

# Мезоскопические состояния в графене, находящемся в магнитном поле: коллапс и возрождение волновых пакетов

В.Я. Демиховский, А.В. Тележников, Е.В. Фролова, Н.А. Кравец

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*

*пр. Гагарина, 23, г. Н. Новгород, 603950, Россия*

E-mail: telezhnikov@phys.unn.ru

Статья поступила в редакцию 13 сентября 2012 г.

Исследованы эффекты коллапса и возрождения волновых пакетов в монослойном и двухслойном графене в присутствии внешнего перпендикулярного магнитного поля. Изучена эволюция электронных волновых пакетов, являющихся суперпозицией состояний с квантовыми числами  $n$ , близкими к номеру некоторого уровня Ландау  $n_0$ . Аналитически рассчитаны и визуализированы плотности вероятности, а также средние скорости центра пакетов. Начальный волновой пакет, включающий состояния только с положительной энергией, теряет пространственную локализацию и распадается на несколько подпакетов в моменты  $t = (m/n)T_R$ , где  $T_R$  — время возрождения,  $m$  и  $n$  — взаимно простые числа. Кроме этого, показано, что поведение волнового пакета, состоящего из состояний двух энергетических зон (с  $E_n > 0$  и  $E_n < 0$ ), является более сложным. Такой пакет расщепляется на две части, которые вращаются с циклотронной частотой в противоположных направлениях. Обсуждается характер электромагнитного излучения волновых пакетов, испытывающих периодический коллапс и возрождение.

Досліджено ефекти колапсу та відродження хвильових пакетів в моношаровому і двошаровому графені у присутності зовнішнього перпендикулярного магнітного поля. Вивчено еволюцію електронних хвильових пакетів, що є суперпозицією станів з квантовими числами  $n$ , близькими до номера деякого рівня Ландау  $n_0$ . Аналітично розраховано та візуалізовано щільності вірогідності, а також середні швидкості центру пакетів. Початковий хвильовий пакет, що включає стани тільки з позитивною енергією, втрачає просторову локалізацію і розпадається на декілька підпакетів у моменти  $t = (m/n)T_R$ , де  $T_R$  — час відродження,  $m$  та  $n$  — взаємно прості числа. Окрім цього, показано, що поведінка хвильового пакету, який складається із станів двох енергетичних зон (з  $E_n > 0$  та  $E_n < 0$ ), складніша. Такий пакет розщеплюється на дві частини, які обертаються з циклотронною частотою в протилежних напрямках. Обговорюється характер електромагнітного випромінювання хвильових пакетів, що випробовують періодичний колапс та відродження.

PACS: 73.22.Pt Электронная структура графена;  
72.80.Vr Электронный транспорт в графене;  
03.65.Pm Релятивистские волновые уравнения.

Ключевые слова: графен, динамика волновых пакетов, мезоскопические состояния.

## 1. Введение

В последние годы возрос интерес к изучению различных модификаций углерода, таких как графен и углеродные нанотрубки [1–4], что связано с большими потенциальными возможностями применения этих материалов в электронике. При этом графен — двумерная структура, имеющая гексагональную кристаллическую решетку — играет важнейшую роль, так как

является основой для понимания электронных свойств других модификаций углерода. Было установлено, что возбуждения в монослойном графене подобны безмассовым дираковским фермионам, что открывает новые уникальные возможности изучения некоторых релятивистских эффектов (например, парадокс Клейна), считавшихся экзотическими до настоящего времени. Кроме того, графен обладает высокой подвижностью носителей заряда (на порядок больше, чем в кремнии), а

эффект Холла в нем наблюдается даже при комнатной температуре, поскольку соударения в этой структуре происходят крайне редко. Несмотря на это существует ряд проблем на пути использования графена в нанoeлектронных устройствах. Одной из этих проблем является отсутствие в графене энергетической щели между зоной проводимости и валентной зоной. В свете последнего внимание исследователей привлекает многослойный (двухслойный) графен, который выгодно отличается от монослойного тем, что в нем можно создать достаточно широкую запрещенную зону [5,6].

За последнее десятилетие активно исследуются явления коллапса и возрождения, а также явление Zitterbewegung (ZB) волновых пакетов, возбужденных в различных квантово-механических системах. В частности, эффекты полного и дробного восстановления волнового пакета (revivals) теоретически изучены для ридберговского атома, молекул и низкоразмерных квантовых систем. Экспериментально явления коллапса и возрождения наблюдались в различных нелинейных системах: двухуровневый атом, запертый в микроволновой полости, ридберговские волновые пакеты в атоме и т.д. Ранее в работах Демиховского, Максимовой, Перова и Фроловой теоретически исследована квантовая динамика свободных релятивистских частиц, описываемых трехмерными гауссовскими волновыми пакетами с различной начальной спиновой поляризацией. Также ими изучены эффекты расщепления и ZB электронных волновых пакетов в полупроводниковой квантовой яме в присутствии спин-орбитального взаимодействия Рашбы и в дырочных (латтинжеровских) системах.

В настоящей работе исследуется эволюция волновых пакетов в монослойном и двухслойном графене, помещенном в перпендикулярное магнитное поле. Двухкомпонентность волновой функции, а также наличие двух энергетических зон в графене обуславливает сложную долгосрочную динамику волновых пакетов. Аналитически и численно исследована пространственно-временная эволюция плотности вероятности для пакетов, содержащих состояния как одной, так и двух энергетических зон. Волновые пакеты визуализированы в характерные моменты времени коллапса и возрождения. Обсуждается динамика волновых пакетов, возбужденных в  $\mathbf{k}$ -пространстве вблизи различных дираковских точек.

## 2. Эволюция волновых пакетов в монослойном графене, помещенном в магнитное поле

### 2.1. Модель

Электронно-дырочный гамильтониан монослойного графена с волновым вектором, расположенным вблизи точки  $K$  в зоне Бриллюэна, во внешнем магнитном поле записывается в виде [7]

$$\hat{H}_K = u \begin{pmatrix} 0 & \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \\ \hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $u \approx 10^8$  см/с — скорость Ферми,  $\hat{\pi} = \hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}/c$  — оператор импульса,  $c$  — скорость света,  $e < 0$  — заряд электрона,  $\mathbf{A}$  — векторный потенциал. В калибровке Ландау (где  $p_x$  является интегралом движения) собственные значения и соответствующие собственные функции (1) есть:

$$\varphi_{p_x, n, s}(x, y) = \frac{\exp(ip_x x/\hbar)}{\sqrt{4\pi\hbar}} (-s|n-1\rangle, |n\rangle)^T, \quad (2)$$

$$E_{n, s} = s\hbar\Omega\sqrt{n}, \quad (3)$$

где  $|n\rangle$  —  $n$ -е состояние гармонического осциллятора,  $s = \pm 1$  — индекс зоны проводимости и валентной зоны,  $\Omega = u\sqrt{2}/a$  — частота перехода с первого уровня Ландау на нулевой,  $a = \sqrt{\hbar c/eB}$  — магнитная длина. Для  $n=0$  верхняя компонента в (2) зануляется и нормировочный коэффициент становится равным  $1/\sqrt{2\pi\hbar}$ .

Незвидистантность энергетического спектра (3) при изучении пространственно-временной эволюции начального локализованного состояния предполагает, как и в других моделях, существование явлений коллапса и возрождения (см., например, [8,9]). Для иллюстрации этого фундаментального утверждения рассмотрим динамику волновых пакетов, собранных из стационарных состояний (2) и локализованных в энергетическом пространстве с номерами уровней Ландау вблизи среднего значения  $n_0$  и дисперсией  $\sigma$  [7]:

$$\Psi(x, y, t) = \int dp \sum_{n, s} c_{n, s}(p) \varphi_{p, n, s}(x, y) \exp(-iE_{n, s}t/\hbar), \quad (4)$$

$$c_n^s(p) = \sqrt{\frac{a}{\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(p-q)^2 a^2}{2\hbar^2} - \frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (5)$$

### 2.2. Эволюция волновых пакетов, содержащих состояния одной энергетической зоны

Прежде всего мы рассмотрим эволюцию локализованного волнового пакета (4) в нелегированном монослойном графене, составленного из квантовых состояний только верхней энергетической зоны. Для этого выберем коэффициенты разложения (5) начального волнового пакета (4) по стационарным состояниям (2) в виде

$$c_n^{s=-1}(p) = 0,$$

$$c_n^{s=1}(p) = \sqrt{\frac{a}{\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(p-q)^2 a^2}{2\hbar^2} - \frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (6)$$

После интегрирования по  $p$  в (4) получаем явный вид для компонент волновой функции с коэффициентами (6)

$$\Psi_1(\mathbf{r}, t) = f(x, y) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sqrt{2n}}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2} - it\sqrt{2n}\right) \left(\frac{y - qa^2 - ix}{a}\right)^{n-1}, \quad (7a)$$

$$\Psi_2(\mathbf{r}, t) = -f(x, y) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2} - it\sqrt{2n}\right) \left(\frac{y - qa^2 - ix}{a}\right)^n, \quad (7б)$$

где

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi^{3/4} a \sqrt{\sigma}} \exp\left(-\frac{x^2 + (y - qa^2)^2 - 2ix(y + qa^2)}{4a^2}\right).$$

Заметим, что при переходе к новой системе координат  $(x, y - qa^2)$  электронная плотность вероятности  $|\Psi(x, y, t)|^2$  не зависит от параметра  $q$ . Ясно, что этот параметр определяет только положение центра циклотронной орбиты волнового пакета на оси  $y$ . При этом средняя компонента импульса волнового пакета есть  $\bar{p}_x = \hbar q$ . Аналогично можно убедиться в том, что параметр  $\sigma$  задает дисперсию электронной плотности в начальном состоянии как по  $x$ , так и по  $y$ .

Теперь рассчитаем среднюю скорость центра волнового пакета (7a) и (7б). Оператор скорости для монослойного графена вычисляется обычным образом, как коммутатор гамильтониана (1) с оператором координаты  $\hat{v}_i = -(i/\hbar)[\hat{H}, x_i]$ . Тривиальные вычисления приводят к явному виду оператора скорости

$$\hat{v}_i = u\hat{\sigma}_i. \quad (8)$$

Таким образом, средняя скорость центра волнового пакета  $\bar{v}_i(t) = u \int \Psi^\dagger \hat{\sigma}_i \Psi d\mathbf{r}$ , и для начального состояния (4) с коэффициентами (6) имеем (см. также [10]):

$$\bar{v}_x(\tau) = -\frac{u}{\sigma\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2 + (n-n_0+1)^2}{2\sigma^2}\right) \cos[(\sqrt{2(n+1)} - \sqrt{2n})\tau], \quad (9a)$$

$$\bar{v}_y(\tau) = -\frac{u}{\sigma\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2 + (n-n_0+1)^2}{2\sigma^2}\right) \sin[(\sqrt{2(n+1)} - \sqrt{2n})\tau], \quad (9б)$$

где  $\tau = tu/a$ .

Особенности временной динамики волновых пакетов, связанные с неэквидистантностью энергетического спектра (3), наглядно иллюстрируются на графике  $\bar{v}_x(\tau)$  (рис. 1). При малых временах начальный волновой пакет (рис. 2(a)) совершает циклотронное движение с периодом  $T_{cl} = 2\pi\hbar/E'_{n_0} = 4\pi\sqrt{n_0}/\Omega$ . Для параметров  $n_0 = 20$ ,  $B = 10$  Тл,  $\sigma = 2$   $T_{cl} \approx 0,3$  пс. Однако спустя несколько оборотов происходит расфазировка вкладов отдельных стационарных состояний в суперпозицию (7), обусловленная слабой неэквидистантностью уровней Ландау  $E_n \approx E_{n_0} + E'_{n_0}(n-n_0) + (E''_{n_0}/2)(n-n_0)^2 + \dots$  с номерами  $n_0 - \sigma < n < n_0 + \sigma$ , вследствие чего происходит развал начального волнового пакета — он расплывается по циклотронной орбите (рис. 2(б)). Однако на временном интервале  $T_{cl} \ll t \leq T_R$  ( $T_R = 4\pi\hbar/|E''_{n_0}| = 16\pi n_0^{3/2}/\Omega \approx 2,5$  пс — время возрождения) в отдельные моменты  $t = mT_R/n$  (где  $m$  и  $n$  — взаимно простые числа) фазы отдельных слагаемых в (7) становятся кратны  $2\pi$ , что

позволяет начальному волновому пакету частично собраться в  $N = n(3 - (-1)^n)/4$  подпакетов [8]. При этом так называемое дробное возрождение пики мультипольного излучения от вращающихся пакетов должны

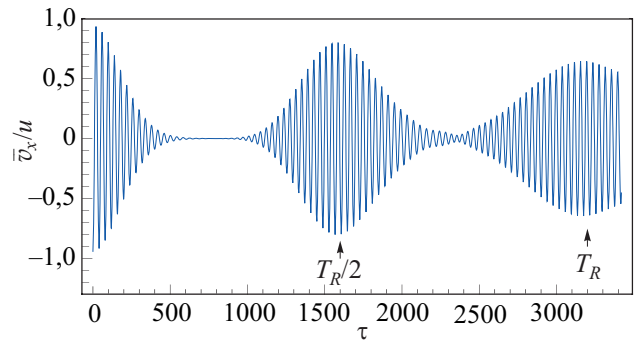


Рис. 1. Зависимость средней скорости  $\bar{v}_x$  центра волнового пакета (4), (6) от времени,  $n_0 = 20$ ,  $B = 10$  Тл,  $\sigma = 2$ .

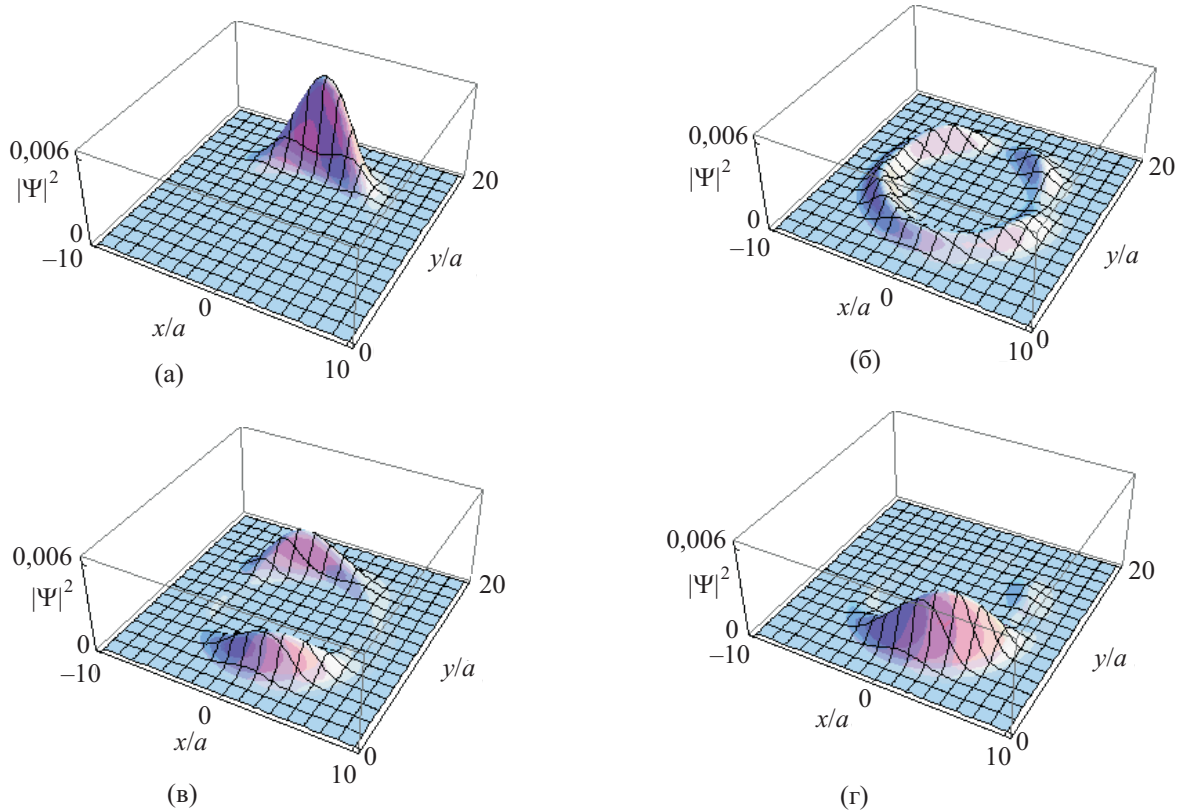


Рис. 2. Плотность вероятности  $|\Psi(x, y)|^2$  для волнового пакета (4), (6) с параметрами  $n_0 = 20$ ,  $\sigma = 2$ ,  $a \approx 10^{-6}$  см,  $q \approx 10^7$  см $^{-1}$  в моменты времени  $t = 0$  (а),  $t \approx 0,1T_R$  (б),  $t \approx T_R/4$  (в),  $t \approx T_R/2$  (г).

следовать вдвое, втрое, вчетверо и т.д. чаще, чем на начальном этапе. Электромагнитное излучение, исходящее от таких подпакетов, будет иметь сложный фурье-спектр. Поляризация излучения будет также изменяться во времени. В частности, при  $t = T_R/4$  мы должны наблюдать два подпакета, расположенных на циклотронной орбите в диаметрально противоположных точках (см. рис. 2(в)). При этом излучение будет иметь квадрупольный, а не дипольный характер. В моменты времени, кратные  $T_R/2$ , наблюдается возрождение осцилляций средней скорости, что соответствует восстановлению начального волнового пакета (рис. 2(г)). Отметим также, что для волнового пакета (4), (6) высокочастотные осцилляции, связанные с ZB, невозможны, потому что волновой пакет содержит состояния с энергией одного знака.

Из выражений (9а), (9б) нетрудно получить координату центра волнового пакета  $\bar{\Gamma}(t)$ , представленную на рис. 3. Видно, что с течением времени средняя координата центра пакета стремится в центр его циклотронной орбиты. Подобная динамика центра волнового пакета впервые обсуждалась Русиным и Завадским [11]. Здесь следует, однако, отметить, что  $\bar{\Gamma}(t)$  в данной ситуации не является удобной характеристикой. Действительно, с течением времени электронная плот-

ность вероятности (6) всегда распределена по циклотронной орбите. При этом в те моменты времени, когда это распределение оказывается примерно равномерным, средний радиус центра пакета стремится к центру циклотронной орбиты.

### 2.3. Эволюция волновых пакетов, содержащих состояния с положительными и отрицательными энергиями

В данном разделе мы рассмотрим эволюцию волнового пакета в легированном монослойном графене, содержащем состояния как верхней, так и нижней энергетических зон. Для того чтобы создать такой пакет, необходимо, чтобы химический потенциал оказался в области отрицательных энергий [12]. Аналогично ситуации, рассмотренной в разделе 2.2, выберем коэффициенты разложения в (4) в виде

$$c_n^{s=-1}(p) = c_n^{s=1}(p) = \sqrt{\frac{a}{\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(p-q)^2 a^2}{2\hbar^2} - \frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (10)$$

В этом случае явный вид компонент волновой функции пакета в произвольный момент времени есть

$$\Psi_1(\mathbf{r}, t) = f(x, y) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sqrt{2n}}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2}\right) \left(\frac{y-qa^2-ix}{a}\right)^{n-1} \text{Cos}(\sqrt{2n}\tau), \quad (11a)$$

$$\Psi_2(\mathbf{r}, t) = f(x, y) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2}\right) \left(\frac{y-qa^2-ix}{a}\right)^n \text{Sin}(\sqrt{2n}\tau). \quad (11б)$$

Вычисления для компонент средней скорости, выполненные для начального состояния (4) с коэффициентами (10), дают следующие результаты:

$$\bar{v}_x(\tau) = 0, \quad (12a)$$

$$\bar{v}_y(\tau) = \frac{2u}{\sigma\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2 + (n-n_0+1)^2}{2\sigma^2}\right) \left\{ \sin[(\sqrt{2(n+1)} + \sqrt{2n})\tau] - \sin[(\sqrt{2(n+1)} - \sqrt{2n})\tau] \right\}. \quad (12б)$$

Таким образом, волновой пакет (рис. 4(а)), состоящий наполовину из состояний верхней зоны и наполовину — из состояний нижней энергетической зоны, на начальной стадии своей эволюции расщепляется на два подпакета, вращающихся в противоположных направлениях по циклотронной орбите (рис. 4(б)). В результате в каждый момент времени  $x$ -компонента средней скорости равна нулю, а  $y$ -компонента, в отличие от предыдущего случая, осциллирует с двумя несоизмеримыми частотами (рис. 5). Второе слагаемое в (12б), как и в случае пакета, составленного из состояний только верхней зоны, описывает осцилляции, связанные с периодическим движением каждого подпакета по циклотронной орбите по сценарию, изложенному в предыдущем разделе. Первое слагаемое в (12б) осциллирует с существенно большей частотой и обусловлено чисто квантовым явлением — ZB, представляющим собой в нашем

случае интерференцию двух подпакетов, наблюдаемую два раза за циклотронный период. Частота таких осцилляций равна  $\omega_{ZB} = 2E_{n_0}/\hbar$ . На вставке к рис. 5 показаны ZB осцилляции центра волнового пакета на первых двух классических периодах. Однако через достаточно большой промежуток времени, когда каждый подпакет распределяется примерно равномерно по циклотронной орбите, эффект интерференции наблюдается практически перманентно за исключением моментов дробного возрождения. Это явление приводит к нарушению четкой картины коллапса и возрождения (рис. 5), описанной в разд. 2.2. В частности, на рис. 4(в) приведена плотность вероятности пакета в момент времени  $t \approx T_R/4$ , представляющая собой регулярную структуру из четырех подпакетов.

Ранее эффекты ZB в графене подробно изучались в работах [11,13]. Подобные эффекты в динамике волновых пакетов были обнаружены в двумерном электронном газе со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы [14], а также при изучении динамики релятивистских дираковских пакетов в магнитном поле [15].

#### 2.4. Квантовые состояния вблизи точки $K'$ и соответствующие волновые пакеты

Как известно, в монослойном графене энергетический спектр имеет дираковский характер в неэквивалентных точках  $K$  и  $K'$ , лежащих на границе зоны Бриллюэна. Сейчас мы обсудим особенности эволюции волновых пакетов, составленных из состояний, лежащих вблизи точки  $K'$ , где гамильтониан имеет вид [16,17]

$$\hat{H}_{K'} = u \begin{pmatrix} 0 & \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \\ \hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Отметим, что  $\hat{H}_{K'} = -\hat{H}_K^T$ . Спектр гамильтониана и соответствующие собственные функции есть (в калибровке Ландау)

$$E_{n,S} = s\hbar\Omega\sqrt{n}, \quad (14)$$

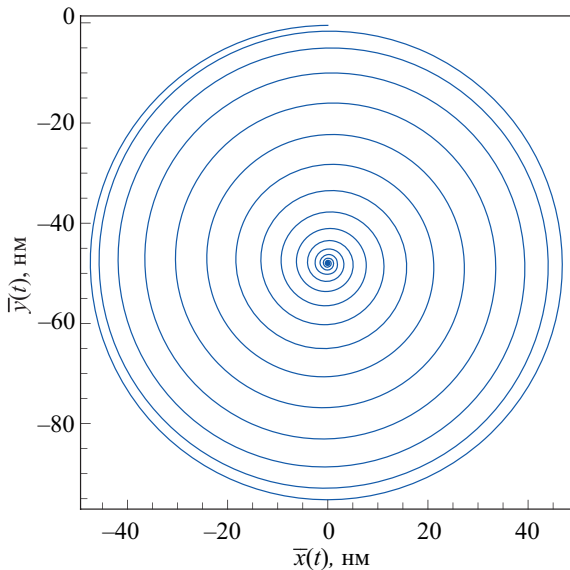


Рис. 3. Средний радиус центра волнового пакета (4), (6), построенного из состояний верхней зоны вблизи точки  $K$ , при  $0 \leq t \leq 0,8$  пс. Здесь  $n_0 = 20$ ,  $\sigma = 2$ ,  $a \approx 10^{-6}$  см,  $q \approx 10^7$  см $^{-1}$ .

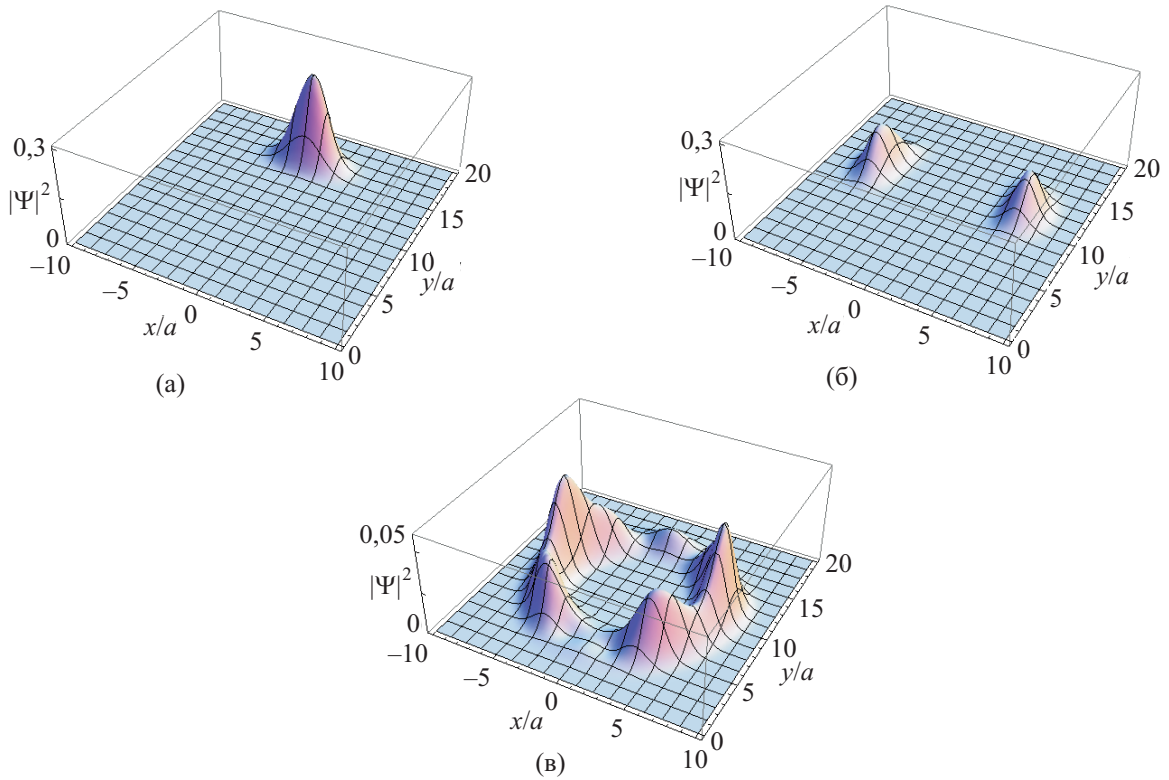


Рис. 4. Плотность вероятности  $|\Psi(x, y)|^2$  для волнового пакета (4), (10) с параметрами  $n_0 = 20$ ,  $\sigma = 2$ ,  $a \approx 10^{-6}$  см,  $q \approx 10^7$  см $^{-1}$  в моменты времени  $t = 0$  (а),  $t \approx 0,2T_{cl}$  (б),  $t \approx T_R/4$  (в).

$$\xi_{p_x, n, s}(x, y) = \frac{\exp(ip_x x/\hbar)}{\sqrt{4\pi\hbar}} (|n\rangle, s|n-1\rangle)^T. \quad (15)$$

Таким образом, если мы возбуждаем электронные состояния в графене с номерами уровней Ландау вблизи среднего значения  $n_0$  и дисперсией  $\sigma$  в окрестности точки  $K'$ , коэффициенты разложения начального волнового пакета по базису (15) должны быть такими же, как (6). Соответственно, сформированный из этих коэффициентов волновой пакет будет отличаться от аналогичного пакета, рассмотренного в разд. 2.2:

$$\Phi(x, y, t) = \int dp \sum_{n, s} c_{n, s}(p) \xi_{p, n, s}(x, y) \exp(-iE_{n, s} t/\hbar). \quad (16)$$

Однако из-за того, что собственные функции (2) переходят в соответствующие функции (15) при перестановке нижней и верхней компонент и последующей сменой знака у нижней компоненты, а оператор скорости для гамильтониана  $\hat{H}_{K'}$  есть  $\hat{v}'_x = -\hat{v}_x$ ,  $\hat{v}'_y = \hat{v}_y$ , поведение рассматриваемого пакета оказывается эквивалентным поведению пакета (7) [4].

### 2.5. Мультипольное электромагнитное излучение

Особенности временной динамики волновых пакетов в графене, рассмотренные выше, должны сказаться на характере их электромагнитного излучения. Как излучаемое поле, так и его интенсивность определяются

мультипольным моментом системы. Так, на начальной стадии эволюции волнового пакета ( $t < T_D$ ,  $T_D$  — время коллапса) преобладает дипольное излучение с частотой  $\omega = eBc/E_{n_0}$ . Его интенсивность (в классическом приближении) пропорциональна квадрату второй производной по времени от среднего дипольного момента  $\ddot{\mathbf{d}}(t) = -e\dot{\mathbf{v}}(t)$ , где компоненты средней скорости определены в (9а) и (9б). При временах  $T_D < t < T_R/2$  средняя скорость пакета обращается в нуль (рис. 1). При этом

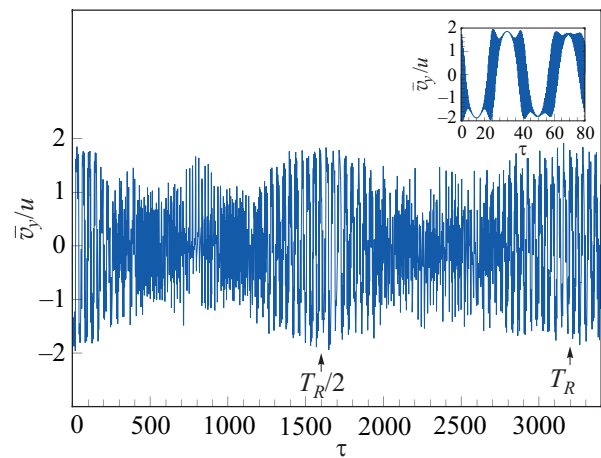


Рис. 5. Зависимость средней скорости  $\bar{v}_y$  центра волнового пакета (4), (10) от времени,  $n_0 = 20$ ,  $B = 10$  Тл,  $\sigma = 2$ .

электромагнитное излучение определяется как зависящими от времени компонентами тензора квадрупольного момента  $\bar{D}_{\alpha,\beta} = \int |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 (3x_\alpha x_\beta - r^2 \delta_{\alpha,\beta}) d\mathbf{r}$ , так и магнитного момента  $\bar{\mathbf{m}} = e/2c \int \Psi^+(\mathbf{r},t)[\mathbf{r}, \hat{\mathbf{v}}]\Psi(\mathbf{r},t)d\mathbf{r}$ , где волновая функция  $\Psi(\mathbf{r},t)$  определена в (7а) и (7б). В частности, в момент времени  $t = T_R/4$ , когда начальный волновой пакет (4), (6) расщепляется на два подпакета, преобладает квадрупольное излучение на удвоенной частоте  $2\omega$ . При этом его интенсивность определяется выражением  $dI/d\Omega = (1/4)\pi c^5 [|\bar{\mathbf{D}}, \mathbf{n}|^2]$ , где компоненты вектора  $\mathbf{D}$  есть  $D_\alpha = D_{\alpha\beta} n_\beta$ . Далее, при  $t \sim T_R/2$  на временном интервале порядка  $\Delta t \sim 2T_D$  (см. рис. 1) дипольное излучение становится снова преобладающим. Затем при больших временах мультипольное и магнитодипольное слагаемые вновь становятся доминирующими и т.д.

### 3. Эволюция волновых пакетов в двухслойном графене, помещенном в магнитное поле

#### 3.1. Эволюция волновых пакетов, содержащих состояния одной энергетической зоны

Рассмотрим эволюцию электронных волновых пакетов в двухслойном графене (рис. 6), помещенном в перпендикулярное магнитное поле  $\mathbf{B}$ . Гамильтониан этой системы имеет вид [1]

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m} \begin{pmatrix} 0 & (\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y)^2 \\ (\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y)^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (17)$$

где  $m = 2\gamma_1 \hbar^2 / (3\gamma_0^2 b^2) \approx 0,033m_e$ ,  $\gamma_0 \approx 3,16$  эВ — энергия взаимодействия между атомами разного сорта (А и В) одного слоя,  $\gamma_1 \approx 0,39$  эВ — энергия взаимодействия между атомами  $A_1$  и  $A_2$ ,  $b \approx 0,246$  нм — постоянная решетки. Выберем векторный потенциал в виде  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ , тогда компоненты вектора кинематического импульса есть:  $\hat{\boldsymbol{\pi}} = (\hat{p}_x - eBy/c, \hat{p}_y)$ . Далее нетрудно найти спектр собственных значений и собственных функций гамильтониана (17):

$$g_{p_x, n, s}(x, y) = \frac{\exp(ip_x x / \hbar)}{\sqrt{4\pi\hbar}} (-s | n-2 \rangle, | n \rangle)^T, \quad (18)$$

$$E_{n, s} = s \frac{\hbar^2}{ma^2} \sqrt{n(n-1)}, \quad s = \pm 1, \quad (19)$$

где  $|n\rangle$  — состояние гармонического осциллятора,  $a$  — магнитная длина.

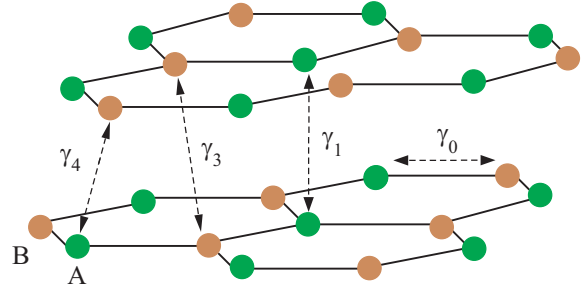


Рис. 6. Структура двухслойного графена.

Как и в разд. 2, соберем начальный волновой пакет из стационарных состояний (18) гамильтониана (17) с номерами уровней Ландау вблизи среднего значения  $n_0$ . Тогда энергетический спектр (19) можно разложить в ряд Тейлора, учитывая слагаемые до второго порядка малости:

$$E_{n \rightarrow n_0} = s \frac{\hbar^2}{ma^2} \sqrt{n_0(n_0-1)} \left( 1 + \frac{n-n_0}{n_0} - \frac{(n-n_0)^2}{8n_0^4} \right). \quad (20)$$

Видно, что при  $n_0 \gg 1$  энергетический спектр имеет квазиэквидистантный характер. Поэтому в качестве начального волнового пакета рассмотрим квантовое состояние, представляющее собой суперпозицию стационарных состояний, расположенных вблизи уровня энергии  $n_0 = 3$ , поскольку в этом случае спектр является существенно неэквидистантным, то возможно наблюдение явлений коллапса и возрождения волнового пакета. Здесь мы будем рассматривать электронные возбуждения в двухслойном графене, принадлежащие верхней зоне ( $s = +1$ ):

$$\Psi(x, y) = \int dp \sum_{n, s} c_{n, s}(p) g_{p, n, s}(x, y), \quad (21)$$

$$c_n^{s=-1}(p) = 0, \\ c_n^{s=+1}(p) = \sqrt{\frac{a}{\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(p-q)^2 a^2}{2\hbar^2}\right) \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (22)$$

Проведя интегрирование по  $p$ , получим компоненты волновой функции в произвольный момент времени:

$$\Psi_1(\mathbf{r}, t) = f(x, y) \sum_{n=1} \frac{\sqrt{4n(n-1)}}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2} - it\sqrt{2n}\right) \left(\frac{y - qa^2 - ix}{a}\right)^{n-2}, \quad (23a)$$

$$\Psi_2(\mathbf{r}, t) = -f(x, y) \sum_{n=1} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2} - it\sqrt{2n}\right) \left(\frac{y-qa^2-ix}{a}\right)^n, \quad (23б)$$

где, как и в предыдущем случае,

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi^{3/4} a \sqrt{\sigma}} \exp\left(-\frac{x^2 + (y-qa^2)^2 - 2ix(y+qa^2)}{4a^2}\right).$$

Далее проанализируем динамику центра волнового пакета. Для этого найдем оператор скорости (см. также [18]):

$$\hat{v}_i = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, x_i] = -\frac{\hbar}{ma} \begin{pmatrix} 0 & \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right)(\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y) \\ \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y) & 0 \end{pmatrix}, \quad (24)$$

где  $\xi$  связана с координатой  $y$  и квазиимпульсом соотношением  $y = \xi a + k_x a^2$ ,  $\mathbf{e}_x$  и  $\mathbf{e}_y$  — единичные векторы декартовой системы координат. Воспользовавшись найденными компонентами волновой функции (23), вычислим среднюю скорость центра волнового пакета  $\bar{v}_x(t) = \int \Psi^+ \hat{v}_x \Psi d\mathbf{r}$ :

$$\bar{v}_x(t) = \frac{\hbar}{ma} \frac{\sqrt{2}}{\sigma\sqrt{\pi}} \sum_{n=0} \sqrt{n} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2 + (n-n_0+1)^2}{2\sigma^2}\right) \cos\left(\left(\sqrt{n(n+1)} - \sqrt{n(n-1)}\right)\omega_c t\right). \quad (25a)$$

Аналогично вычисляется  $y$ -компонента средней скорости центра волнового пакета:

$$\bar{v}_y(t) = \frac{\hbar}{ma} \frac{\sqrt{2}}{\sigma\sqrt{\pi}} \sum_{n=0} \sqrt{n} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2 + (n-n_0+1)^2}{2\sigma^2}\right) \sin\left(\left(\sqrt{n(n+1)} - \sqrt{n(n-1)}\right)\omega_c t\right). \quad (25б)$$

Здесь  $\omega_c = eB/mc$  — классическая циклотронная частота. Заметим, что при больших энергиях волнового пакета ( $n_0 \gg 1$ ) и  $\sigma \sim 1$  энергетический спектр (19) становится квазиэквидистантным, и волновой пакет представляет собой аналог частицы, движущейся по циклотронной орбите. Нетрудно получить также зависимости координат центра волнового пакета от времени, проинтегрировав выражения (25a) и (25б). В этом случае динамика центра будет аналогична динамике, рассмотренной в монослойном графене для подобного пакета.

На рис. 7 представлена зависимость от времени  $x$ -компоненты скорости  $\bar{v}_x(t)$  центра волнового пакета (21), (22) для  $n_0 = 3$ ,  $\sigma = \sqrt{3}$ . Скорость измеряется в

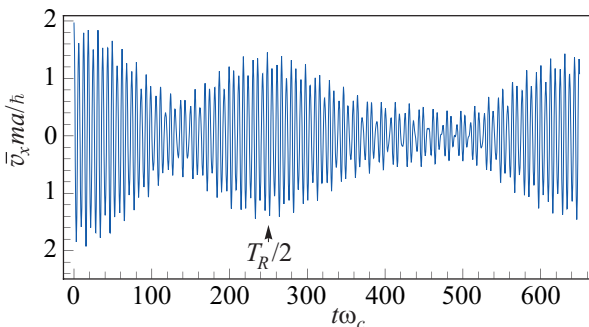


Рис. 7. Зависимость  $x$ -компоненты скорости  $\bar{v}_x$  центра волнового пакета (21), (22) от времени,  $n_0 = 3$ ,  $\sigma = \sqrt{3}$ .

единицах  $\hbar/ma$ , а время — в обратных циклотронных частотах  $\omega_c^{-1}$ . Видно, что для средней скорости характерны периодические затухания и возобновления осцилляций. На начальной стадии эволюции исходный локализованный волновой пакет (рис. 8(a)) движется по классической циклотронной орбите с периодом  $T_{cl} = 2\pi\hbar/E'_{n_0}$ . С течением времени из-за наличия квадратичных слагаемых в разложении энергетического спектра (19), (20) он распределяется практически однородно по циклотронной орбите (рис. 8(б)). Однако в момент времени  $t = T_R/2$  ( $T_R = 4\pi\hbar/E''_{n_0}$ ) пакет возрождается, т.е. снова становится локализованным в пространстве (рис. 8(в)). Соответствующие этой динамике периоды равны  $T_{cl} = 19\omega_c^{-1}$ ,  $T_R = 500\omega_c^{-1}$ . При индукции магнитного поля  $B = 10$  Тл в размерных единицах  $T_{cl} = 0,6$  пс,  $T_R = 15$  пс.

### 3.2. Эволюция волновых пакетов, содержащих состояния с положительными и отрицательными энергиями

Рассмотрим далее, аналогично разд. 2.3, эволюцию волнового пакета, содержащего состояния как верхней, так и нижней энергетических зон в легированном двухслойном графене. Коэффициенты разложения в (21) в этом случае равны:



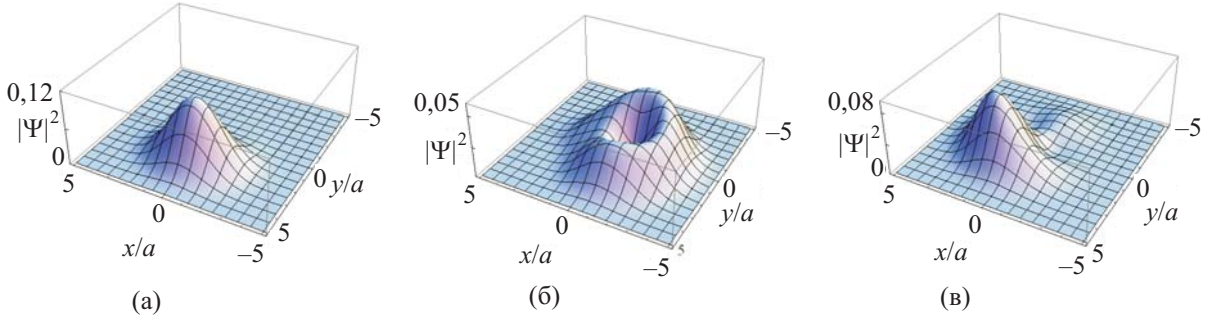


Рис. 8. Эволюция волнового пакета (21), (22) с параметрами  $n_0 = 3$ ,  $\sigma = \sqrt{3}$  в моменты времени  $t = 0$  (а),  $t = 0, 23T_R$  (б),  $t = T_R/2$  (в).

$$c_n^{s=-1}(p) = c_n^{s=1}(p) = \sqrt{\frac{a}{\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(p-q)^2 a^2}{2\hbar^2} - \frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (26)$$

Тогда явный вид компонент волновой функции пакета в произвольный момент времени следующий

$$\Psi_1(\mathbf{r}, t) = f(x, y) \sum_{n=1} \frac{\sqrt{4n(n-1)}}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2}\right) \left(\frac{y-qa^2-ix}{a}\right)^{n-2} \cos(\sqrt{n(n-1)}\tau), \quad (27a)$$

$$\Psi_2(\mathbf{r}, t) = f(x, y) \sum_{n=1} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2\sigma^2}\right) \left(\frac{y-qa^2-ix}{a}\right)^n \sin(\sqrt{n(n-1)}\tau). \quad (27б)$$

Здесь компоненты средней скорости волнового пакета (21) с коэффициентами (26) выражаются следующим образом:

$$\bar{v}_x(\tau) = 0, \quad (28a)$$

$$\bar{v}_y(\tau) = -\frac{\hbar}{ma} \frac{2\sqrt{2}}{\sigma\sqrt{\pi}} \sum_{n=0} \sqrt{n} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2 + (n-n_0+1)^2}{2\sigma^2}\right) \left\{ \sin[(\sqrt{n(n+1)} - \sqrt{n(n-1)})\omega_c t] + \sin[(\sqrt{n(n+1)} + \sqrt{n(n-1)})\omega_c t] \right\}. \quad (28б)$$

В этом случае начальный волновой пакет (рис. 10(а)), состоящий из состояний верхней и нижней энергетических зон, расщепляется на два подпакета (рис. 10(б)),

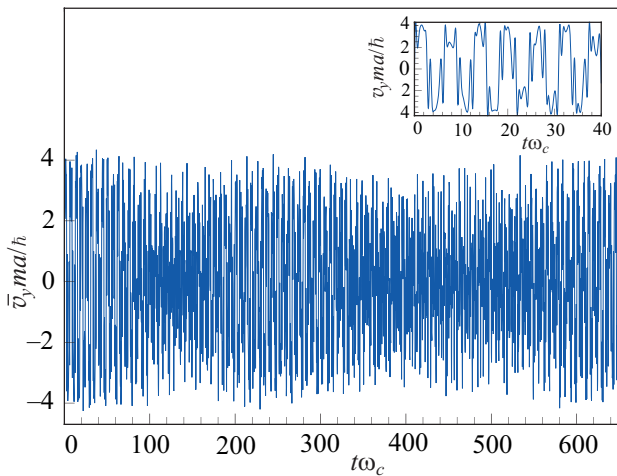


Рис. 9. Зависимость средней скорости  $\bar{v}_y$  центра волнового пакета (21), (26) от времени,  $n_0 = 3$ ,  $\sigma = \sqrt{3}$ .

вращающихся в противоположных направлениях по циклотронной орбите. Таким образом, в любой момент времени  $x$ -компонента средней скорости равна нулю, а  $y$ -компонента, аналогично тому, как это было в разд. 2.3, осциллирует с двумя несоизмеримыми частотами (рис. 9). Первое слагаемое в (28б), как и в случае пакета, составленного из состояний только одной зоны, описывает осцилляции, связанные с периодическим (циклотронным) движением каждого подпакета. Второе слагаемое в (28б) обусловлено чисто квантовым явлением — ZB, представляющим собой в нашем случае интерференцию двух перекрывающихся подпакетов. Поскольку мы рассматриваем вклад уровней энергии близких к  $n_0 = 3$ , где система обладает чисто квантово-механическими свойствами, то ZB носит доминирующий характер по сравнению с процессами периодического коллапса и возрождения волнового пакета на протяжении всего времени, за исключением дробных времен возрождения (рис. 10(в)). Заметим, радиус циклотронной орбиты, который определяется номером уровня Ландау  $n_0$ , в рассматриваемом случае

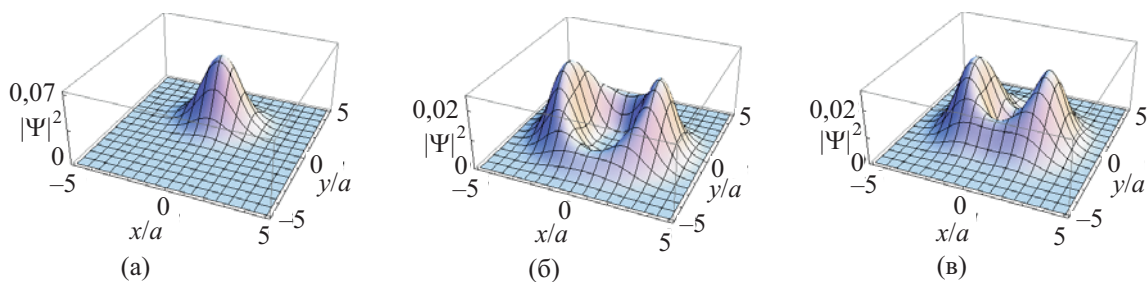


Рис. 10. Распределение плотности вероятности  $|\Psi(x,y)|^2$  для волнового пакета (21), (26) с параметрами  $n_0 = 3$ ,  $\sigma = \sqrt{3}$  в моменты времени  $t = 0$  (а),  $t \approx 0,33T_R$  (б),  $t \approx T_R/2$  (в).

не достаточен для четкого наблюдения расщепления и вращения подпакетов относительно друг друга.

#### 4. Заключение

Рассмотрена эволюция волновых пакетов в однослойном и двухслойном графене, помещенном в перпендикулярное магнитное поле. Показано, что полная картина эволюции может быть достаточно сложной, однако в ней можно выделить несколько характерных времен периодичности, которые зависят от деталей спектра собственных значений исследуемой системы. Если энергетический спектр системы не является эквидистантным и приближенно описывается выражением  $E_n = E_{n_0} + E'_{n_0}(n - n_0) + (E''_{n_0}/2)(n - n_0)^2 + \dots$ , то линейный член разложения определяет период классических осцилляций волнового пакета  $T_{cl} = 2\pi\hbar/|E'_{n_0}|$ ,  $T_R = 4\pi\hbar/|E''_{n_0}|$  — время последующего восстановления,  $T_R m/n$  — время частичного восстановления (где  $m$  и  $n$  — взаимно простые числа) и  $T_{ZB} = 2\pi\hbar/2E_{n_0}$  — период осцилляций типа *Zitterbewegung*. Так, если начальный пакет представляет собой суперпозицию состояний двух зон с близкими квантовыми числами, то в присутствии постоянного перпендикулярного магнитного поля в процессе эволюции можно будет наблюдать расщепление пакета на две части и циклотронное вращение с различными частотами. Далее, поскольку энергетический спектр не является строго эквидистантным, из-за различия циклотронных частот осцилляции среднего циклотронного радиуса затухнут, и лишь через достаточно большой промежуток времени  $T_R/2$  они возродятся вновь.

В результате проведенных аналитических исследований и последующего численного анализа установлено, что как в реальном однослойном, так и двухслойном графене могут наблюдаться эффекты необычной пространственно-временной эволюции волновых пакетов. Вместо стандартной циклотронной динамики — вращения с постоянной частотой  $\omega_c$  — должна наблюдаться эволюция, характеризующаяся сложным фурье-спектром и сопровождаемая полной делокализацией волнового пакета в пределах циклотронной траектории и последующим его восстановлением. Эк-

периментальное наблюдение этого явления позволило бы сделать заключение о характере спектра в реальном однослойном и двухслойном графене. Разумеется, для этого необходимо, чтобы время возрождения (дробного возрождения)  $T_R$  было меньше электронного времени релаксации  $\tau_s$ .

В заключение хотелось бы отметить, что изучение динамики мезоскопических квантовых состояний является актуальной проблемой, поскольку обнаруженные в ходе исследований эффекты должны определять динамику элементарных возбуждений в графене. Полученная в настоящей работе информация о динамике волновых пакетов несомненно будет полезной также для анализа работы электронных приборов на базе как однослойного, так и двухслойного графена.

Авторы выражают глубокую признательность Г.М. Максимовой за регулярные и плодотворные обсуждения настоящей работы. Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта РФФИ (№11-02-00960а), а также фонда «Династия».

1. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A.A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).
2. Y. Zhang, Yan-Wen Tan, Horst L. Stormer, and Ph. Kim, *Nature* **438**, 201 (2005).
3. G.M. Maksimova, V.Ya. Demikhovskii, and E.V. Frolova, *Phys. Rev. B* **78**, 235321 (2008).
4. T.M. Rusin and W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **80**, 045416 (2009).
5. F. Xia, Damon B. Farmer, Yu. Lin, and P. Avouris, *Nano Lett.* **10**, 715 (2010).
6. J.B. Oostinga, H.B. Heersche, X. Liu, A.F. Morpurgo, and Lieven M.K. Vandersypen, *Nature Mater.* **7**, 151 (2008).
7. E. Romera and F. de los Santos, *Phys. Rev. B* **80**, 165416 (2009).
8. И.Ш. Авербух, Н.Ф. Перельман, *УФН* **161**, 41 (1991).
9. В.П. Шляйх, *Квантовая оптика в фазовом пространстве*, Физматлит, Москва (2005).
10. А.В. Тележников, *Тезисы докладов XIX школы по физике полупроводников*, Екатеринбург (2012).
11. T.M. Rusin and W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **78**, 125419 (2008).

12. T.O. Wehling, K.S. Novoselov, S.V. Morozov, E.E. Vdovin, M.I. Katsnelson, A.K. Geim, and A.I. Lichtenstein, *Nano Lett.* **8**, 173 (2008).
13. T.M. Rusin and W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **76**, 195439 (2007).
14. V.Ya. Demikhovskii, G.M. Maksimova, and E.V. Frolova, *Phys. Rev. B* **78**, 115401 (2008).
15. V.Ya. Demikhovskii, G.M. Maksimova, A.A. Perov, and A.V. Telezhnikov, *Phys. Rev. A* **85**, 022105 (2012).
16. V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, and J.P. Carbotte, *Int. J. Mod. Phys. B* **21**, 4611 (2007).
17. C. Bena and G. Montambaux, *Preprint arXiv:cond-mat/0712.0765* (2007).
18. Е.В. Фролова, А.В. Тележников, Н.А. Кравец, *Тезисы докладов XIX школы по физике полупроводников*, Екатеринбург (2012).

### Mesoscopic states in graphene in magnetic field: collapse and revival of wave packets

V.Ya. Demikhovskii, A.V. Telezhnikov, E.V. Frolova, and N.A. Kravets

The effects of wave packet collapse and revival in monolayer and bilayer graphene at an external perpendicular magnetic field are described. The evolution of electron wave packets, which are a superposition of the states with quantum numbers  $n$  around that of some Landau level  $n_0$  was studied. The probability densities as well as average velocities of the packet center were calculated analytically and then visualized. The initial wave packet consisting only of positive energy decomposed into several subpackets at the moments  $t = (m/n)T_R$ , where  $T_R$  is the revival time and  $m, n$  are the mutually prime integers. Besides, it is shown that the behavior of a wave packet containing the states of both energy bands (with  $E_n > 0$  and  $E_n < 0$ ) is more complicated. Such packet splits into two parts, which rotate with a cyclotron frequency in the opposite directions, and then experience collapse and revival. The structure of multipole electromagnetic radiation of these packets is analyzed.

PACS: 73.22.Pr Electronic structure of graphene;  
72.80.Vp Electronic transport in graphene;  
03.65.Pm Relativistic wave equations.

Keywords: graphene, dynamics of the wave packets, mesoscopic states.