

## Особенности временной эволюции локализованных квантовых состояний в графене

© M.J. Majid\*, С.С. Савинский<sup>†</sup>

\* University of Basrah,  
IRAQ-Basrah

<sup>†</sup> 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 (циттербеуегунг — 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,  $\Delta t \approx \approx 1/(V_F k_0)$ , где  $V_F$  — скорость электрона,  $\hbar k_0$  — определяет импульс электрона, в разумных пределах  $\Delta t$  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  $\pi$ -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

$$|\psi_{k,S}\rangle = \frac{1}{2\pi\sqrt{2}} \exp(i(k_x x + k_y y)) \begin{pmatrix} 1 \\ S \exp(i\theta) \end{pmatrix}, \quad E_{k,S} = \hbar V_F S |k|, \quad (3)$$

параметр  $S = \pm 1$  — определяет положительную и отрицательную ветви энергии (1) электронного спектра,  $\theta$  — угол между квазиволновым вектором  $\mathbf{k}$  и осью  $Ox$ ,  $E_{k,S}$  — 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  $\delta$ -функции Дирака и символа Кронекера.

<sup>†</sup> E-mail: savinsky@uni.udm.ru

Построим из двухкомпонентных стационарных функций (3) волновой пакет

$$|\psi(0)\rangle = \sum_S \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a_{k,S} |\psi_{k,S}\rangle d^2k, \quad a_{k,S} = \langle \psi_{k,S} | \psi(0) \rangle, \quad (4)$$

где  $a_{k,S}$  — коэффициенты разложения исходного квантового состояния  $|\psi(0)\rangle$  по функциям (3). Условие нормировки для функции  $|\psi(0)\rangle$ ,  $\langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = 1$ , накладывает на выбор коэффициентов  $a_{k,S}$  ограничение

$$\sum_S \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |a_{k,S}|^2 d^2k = 1. \quad (5)$$

Приведем также формулу для вычисления в шредингеровском представлении псевдоспиновой волновой функции электрона в произвольный момент времени:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \exp(-iHt/\hbar) |\psi(0)\rangle \\ &= \sum_S \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a_{k,S} \exp(-iE_{k,S}t/\hbar) |\psi_{k,S}\rangle d^2k. \end{aligned} \quad (6)$$

Обсудим вычисление средних значений физических величин в произвольный момент времени. Как известно, в гейзенберговском представлении среднее значение произвольной физической величины  $A$  в момент времени  $t$  определяется из соотношения

$$\bar{A}(t) = \langle \psi(0) | A(t) | \psi(0) \rangle, \quad (7)$$

где оператор  $A(t)$  удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$-i\hbar \dot{A}(t) = [H, A(t)], \quad (8)$$

$H$  — оператор Гамильтона, квадратными скобками обозначен коммутатор операторов. Решение (8) может быть представлено в следующем виде:

$$A(t) = \exp(+iHt/\hbar) A(0) \exp(-iHt/\hbar), \quad (9)$$

которое также можно записать в виде бесконечного операторного ряда:

$$\begin{aligned} A(t) &= A(0) + \frac{it}{\hbar} [H, A(0)] - \frac{t^2}{2! \hbar^2} [H, [H, A(0)]] \\ &\quad - \frac{it^3}{3! \hbar^3} [H, [H, [H, A(0)]]] + \dots \end{aligned} \quad (10)$$

Соответственно, подставляя (4) в (7), для среднего значения оператора физической величины  $A$  в момент времени  $t$  получим формулу

$$\bar{A}(t) = \sum_{S,S'} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a_{k,S}^* a_{k',S'} \langle \psi_{k,S} | A(t) | \psi_{k',S'} \rangle d^2k d^2k'. \quad (11)$$

Для операторов координаты  $x$  и  $y$  уравнения (8) приводят в гейзенберговском представлении к следующим формулам:

$$-i\hbar \dot{x}(t) = -i\hbar \sigma_x(t) V_F, \quad -i\hbar \dot{y}(t) = -i\hbar \sigma_y(t) V_F, \quad (12)$$

соответственно для матриц Паули в (12) из (8), имеют место уравнения

$$-i\hbar \dot{\sigma}_x(t) = [H, \sigma_x(t)], \quad -i\hbar \dot{\sigma}_y(t) = [H, \sigma_y(t)],$$

которые могут быть представлены также в виде:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_x(t) &= \frac{i}{\hbar} \left( -2\sigma_x(t)H + \{H, \sigma_x(t)\} \right), \\ \dot{\sigma}_y(t) &= \frac{i}{\hbar} \left( -2\sigma_y(t)H + \{H, \sigma_y(t)\} \right), \end{aligned} \quad (13)$$

фигурными скобками обозначены антикоммутаторы операторов. Окончательно уравнения для матриц Паули в гейзенберговском представлении примут вид:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_x(t) &= \frac{i}{\hbar} \left( -2\sigma_x(t)H + 2V_F p_x \right), \\ \dot{\sigma}_y(t) &= \frac{i}{\hbar} \left( -2\sigma_y(t)H + 2V_F p_y \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Интегрирование уравнений (12), с учетом (14), приводит к следующим формулам для операторов координат:

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0) + \frac{V_F^2 p_x t}{H} + \frac{i\hbar V_F}{2} \left( \sigma_x(0) - \frac{V_F p_x}{H} \right) \\ &\quad \times \frac{1}{H} \left( \exp(-2iHt/\hbar) - 1 \right), \\ y(t) &= y(0) + \frac{V_F^2 p_y t}{H} + \frac{i\hbar V_F}{2} \left( \sigma_y(0) - \frac{V_F p_y}{H} \right) \\ &\quad \times \frac{1}{H} \left( \exp(-2iHt/\hbar) - 1 \right). \end{aligned} \quad (15)$$

На малых временах  $t$ , раскладывая экспоненту в формуле (15) в ряд Тейлора, можно убедиться в равенстве коэффициентов получаемого временного операторного ряда и коэффициентов временного ряда (10) для оператора координаты. Заметим, что из (15) могут быть также получены в гейзенберговском представлении формулы для компонент оператора плотности тока

$$\begin{aligned} j_x(t) &= e \frac{V_F^2 p_x}{H} + V_F e \left( \sigma_x(0) - \frac{V_F p_x}{H} \right) \left( \exp(-2iHt/\hbar) \right), \\ j_y(t) &= e \frac{V_F^2 p_y}{H} + V_F e \left( \sigma_y(0) - \frac{V_F p_y}{H} \right) \left( \exp(-2iHt/\hbar) \right), \end{aligned} \quad (16)$$

где  $e$  — заряд электрона.

Для средних значений координат в произвольный момент времени из (11) имеем:

$$\bar{x}(t) = \sum_{S,S'} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a_{k,S}^* a_{k',S'} \langle \psi_{k,S} | x(t) | \psi_{k',S'} \rangle d^2 k d^2 k',$$

$$\bar{y}(t) = \sum_{S,S'} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a_{k,S}^* a_{k',S'} \langle \psi_{k,S} | y(t) | \psi_{k',S'} \rangle d^2 k d^2 k',$$

(17)

матричные элементы, входящие в формулы для средних, могут быть вычислены с помощью формул (3) и (15):

$$\langle \psi_{k,S} | x(t) | \psi_{k',S'} \rangle = \delta(k - k') \left( \left( x(0) + \frac{V_F k_x t}{S' |k|} \right) \left( \frac{1 + SS'}{2} \right) + \frac{i}{2S' |k|} \left( \left( \frac{S' \exp(i\theta) + S \exp(-i\theta)}{2} \right) - \frac{k_x}{S' |k|} \left( \frac{1 + SS'}{2} \right) \right) (\exp(-2iV_F S' |k| t) - 1) \right),$$

$$\langle \psi_{k,S} | y(t) | \psi_{k',S'} \rangle = \delta(k - k') \left( \left( y(0) + \frac{V_F k_y t}{S' |k|} \right) \left( \frac{1 + SS'}{2} \right) + \frac{i}{2S' |k|} \left( \left( \frac{S' \exp(i\theta) - S \exp(-i\theta)}{2} \right) - \frac{i k_y}{S' |k|} \left( \frac{1 + SS'}{2} \right) \right) (\exp(-2iV_F S' |k| t) - 1) \right). \quad (18)$$

В формуле (18) диагональные матричные элементы по псевдоспиновой переменной не содержат осциллирующих во времени слагаемых. Этот факт указывает на монотонный характер средних значений координат (17), в случае если волновой пакет  $|\psi(0)\rangle$  построен из состояний, соответствующих только одной из энергетических зон: проводящей или валентной. Соответственно недиагональные матричные элементы по псевдоспиновой переменной в (18) содержат осциллирующие во времени слагаемые, что приводит к осцилляциям средних значений координат, в случае если в волновом пакете  $|\psi(0)\rangle$  имеются состояния из проводящей и валентной зон.

В качестве примера локализованного квантового состояния рассмотрим гауссовый волновой пакет (3), в котором симметрично представлены состояния из валентной и проводящей зон,

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{d\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2d^2} - \frac{y^2}{2d^2} + ik_0 x\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

соответственно коэффициенты разложения функции (19)

$$a_{k,S} = \frac{d}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(k_x - k_0)^2 d^2}{2} - \frac{k_y^2 d^2}{2}\right) (\delta_{+1,S} + \delta_{-1,S}). \quad (20)$$

Заметим, что квантовое состояние (19) в начальный момент времени представляет собой локализованное состояние на атомной подрешетке A графена. С течением

времени это квантовое состояние размывается на подрешетки A и B. Вычислим средние значения координат в данном квантовом состоянии, используя формулы (17). Удобно при вычислении интегралов (17) сделать замену переменных интегрирования по следующему правилу:

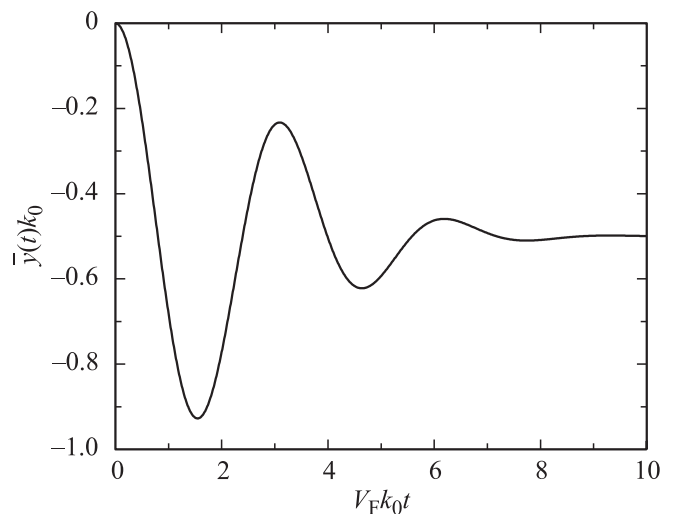
$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots d^2 k \rightarrow \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \dots q d\theta dq,$$

в результате получим

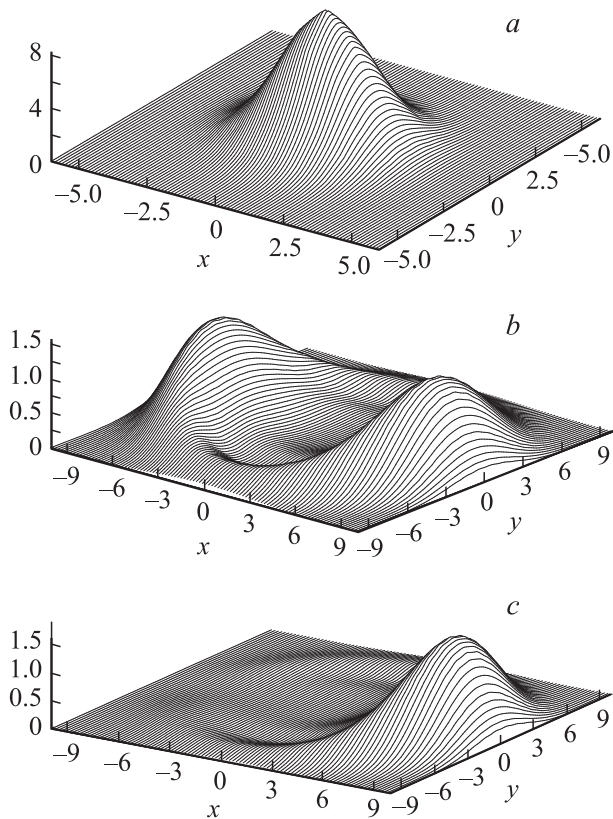
$$\bar{x}(t) = 0,$$

$$\bar{y}(t) = \frac{d^2}{2} \exp(-d^2 k_0^2) \int_0^{\infty} \exp(-q^2 d^2) \times I_1(2qd^2 k_0) (\cos(2V_F |q| t) - 1) dq, \quad (21)$$

где  $I_1(\dots)$  — модифицированная функция Бесселя. На рис. 1 показаны данные численного расчета средней координаты  $\bar{y}(t)$  по формуле (21) для фиксированного значения безразмерного параметра  $dk_0 = 4$ . Перевод данных, представленных на рис. 1, в размерные величины может быть выполнен из следующих соображений: значение скорости электрона  $V_F \approx 10^6$  м/с [6], при выборе несущего волнового вектора  $k_0 \approx 10^9$  м<sup>-1</sup> значение временного масштаба  $1/(V_F k_0) = 10^{-15}$  с. Как следует из рис. 1, зависимость  $\bar{y}(t)$  носит затухающий колебательный характер. Для интерпретации результатов, показанных на рис. 1, вычислим в шредингеровском представлении псевдоспиновую волновую функцию с



**Рис. 1.** Временная зависимость средней координаты для локализованного в начальный момент времени квантового пакета.



**Рис. 2.** Временная эволюция плотности вероятности локализованных квантовых пакетов: *a* — исходное состояние; *b* — промежуточное состояние, момент времени  $V_F k_0 t = 7$  для пакета, определяемого по формуле (22); *c* — промежуточное состояние, момент времени  $V_F k_0 t = 7$  для пакета, определяемого по формуле (26).

помощью формулы (6) с учетом (20):

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = \frac{d}{4\pi\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \times \begin{pmatrix} 2 \int_0^\infty \exp\left(-\frac{q^2 d^2}{2}\right) \cos(V_F t q) B_0 q dq \\ -2i \int_0^\infty \exp\left(-\frac{q^2 d^2}{2}\right) \sin(V_F t q) B_1 q dq \end{pmatrix}, \quad (22)$$

$B_0$  и  $B_1$  определяются следующим образом:

$$B_0 = 2\pi J_0\left(q\sqrt{x^2 + y^2 - 2ixk_0 d^2 - k_0^2 d^4}\right),$$

$$B_1 = -2\pi \left( \frac{y - ix + k_0 d^2}{\sqrt{x^2 + y^2 - 2ixk_0 d^2 - k_0^2 d^4}} \right) \times J_1\left(q\sqrt{x^2 + y^2 - 2ixk_0 d^2 - k_0^2 d^4}\right),$$

$J_0(\dots), J_1(\dots)$  — функции Бесселя. На рис. 2, *a* и *b* показана плотность вероятности локализованного состо-

яния (22) в исходный (нулевой) момент времени и произвольный момент времени. Как следует из рисунков, исходное локализованное квантовое состояние распадается на два пакета, сформированных из квантовых состояний валентной и проводящей зон, пакеты эволюционируют на графеновой плоскости со скоростями, соответствующими групповым скоростям локализованных квантовых состояний.

Рассмотрим другое локализованное состояние в случае начальной волновой функции:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}d} \exp\left(-\frac{x^2}{2d^2} - \frac{y^2}{2d^2} + ik_0 x\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Квантовое состояние (23) в отличие от предыдущего случая (19) в начальный момент времени локализовано симметрично на атомных подрешетках *A* и *B* графена. Используя уравнение (4), найдем коэффициенты разложения исходного состояния (23) по функциям (3):

$$a_{k,S} = \frac{d}{\sqrt{4\pi}} \exp\left(-\frac{(k_x - k_0)^2 d^2}{2} - \frac{k_y^2 d^2}{2}\right) (1 + S \exp(-i\theta)). \quad (24)$$

Для средних значений координат данного квантового состояния в произвольный момент времени имеем

$$\begin{aligned} \bar{x}(t) = d^2 \exp(-k_0^2 d^2) & \left( V_F t \int_0^\infty \exp(-q^2 d^2) (I_0(2qk_0 d^2) \right. \\ & + I_2(2qk_0 d^2)) q dq + \int_0^\infty \exp(-q^2 d^2) (I_0(2qk_0 d^2) \\ & \left. - I_2(2qk_0 d^2)) (\sin(2V_F |q|t)) dq \right), \quad (25) \\ \bar{y}(t) = 0. \end{aligned}$$

Численный расчет средней координаты  $\bar{x}(t)$  по формуле (25) для различных значений параметра  $dk_0$  показал: зависимость  $\bar{x}(t)$  на больших временах линейна, на ранних стадиях эволюции она имеет аперриодический колебательный характер. Приведем также формулу для вычисления псевдоволновой функции в произвольный момент времени по формуле (6) с учетом (24):

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = \frac{d}{4\pi\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{k_0^2 d^2}{2}\right) \times \begin{pmatrix} 2 \int_0^\infty \exp\left(-\frac{q^2 d^2}{2}\right) (B_0 \cos(V_F t q) - iB_{-1} \sin(V_F t q)) q dq \\ -2 \int_0^\infty \exp\left(-\frac{q^2 d^2}{2}\right) (iB_1 \sin(V_F t q) - B_0 \cos(V_F t q)) q dq \end{pmatrix}, \quad (26)$$

$$A = q^2(-x^2 + y^2 + 2ik_0xd^2 + k_0^2d^4),$$

$$B = 2q^2(-xy + ik_0yd^2),$$

$$C = q^2(-x^2 - y^2 + 2ik_0xd^2 + k_0^2d^4),$$

$$B_{-1} = \frac{2\pi}{\sqrt{C}} \left( \sqrt{A - iBI_1(\sqrt{C})} \right).$$

На рис. 2, *a* и *c* показаны плотности вероятности локализованного квантового состояния в нулевой и произвольный моменты времени, численно рассчитанные по формуле (26). Как следует из рис. 2, начальное состояние формирует уединенный волновой пакет, в котором ЗВ возникает на ранней стадии эволюции.

Таким образом, в работе приведены матричные элементы операторов координаты, позволяющие для локализованного квантового состояния электрона графена вычислить средние значения координат в произвольный момент времени; показан осциллирующий характер временных зависимостей, носящий затухающий либо апериодический характер. Полученные данные свидетельствуют о возможности наблюдения квантовых осцилляций средних величин, обусловленных пространственным перекрытием локализованных состояний проводящей и валентной зон графена.

## Список литературы

- [1] К. Ициксон, Ж.Б. Зюбер. *Квантовая теория поля*, пер. с англ. (М., Мир, 1984) т. 1.
- [2] M. Katsnelson. Eur. Phys. J. B, **51**, 157 (2007).
- [3] G.M. Maksimova, V.Ya. Demikhovskii, E.V. Frolova. Phys. Rev. B, **78**, 235 321 (2008).
- [4] T.M. Rusin, W. Zawadzki. Phys. Rev. B, **76**, 195 439 (2007).
- [5] K. Viktor, K. Tobias. J. Phys. **11**, 093 010 (2009).
- [6] D.S.L. Aberge, V. Apalkov, J. Berashevich. Adv. Phys., **59** (4), 261 (2010).

Редактор Л.В. Беляков

## Features of time-evolution of the localized quantum states in graphene

M.J. Majid\*, S.S. Savinskii

\* University of Basrah,  
IRAQ-Basrah  
Udmurt State University,  
426034 Izevsk, Russia

**Abstract** In the Heisenberg representation, the phenomena of an interference of the states in the conduction and valence bands of graphene arising for the localized electronic wave packets are analyzed. The interference leads to the temporal oscillations in the average values of the physical quantities.