуємо:

$$\sigma = -\frac{4e^2}{\pi\hbar}\left[\int\limits_0^\infty \frac{\partial f_0(\varepsilon - \mu)}{\partial\varepsilon} d\varepsilon + \int\limits_{-\infty}^0 \frac{\partial f_0(-\varepsilon + \mu)}{\partial\varepsilon} d\varepsilon\right]. \qquad (14)$$

При низьких температурах $T \to 0$:

$$-\frac{\partial f_0(\varepsilon - \mu)}{\partial\varepsilon} = \delta(\varepsilon - \mu). \qquad (15)$$

Для мінімальної провідности при $T = 0$ і $\mu = 0$ з (14) і (15), використовуючи властивості δ-функції Дірака, одержимо:

$$\sigma_{\min} = \frac{4e^2}{\pi\hbar}\left[\int\limits_0^\infty \delta(\varepsilon) d\varepsilon + \int\limits_{-\infty}^0 \delta(-\varepsilon) d\varepsilon\right] = \frac{4e^2}{\pi\hbar}. \qquad (16)$$

Отже, явне використання ефекту «Zitterbewegung» зводиться до універсального виразу $\sigma_{\min}$, підтвердженого експериментально [11]. Вираз (16) збігається з результатом [5], одержаним теоретично іншим шляхом (за Ландауеровою методою).

4. ВИСНОВКИ

На основі математичного формулювання моделю мікроскопічного механізму релятивістського ефекту Шредингера і за допомогою нестаціонарної теорії збурень одержано згасання носіїв струму $\hbar\Gamma = \varepsilon / 4$ внаслідок Шредингерового ефекту електронного «дрижання». Це згасання дає можливість просто визначити мінімальну провідність графену з кінетичного рівняння.

Статична провідність ідеально чистого графену при нульових значеннях температури і хемічного потенціялу відповідає теоретичній і експериментальній мінімальній провідності $4e^2/\pi\hbar$, що має універсальний характер, але відрізняється від випадку універсального значення $4e^2/\pi\hbar$ для високочастотної та низькотемпературної области міжзонної оптичної провідности. Вплив Шредингерового ефекту електронного «дрижання» через ефективне згасання може бути звичайним шляхом введено у фізичну кінетику графену поряд з іншими механізмами розсіяння носіїв заряду.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Э. Шредингер, *Избранные труды по квантовой механике* (Москва: Наука: 1976).
2. А. С. Давыдов, *Квантовая механика* (Москва: Наука: 1973).
3. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика* (Москва: Наука: 1980).
4. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика* (Москва: Наука: 1981).
5. M. I. Katsnelson, *Eur. Phys. J.*, **B51**: 157 (2006).
6. Й. Имри, *Введение в мезоскопическую физику* (Москва: Физматлит: 2002).
7. M. I. Katsnelson, *Graphene. Carbon in Two Dimensions* (New York: Cambridge University Press: 2012).
8. V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, and J. P. Carbone, *New Journal of Physics*, **11**: 095013 (2009).
9. L. A. Falkovsky, *JETP*, **106**: 575 (2008); Л. А. Фальковский, *УФН*, **182**: 1223 (2012).
10. B. M. Ruvinskii and M. A. Ruvinskii, *Mesoscale and Nanoscale Physics*, arXiv: 1308. 2854, 1 (2013); B. M. Ruvinskii and M. A. Ruvinskii, *Physics and Chemistry of Solid State*, **14**, No. 4: 703, (2013).
11. F. Miao, S. Wijerate, Y. Zlang, U. C. Coskun, W. Bao, and C. N. Lau, *Science*, **317**: 1530 (2007).

REFERENCES

1. E. Shrödinger, *Izbrannye Trudy po Kvantovoy Mekhanike* [Selected Papers on Wave Mechanics] (Moscow: Nauka: 1976) (Russian translation).
2. A. S. Davydov, *Kvantovaya Mekhanika* [Quantum Mechanics] (Moscow: Nauka: 1973) (in Russian).
3. V. B. Berestetskii, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Kvantovaya Elektrodinamika* [Quantum Electrodynamics] (Moscow: Nauka: 1980) (in Russian).
4. A. I. Akhiezer and V. B. Berestetskii, *Kvantovaya Elektrodinamika* [Quantum Eelectrodynamics] (Moscow: Nauka: 1981) (in Russian).
5. M. I. Katsnelson, *Eur. Phys. J.*, **B51**: 157 (2006).
6. Y. Imri, *Vvedenie v Mezoskopicheskuyu Fiziku* [Introduction to Mesoscopic Physics] (Moscow: Fizmatlit: 2002) (Russian translation).
7. M. I. Katsnelson, *Graphene. Carbon in Two Dimensions* (New York: Cambridge University Press: 2012).
8. V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, and J. P. Carbone, *New Journal of Physics*, **11**: 095013 (2009).
9. L. A. Falkovsky, *JETP*, **106**, 575 (2008); L. A. Falkovsky, *Uspekhi Fizicheskikh*

Nauk, **182**: 1223 (2012).
10. B. M. Ruvinskii and M. A. Ruvinskii, *Mesoscale and Nanoscale Physics*, arXiv: 1308.2854, 1 (2013); B. M. Ruvinskii and M. A. Ruvinskii, *Physics and Chemistry of Solid State*, **14**, No. 4: 703, (2013).
11. F. Miao, S. Wijerate, Y. Zlang, U. C. Coskun, W. Bao, and C. N. Lau, *Science*, **317**: 1530 (2007).