

Kwantowy transport ładunku elektrycznego w nanostrukturach grafenowych

Adam Rycerz

*Instytut Fizyki Teoretycznej
Uniwersytet Jagielloński*

Niewiele jest zjawisk w przyrodzie, dla których wyniki pomiarów wielkości fizycznych dane są wprost przez fundamentalne stałe przyrody. W drugiej połowie ubiegłego wieku odkryto i opisano teoretycznie dwa zjawiska z tej grupy: kwantowy efekt Halla i efekt Josephsona, które są obecnie wykorzystywane jako podstawy działania wzorców jednostek oporu i napięcia elektrycznego w układzie SI, czyli ohma i wolta. Dokonane na początku XXI wieku odkrycie dwuwymiarowej odmiany alotropowej węgla, czyli grafenu, pozwoliło ulepszyć oparty na zjawisku Halla wzorzec ohma. Co więcej okazało się, że szereg charakterystyk materiałowych grafenu, takich jak przewodnictwo właściwe czy współczynnik absorpcji światła widzialnego, dane jest przez stałe fundamentalne lub bezwymiarowe współczynniki liczbowe. Chociaż pomiary tych wielkości z dokładnością metrologiczną nie są na razie możliwe, bez wątpienia zyskujemy unikalne możliwości testowania modelu teoretycznego, jakim jest efektywne dwuwymiarowe równanie Diraca-Weyla dla monowarstwowego grafenu.

W tym artykule skoncentrujemy się na wynikających z efektywnego równania falowego wartościach przewodnictwa elektrycznego i tzw. szumu śrutowego, którego definicja pojawi się poniżej, dla grafenu zwracając przy tym uwagę, że rachunki szczegółowe (przy czym samego równania Diraca nie będziemy wyprowadzać, lecz odwołamy się do podręczników; podobnie postąpimy ze wzorem Landauera wiążącym przewodnictwo z kwantowomechanicznym prawdopodobieństwem przejścia elektronu przez układ mikroskopowy) są stosunkowo proste, a odwołują się zasadniczo do narzędzi matematycznych nauczanych na pierwszym roku większości kierunków ścisłych i technicznych w Polsce.

Skąd bierze się opór elektryczny w temperaturze zera absolutnego?

Na początek poszukamy zwięzłej odpowiedzi na zadane powyżej pytanie. Opór elektryczny, przynajmniej w ujęciu szkolnym, kojarzony jest zwykle z drganiami sieci krystalicznej, które prowadzą do rozproszeń elektronów, wpływając na ich ruch kolektywny w sposób podobny do tego, jak lepkość cieczy wpływa na jej przepływ: elektrony, poddane działaniu stałego pola elektrostatycznego, lecz uwięzione w kryształach, nie rozpędzają się bez ograniczeń, osiągają pewną prędkość graniczną, która jest wprost proporcjonalna do wartości przyłożonego pola. Zapis matematyczny

powyższego zdania — z kilkoma dodatkowymi szczegółami — tworzy dobrze znany model Drudego przewodnictwa, którego nie będziemy tutaj przytaczać, a który został wyłożony między innymi w znakomitym podręczniku autorstwa Charlesa Kittela [1]. Nadmienimy jedynie, że źródłem rozproszeń elektronów nie muszą być koniecznie drgania termiczne sieci, lecz także nieporządek występujący np. w stopach metali, różnego rodzaju defekty, czy chociażby struktura polikrystaliczna materiału. Nadprzewodnictwo, czyli zanik oporu elektrycznego połączony z idealnym diamagnetyzmem próbki, jest tematem na osobny artykuł; tutaj zaznaczymy jedynie, że wiele dobrych przewodników (jak miedź, srebro czy złoto) w ogóle nadprzewodnictwa nie wykazuje, według obecnego stanu wiedzy — nie wykazuje go także monowarstwowy grafen [2].

Rzecz wygląda nieco inaczej, gdy ładunek elektryczny płynie przez układ nanoskopowy, taki jak kontakt punktowy w heterostrukturze półprzewodnikowej [3], nanorurka węglowa [4], czy też drut kwantowy zbudowany z kilku atomów [5]. Zakładając dla prostoty, że taki układ nie posiada wewnętrznych stopni swobody prowadzących do degeneracji stanów kwantowych, innymi słowy — że w dostatecznie małym przedziale energii ΔE mamy co najwyżej jeden stan (poziom) kwantowy — zauważamy, że czas przelotu elektronu przez układ jest ograniczony z dołu przez zasadę nieoznaczoności energii i czasu:

$$\Delta t \geq \frac{\hbar}{\Delta E}. \quad (1)$$

Dalej, wiążąc wspomniany przedział energii z różnicą potencjałów elektrochemicznych w makroskopowych elektrodach (rezewuarach) połączonych z układem nanoskopowym (por. Rysunek 1), możemy napisać

$$\Delta E = \mu_L - \mu_R = eU, \quad (2)$$

gdzie U oznacza różnicę potencjałów elektrostatycznych po obu stronach układu, zaś e jest ładunkiem elementarnym (bez znaku). Łącząc powyższe równania otrzymujemy ograniczenie na prąd elektryczny płynący przez układ

$$I = \frac{e}{\Delta t} \leq \frac{e^2}{\hbar} U, \quad (3)$$

co oznacza, że przewodnictwo elektryczne

$$G = \frac{I}{U} \leq \frac{e^2}{\hbar}. \quad (4)$$

Widzimy zatem, że zasada nieoznaczoności energii i czasu prowadzi do skończonej wartości przewodnictwa, a zatem do niezerowej wartości oporu elektrycznego, układu nanoskopowego.

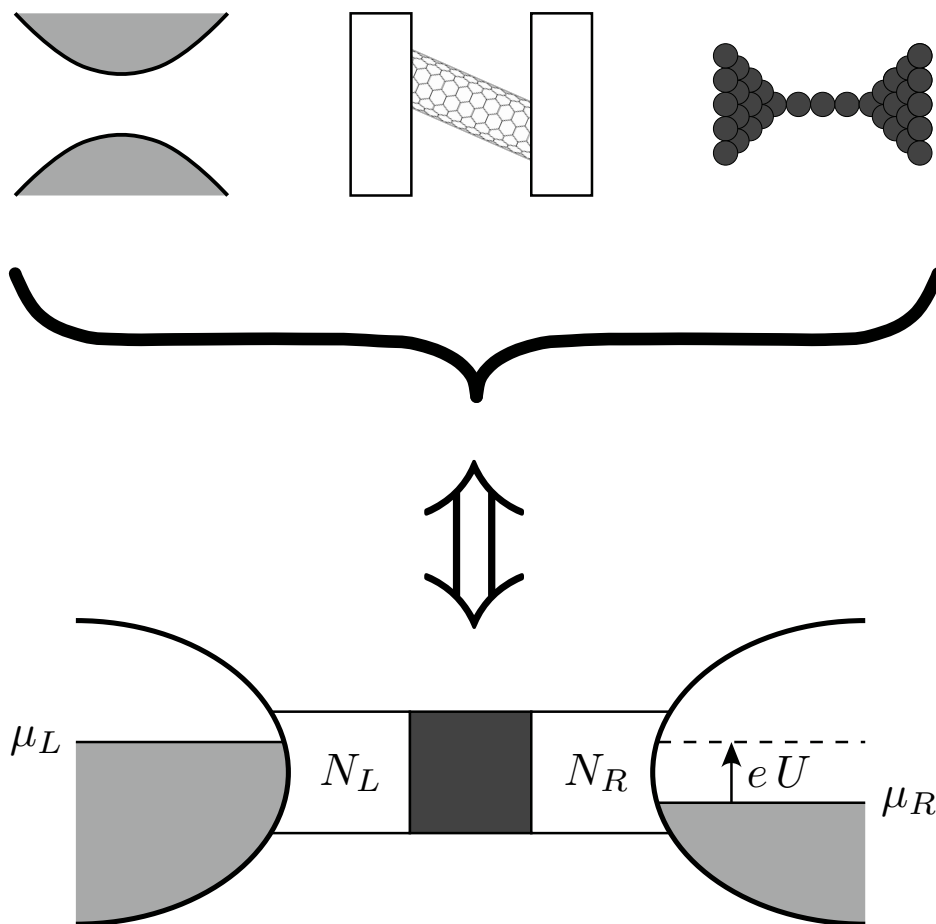
Wzór Landauera-Büttikera i przewodnictwo sharvinowskie

W temperaturze bliskiej zera absolutnego ($T \rightarrow 0$) oraz w granicy liniowej odpowiedzi, tj. sytuacji, w której różnica potencjałów elektrochemicznych także zmierza do zera ($\mu_L - \mu_R = eU \rightarrow 0$), można pokazać, że przewodnictwo elektryczne układu nanoskopowego jest proporcjonalne do sumy prawdopodobieństw przejścia dla tzw. modów normalnych w doprowadzeniach [6],

$$G = g_0 \sum_n T_n(E_F), \quad (5)$$

gdzie g_0 oznacza kwant przewodnictwa, równy $2e^2/h$ dla układów wykazujących degenerację spinową (dla grafenu będzie to $4e^2/h$, z uwagi na dodatkową degenerację

— nazywaną *dolinową* — związaną z obecnością dwóch nierównoważnych punktów Diraca w relacji dyspersji). Prawdopodobieństwa (T_n) są wyliczane poprzez rozwiązanie (ściśle lub przybliżone) odpowiedniego równania falowego (Schrödingera lub Diraca) dla ustalonej energii, która — w związku z przyjętymi założeniami — może być utożsamiona z energią Fermiego E_F . Co istotne, obliczenia prowadzimy zakładając dodatkowo, że pomiędzy makroskopowymi rezerwuarami a układem nanoskopowym znajdują się tzw. falowody, dla których potrafimy podać (dla ustalonego E_F) rozwiązania w postaci fal biegnących, których liczba wynosi, odpowiednio, N_L dla falowodu lewego i N_R dla prawego (por. Rysunek 1). Przyjmujemy także, że fala, która dociera do granicy falowód–rezerwuuar nigdy nie ulega odbiciu. Warto zauważyć, że suma występująca we wzorze (5) to ślad macierzy transmisji, którego wartość nie zależy od wyboru bazy; można zatem oczekiwać, że wynik nie będzie zależał od tego, jak dokładnie skonstruujemy wspomniane falowody, będące — co warto podkreślić — pomocniczą konstrukcją, na ogół niemającą fizycznej interpretacji [7].



Rysunek 1. Ilustracja założeń fizycznych pozwalających na wyprowadzenie wzoru Landauera-Büttikera (5). Część *górna*: przykładowe układy nanoskopowe; od lewej: kwantowy kontakt punktowy w heterostrukturze półprzewodnikowej, nanorurka węglowa, drut kwantowy. Część *dolna*: model równoważny, analizowany teoretycznie, zawierający elektrody makroskopowe (z lewej i prawej strony) o ustalonych potencjałach chemicznych (μ_L i μ_R), falowody przenoszące ustaloną liczbę kanałów (modów normalnych) N_L i N_R , oraz część centralną (ciemny kwadrat) dla której wyliczamy prawdopodobieństwa przejścia (T_n) rozwiązując kwantowomechaniczne równanie falowe.

Jak wspomniano wyżej, szczegóły obliczeń (lub symulacji komputerowych) prowadzących do wyznaczenia wartości prawdopodobieństw T_n zależą od geometrii rozważanego układu. W przypadku, gdy falowody modelowane są jako paski o ustalonej szerokości (W), na krawędziach których funkcja falowa znika, mody normalne mają postać fal płaskich [8], dla których składowa podłużna wektora falowego (k_x) jest ciągła, zaś składowa normalna (k_y) jest skwantowana zgodnie z regułą

$$k_y^{(n)} = \frac{\pi n}{W}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (6)$$

Rachunki są szczególnie proste w przypadkach, gdy obszar centralny (zaznaczony ciemnym kwadratem na Rysunku 1) różni się od doprowadzeń wyłącznie tym, że występuje tam zależny od współrzędnej x (zorientowanej wzdłuż osi głównej układu) potencjał elektrostatyczny, na przykład w formie bariery prostokątnej. Wówczas macierz transmisji ma postać diagonalną (nie występuje rozpraszanie pomiędzy modami normalnymi), zaś w szczególnych przypadkach, jak wspomniana bariera prostokątna, ale też np. potencjał paraboliczny rozważany przez Kemble'a w 1935 roku [9], możliwe jest podanie zwartych wzorów analitycznych.

Dokładnych wyników nie będziemy tutaj przytaczać, zaznaczymy jedynie, że dla rozwiązań otrzymanych metodą zszywania funkcji falowych (ang. *mode-matching*) dla równania Schrödingera, można zapisać w przybliżeniu

$$T_n = T(k_y^{(n)}) \approx \begin{cases} 1 & \text{if } k_y \leq k_F, \\ 0 & \text{if } k_y > k_F, \end{cases} \quad (7)$$

co zapisujemy krócej jako $T_n \approx \Theta(k_F - k_y^{(n)})$, gdzie $\Theta(x)$ oznacza funkcję schodkową Heaviside'a. W równaniu (7) wprowadzamy wielkość k_F będącą wektorem falowym, który odpowiada energii Fermiego E_F (zakładając dla prostoty, że relacja dyspersji jest izotropowa) liczonej względem wierzchołka bariery potencjału w obszarze centralnym. Dalej, przyjmując, że modów dla których $k_y^{(n)} < k_F$ jest bardzo wiele (co zachodzi, jeśli $k_F W \gg 1$), a zatem sumowanie we wzorze (5) możemy w dobrym przybliżeniu zastąpić całkowaniem, otrzymujemy — poprzez równania (6) i (7) — wartość znaną w literaturze jako przewodnictwo *sharvinowskie* [10]

$$G_{\text{Sharvin}} \approx g_0 \frac{W k_F}{\pi}. \quad (8)$$

Warto zaznaczyć, że rozumowanie prowadzące do równania (8) można stosunkowo łatwo zaadoptować również dla przypadku, gdy potencjał elektrostatyczny w obszarze centralnym jest w przybliżeniu stały, zaś szerokość obszaru przewodzącego jest funkcją położenia wzdłuż osi podłużnej (x), zmieniającą się na tyle wolno, że rozpraszanie pomiędzy modami normalnymi można pominąć. Wspomniany przypadek to tzw. balistyczny kontakt punktowy, pokazany schematycznie na Rysunku 1 (część górna), który może być realizowany w heterostrukturach półprzewodnikowych zawierających dwuwymiarowy gaz elektronowy [6].

Szum śrutowy i współczynnik Fano

Drugą, obok przewodnictwa elektrycznego, wielkością charakteryzującą układy nanoskopowe w temperaturach bliskich zera absolutnego jest natężenie tzw. *szumu*

śrutowego. Upraszczając nieco pojęcia podręcznikowe zauważmy, że ładunek elektryczny Q , przepływający przez układ pokazany schematycznie na Rysunku 1 (część dolna) w krótkim przedziale czasu Δt , jest zmienną losową. Wartość oczekiwana takiej zmiennej jest ściśle związana z wprowadzonym wcześniej przewodnictwem elektrycznym G w granicy liniowej odpowiedzi ($U \rightarrow 0$),

$$\langle Q \rangle = GU\Delta t. \quad (9)$$

Przyczyną, dla której wartość Q mierzona w kolejnych przedziałach czasu będzie fluktuować, jest dyskretna (ziarnista) natura ładunku elektrycznego.

Zakładając na chwilę, że elektrony przeskakują z jednego rezerwuaru do drugiego całkowicie niezależnie od siebie dojdziemy do wniosku, że przepływ ładunku jest procesem *poissonowskim*, a dokładniej — wielkość Q/e podlega rozkładowi Poissona; wariancja Q będzie zatem proporcjonalna do podanej we wzorze (9) wartości oczekiwanej,

$$\langle Q^2 - \langle Q \rangle^2 \rangle_{\text{Poisson}} = e\langle Q \rangle = eU\Delta t g_0 \sum_n T_n. \quad (10)$$

Współczynnik Fano definiujemy jako stosunek faktycznie mierzonej wariancji ładunku przepływającego przez układ do wariancji danej wzorem (10), a dokładnie

$$F = \frac{\langle Q^2 - \langle Q \rangle^2 \rangle}{\langle Q^2 - \langle Q \rangle^2 \rangle_{\text{Poisson}}} = \frac{T_n(1 - T_n)}{T_n}. \quad (11)$$

(Czytelników zainteresowanych pełnym wyprowadzeniem wzoru (11) odsyłamy do podręcznika Nazarova i Blanter'a [6].)

Ze wzoru (11) wynika w szczególności, że granica poissonowska ($F \rightarrow 1$) realizowana jest w przypadku złącza tunelowego, dla którego mamy $T_n \ll 1$ dla każdego n . Jest to przypadek krańcowo odmienny od rozważanego wyżej układu balistycznego wykazującego przewodnictwo sharvinowskie; wówczas, zastępując jak poprzednio sumowanie całkowaniem i korzystając z przybliżenia danego wzorem (7), otrzymujemy

$$F \approx 1 - \frac{\int dk_y (T(k_y))^2}{\int dk_y T(k_y)} \approx 0. \quad (12)$$

W ogólności, dla układów fermionowych mamy zawsze $0 < F < 1$; czynnik $1 - T_n$ występujący w liczniku we wzorze (11) jest konsekwencją zakazu Pauliego.

W przypadku wyidealizowanego układu balistycznego mamy $F = 0$, co oznacza, że liczba zliczeń elektronów (Q/e) w ogóle nie fluktuuje w czasie. Można powiedzieć, że elektrony tak bardzo unikają swojego towarzystwa, że "maszerują" w równych odstępach. (Jest to, rzecz jasna, możliwe wyłącznie w temperaturze zera absolutnego, w innej sytuacji pojawi się dodatkowo szum termiczny, czyli proporcjonalny do wartości przewodnictwa szum Nyquista-Johnsona, którego wpływ tutaj pominęliśmy.)

Zagadnienie rozpraszania dla dwuwymiarowego równania Diraca

Korzystając z zebranych powyżej informacji wprowadzających, policzymy teraz — przy kilku dodatkowych założeniach upraszczających — przewodnictwo elektryczne paska grafenowego. Efektywne równanie falowe dla elektronów wędrownych w tym dwuwymiarowym kryształce ma postać równania Diraca–Weyla, którego szczegółowe

wyprowadzenie można znaleźć np. w podręczniku Katsnelsona [11], a które zapisujemy w postaci

$$[v_F \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} + V(x)] \Psi = E \Psi, \quad (13)$$

gdzie niezależna od energii prędkość Fermiego dana jest wzorem $v_F = \sqrt{3}t_0 a / (2\hbar)$, w którym $t_0 \approx 2.7 \text{ eV}$ oznacza całą przeskok dla najbliższych sąsiadów w płaszczyźnie grafenowej, zaś $a = 0.246 \text{ nm}$ to stała sieci (w rezultacie, przybliżona wartość v_F wynosi około 1000 km/s , jest zatem kilkakrotnie niższa niż typowe prędkości Fermiego w metalach). Pozostałe symbole w równaniu (13) to kwantowomechaniczny operator pędu $\mathbf{p} = -i\hbar (\partial_x, \partial_y)$ (zapis ∂_j oznacza tutaj różniczkowanie po wybranej współrzędnej, $j = x, y$), $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ jest wektorem złożonym z macierzy Pauliego [12], zaś o elektrostatycznej energii potencjalnej $V(x)$ zakładamy, że zależy wyłącznie od położenia wzdłuż osi głównej układu.

Przedstawione wyżej założenia sprawiają, że rozwiązania równania (13) możemy poszukiwać w postaci dwukomponentowej (czyli spinorowej) funkcji falowej

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi_a \\ \phi_b \end{pmatrix} e^{ik_y y}, \quad (14)$$

gdzie ϕ_a oraz ϕ_b są funkcjami x . Podstawiając podany wyżej *ansatz* do równania (13) otrzymujemy układ równań różniczkowych zwyczajnych

$$\phi'_a = k_y \phi_a + i \frac{E - V(x)}{\hbar v_F} \phi_b, \quad (15)$$

$$\phi'_b = i \frac{E - V(x)}{\hbar v_F} \phi_a - k_y \phi_b, \quad (16)$$

gdzie primy po lewej stronie oznaczają pochodne względem x . Widzimy, że w układzie równań (15), (16) wielkości k_y oraz E pełnią rolę parametrów, od których zależą rozwiązania (w dalszej części, obliczając m.in. przewodnictwo elektryczne, utożsamimy energię z energią Fermiego, kładąc $E = E_F$).

Warto w tym miejscu skomentować problem kwantowania wartości pędu poprzecznego (k_y) w równaniach (15), (16). Zakładając, że składowa gęstości prądu prostopadła do osi paska grafenowego znika na jego krawędziach (tj. dla $y = 0$ oraz $y = W$), co nazywane jest w literaturze tzw. uwięzieniem masowym (ang. *mass confinement*) [13], otrzymujemy kwantowanie nieco inne niż w przypadku układu schrödingerowskiego, patrz równanie (6), a dokładniej

$$k_y^{(n)} = \frac{\pi(n + 1/2)}{W}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (17)$$

W praktyce, założenia przyjęte w dalszej części sprawią jednak, że obliczając wielkości mierzalne (G i F) będziemy przybliżać sumy występujące we wzorach (5) oraz (11) całkami względem dk_y ; opisana zmiana kwantowania nie ma zatem dla naszych rozważań większego znaczenia.

Rozwiązanie układu równań (15), (16) jest szczególnie proste w przypadku, gdy elektrostatyczna energia potencjalna, czyli funkcja $V(x)$ jest kawałkami stała. Wówczas, rozwiązania w poszczególnych sekcjach (tj. obszarach, w których $V(x)$ jest stałe) mają postać fal płaskich. Przykładowo, dla $E > V(x)$, fale biegnące w dodatnim (+) i ujemnym (-) kierunku wzdłuż osi x wyglądają następująco

$$\phi^{(+)} = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{ik_x x}, \quad \phi^{(-)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{-ik_x x}, \quad (18)$$

gdzie zdefiniowano $e^{i\theta} = (k_x + ik_y)/k_F$, $k_F = (E - V(x))/\hbar v_F$, oraz $k_x = \sqrt{k_F^2 - k_y^2}$. Dla $E < V(x)$ rozwiązania w postaci fal biegnących również istnieją (jest to, nawiasem mówiąc, kluczowa różnica pomiędzy rozwiązaniami bezmasowego równania Diraca a zwykłego równania Schrödingera, która prowadzi w szczególności do zjawiska znanego jako tunelowanie Kleina) i różnią się od podanych we wzorze (18) jedynie niektórymi znakami. Ich wyprowadzenie pozostawimy Czytelnikowi.

Na granicy obszarów różniących się (lokalnie stałą) wartością $V(x)$ dokonujemy zszywania funkcji falowych, które dla dwuwymiarowego równania Diraca sprowadza się do rozwiązania warunków ciągłości dla obu składowych spinorowej funkcji falowej [14]. Przykładowo, rozważając rozpraszanie z prawej strony nieciągłości $V(x)$ na stronę lewą, napiszemy

$$t\phi^{(L,-)} = \phi^{(R,-)} + r\phi^{(R,+)}, \quad (19)$$

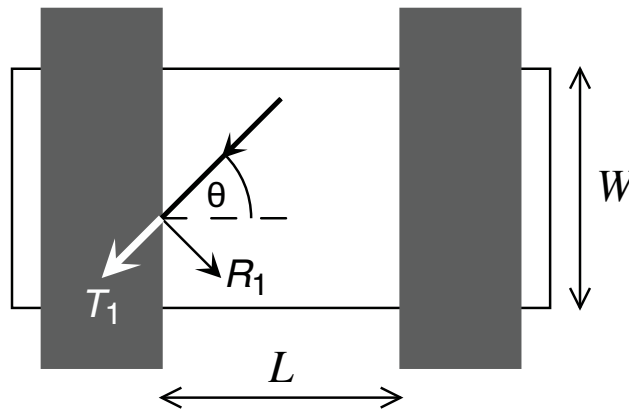
gdzie funkcje spinorowe z indeksami L i R różnią się wartościami k_F oraz k_x [patrz wzór (18)], charakteryzuje je jednak ta sama wartość k_y . Jeśli rozważania dotyczą granicy pomiędzy próbką grafenu a obszarem grafenu przykrytym elektrodą metaliczną (zob. Rysunek 2), rachunki można nieco uprościć przyjmując model elektrody głęboko domieszkowanej, w ramach którego kładziemy $V(x) = -V_\infty$ (gdzie $V_\infty \rightarrow \infty$), funkcje falowe po lewej stronie możemy wówczas zapisać w postaci asymptotycznej

$$\phi^{(L,\pm)} \simeq \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

gdzie dodatkowo pominęliśmy czynnik fazowy, który nie ma znaczenia dla dalszych rozważań. Po podstawieniu powyższego do równania (19) rachunki są już bardzo łatwe; podamy teraz wyniki dla prawdopodobieństw przejścia i odbicia

$$T_1 = |t|^2 = \frac{2 \cos \theta}{1 + \cos \theta}, \quad R_1 = |r|^2 = \frac{1 - \cos \theta}{1 + \cos \theta}, \quad (21)$$

które okazują się zależeć wyłącznie od kąta padania fali płaskiej θ , a dokładniej od wartości $\cos \theta = \sqrt{1 - (k_y/k_F)^2}$. Widzimy w szczególności, że dla $\theta = 0$ mamy $T_1 = 1$ (oraz $R_1 = 0$), co jest manifestacją wspomnianego nieco wyżej tunelowania Kleina (pokręśmy, że rozważana tutaj bariera potencjału ma nieskończoną wysokość).



Rysunek 2. Prostokątna próbka grafenowa o szerokości W (obszar biały) podłączona do elektrod (obszary ciemne) oddalonych o odległość L . Rozpraszanie elektronów Diraca na granicy próbka-elektroda, dla kąta padania θ , charakteryzują współczynniki transmisji (T_1) i odbicia (R_1) podane w równaniu (21).

Prawdopodobieństwo przejścia przez całą próbkę grafenową, a zatem przez dwa uskoki potencjału elektrostatycznego występujące na granicy próbka–elektroda (zob. Rysunek 2) najprościej będzie policzyć korzystając ze wzoru dla podwójnej bariery, którego przejrzyste wyprowadzenie można znaleźć np. w podręczniku Dattya [15],

$$T_{12} = \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \phi}, \quad (22)$$

gdzie wprowadzono przesunięcie fazowe $\phi = k_x L = L\sqrt{k_F^2 - k_y^2}$, związane z propagacją fali płaskiej wzdłuż osi głównej. (Zaznaczmy tutaj, że tak wprowadzone przesunięcie fazowe implikuje również założenie, że ewentualne odbicia od bocznych krawędzi układu nie zmieniają wartości k_y ; w praktyce będzie to oznaczać, że rozważania koncentrujemy na układach, dla których $W \gg L$). Zakładając symetrię bariery, $T_2 = T_1$, $R_2 = R_1$, i podstawiając wzory podane w równaniu (21), możemy teraz jawnie zapisać T_{12} jako funkcję k_y oraz E ,

$$T_{12} = T_{k_y}(E) = \left[1 + \left(\frac{k_y}{\kappa} \right)^2 \sin^2(\kappa L) \right]^{-1}, \quad (23)$$

gdzie

$$\kappa = \begin{cases} \sqrt{k_F^2 - k_y^2}, & \text{for } |k_y| \leq k_F, \\ i\sqrt{k_y^2 - k_F^2}, & \text{for } |k_y| > k_F, \end{cases} \quad (24)$$

zaś wektor falowy Fermiego, po przyjęciu dla obszaru próbki $V(x) = 0$, jest równy $k_F = |E|/(\hbar v_F)$. Wartość bezwzględna w ostatnim wyrażeniu bierze się stąd, że wzory (21) i dalsze wyniki będą identyczne dla $E < 0$; szczegółowe sprawdzenie tej prawidłowości pozostawimy Czytelnikowi.

Przewodnictwo elektryczne i szum śrutowy dla grafenu

Konsekwencje fizyczne podanego wyżej wyrażenia na prawdopodobieństwa przejścia $T_{k_y}(E)$, patrz wzory (23) i (24), omówimy teraz dla dwóch sytuacji fizycznych: próbki neutralnej ładunkowo ($k_F = 0$) oraz granicy sharvinowskiej ($k_F W \gg 1$).

W pierwszym przypadku ($k_F = 0$), dostajemy $\kappa = i|k_y|$ i możemy skorzystać z tożsamości $\sin(ix) = i \sinh x$, otrzymując zaskakująco proste wyrażenie

$$T_{k_y}(0) = \frac{1}{\cosh^2(k_y L)}. \quad (25)$$

W granicy $W \gg L$, sumy występujące we wzorach na przewodnictwo landauerowskie G (5) i czynnik Fano F (11) możemy przybliżyć całkami [patrz wzór (17)], otrzymując

$$\sum_n T_n(0) \approx \frac{W}{\pi} \int_0^\infty dk_y T_{k_y}(0) = \frac{W}{\pi L}, \quad (26)$$

oraz

$$\sum_n (T_n(0))^2 \approx \frac{W}{\pi} \int_0^\infty dk_y (T_{k_y}(0))^2 = \frac{2}{3} \frac{W}{\pi L}. \quad (27)$$

Po uwzględnieniu właściwej dla grafenu, czterokrotnej degeneracji stanów z uwagi na obecność spinowych i dolinowych stopni swobody (kwant przewodnictwa wynosi zatem $g_0 = 4e^2/h$), otrzymujemy wartości przewodnictwa i czynnika Fano

$$G = \frac{4e^2}{\pi h} \frac{W}{L}, \quad F = 1 - \frac{2}{3} = \frac{1}{3}. \quad (28)$$

Wartość $G \propto W/L$ (zamiast, jak w typowym układzie balistycznym, $G \propto W$) oznacza, że neutralny ładunkowo grafen wykazuje uniwersalne przewodnictwo właściwe, $\sigma_0 = 4e^2/(\pi h)$, którego wartość na dodatek zdeterminowana jest przez uniwersalne stałe przyrody. Nieprzypadkowa jest także wartość współczynnika Fano $F = 1/3$, jest to bowiem wartość charakterystyczna dla przewodników ohmowskich (z nieporządkiem). W kontekście grafenu mówi się często o przewodnictwie *pseudodyfuzyjnym* dla podkreślenia, że układ balistyczny — w odpowiednim obszarze parametrów — doskonale emuluje przewodnik ohmowski. Warto podkreślić, że wartości teoretyczne podane we wzorze (28) zostały z zadowalającą dokładnością potwierdzone doświadczalnie w 2008 roku [16].

W granicy sharwinowskiej ($k_F W \gg 1$) sytuacja wygląda nieco inaczej. Możemy wówczas przyjąć, że wpływ modów, dla których $k_y > k_F$ jest zaniedbywalnie mały (są to tzw. mody *evanescentne*) i ograniczyć rozważania do $k_y \leq k_F$. Dalej zauważamy, że podczas sumowania wartości $T_{k_y}(E)$ (lub ich potęg) po $k_y \leq k_F$ wyrażenie

$\sin^2 \left(L \sqrt{k_F^2 - k_y^2} \right)$ we wzorze (23) będzie szybko oscylować, szczególnie dla k_y

zbliżającego się do k_F . Rozsądne wydaje się zatem zastąpienia argumentu sinusa fazą przypadkową i uśrednienie wyniku, co prowadzi do przybliżenia

$$\left(T_{k_y} \right)_{\text{approx}} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{d\varphi}{1 + \left(k_y^2/\chi^2 \right) \sin^2 \varphi} = \sqrt{1 - \left(k_y/k_F \right)^2}, \quad (28)$$

gdzie skorzystaliśmy z całki tablicowej

$$I(a) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{d\phi}{1 + a^2 \sin^2 \phi} = \frac{1}{\sqrt{1 + a^2}}, \quad (29)$$

podstawiając $a = k_y/\chi = k_y/\sqrt{k_F^2 - k_y^2}$. Wzór (28) to nic innego jak dirakowska wersja wzoru (7) dla typowego układu balistycznego; obliczając przewodnictwo landauerowskie ponownie możemy przybliżyć sumowanie całkowaniem, otrzymując

$$G \approx \frac{g_0 W}{\pi} \int_0^{k_F} dk_y \left(T_{k_y} \right)_{\text{approx}} = \frac{\pi}{4} G_{\text{Sharvin}}, \quad (30)$$

gdzie przywołaliśmy wartość przewodnictwa sharwinowskiego daną wzorem (8).

Współczynnik $\pi/4$ jest konsekwencją faktu, że po prawej stronie równania (28) w miejscu, gdzie wcześniej występowała funkcja schodkowa $\Theta(k_F - k_y)$, pojawiło się wyrażenie opisujące łuk okręgu; przewodnictwo grafenu poza punktem neutralności ładunkowej jest zatem zredukowane w porównaniu z typowym układem balistycznym. Co ciekawe, wyprowadzając równanie (30) nie zakładaliśmy wprost, jak to miało miejsce przypadku równania (28), że stosunek szerokości do długości próbki $W/L \gg 1$; hipotetycznie, wynik dany wzorem (30) może zatem mieć zastosowanie zawsze, gdy spełniony jest warunek $k_F W \gg 1$, bez względu na wartość W/L . W praktyce trudno jednak wyobrazić sobie, aby dla próbek niespełniających warunku $W/L \gg 1$ mógł mieć zastosowanie wzór (22) na transmisję podwójnej bariery, będący podstawą całego rozumowania. Wydaje się, że w przypadku próbek grafenowych z $L \gtrsim W$ trudne do kontrolowania efekty krawędziowe znacząco modyfikują przewodnictwo [17].

Aby policzyć czynnik Fano, należy skonstruować podobne przybliżenie dla $T_{k_y}^2$. Wyliczamy zatem [18]

$$\left(T_{k_y}^2\right)_{\text{approx}} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{d\varphi}{\left[1 + \left(k_y^2/\kappa^2\right) \sin^2 \varphi\right]^2} = \sqrt{1 - \left(\frac{k_y}{k_F}\right)^2} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{k_y}{k_F}\right)^2\right], \quad (31)$$

co ostatecznie prowadzi do wyniku

$$F \approx 1 - \frac{\int_0^{k_F} dk_y \left(T_{k_y}^2\right)_{\text{approx}}}{\int_0^{k_F} dk_y \left(T_{k_y}\right)_{\text{approx}}} = \frac{1}{8}. \quad (32)$$

Ta zaskakująca (niezerowa) wartość szumu śrutowego jest dość bliska wynikom otrzymanym doświadczalnie przez zespół z Helsinek [16], które zawierają się w przedziale $F = 0.10 \div 0.15$. Proporcje długości boków próbek użytych w tym doświadczeniu wynosiły $W/L \approx 24$. Warto podkreślić, że pomiary szumu śrutowego urządzeń nanoskopowych zawierających komponenty z różnych materiałów nie są łatwe; w literaturze pojawiły się także wyniki sugerujące, że zależność szumu śrutowego od wypełnienia układu jest słaba, z wartością zawsze bliską $F \approx 1/3$ [19].

Uwagi końcowe

Opis wzbudzeń niskoenergetycznych kwazicząstek w grafenie na pierwszy rzut oka wydaje się trudny, z uwagi na spinorową strukturę efektywnego równania Diraca-Weyla, nietypowy (bo niezawierający pochodnych przestrzennych) operator prądu, jak również szereg zaskakujących własności rozwiązań (w tym tunelowanie Kleina). Co więcej, zdarzają się sytuacje, w których potrafimy rozwiązać analitycznie dwuwymiarowe równanie Schrödingera (opisujące elektrony w heterostrukturach półprzewodnikowych), jednak po zmianie operatora energii kinetycznej na dirakowski jesteśmy skazani na całkowanie numeryczne (tak dzieje się w przywołanym powyżej przypadku rozpraszania na potencjale parabolicznym, za wyjątkiem $E = 0$). W tym krótkim artykule pokazaliśmy, że pewne zagadnienia szczegółowe dotyczące transportu kwantowego w grafenie, jak przewodnictwo elektryczne próbki o kształcie prostokątnym (zarówno w punkcie neutralności ładunkowej jak również z dala od niego), mogą być rozwiązane z użyciem technik matematycznych i aparatu pojęciowego dostępnego dla studentów początkowych lat fizyki i kierunków pokrewnych. Czytelnikom zainteresowanym tą tematyką polecamy także, dostępne w repozytorium *arXiv*, elementarne wyprowadzenie współczynnika absorpcji światła dla monowarstwowego grafenu [20].

Przypisy

[1] Charles Kittel, *Wstęp do fizyki ciała stałego*, Wydawnictwo PWN, Warszawa 1999, rozdział 6.

[2] Listę pierwiastków wykazujących nadprzewodnictwo można znaleźć np. tutaj: <http://www.superconductors.org/Type1.htm>.

- [3] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 848 (1988). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.60.848>.
- [4] C. T. White, T. N. Todorov, *Nature* **393**, 240 (1998). <https://doi.org/10.1038/30420>.
- [5] N. Agraït, A. Levy Yeyati, J. M. van Ruitenbeek, *Physics Reports* **377**, 81 (2003). [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(02\)00633-6](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(02)00633-6).
- [6] Patrz: Yu. V. Nazarov, Ya. M. Blanter, *Quantum Transport: Introduction to Nanoscience*, Cambridge University Press, Cambridge, UK 2009, rozdział 1.
- [7] Z tego samego powodu, wynik będzie niezależny od tego, czy rozważamy rozpraszanie z lewa w prawo, czy też w odwrotnym kierunku.
- [8] Ściśle mówiąc, rozwiązania te mają postać kombinacji liniowych dwóch fal płaskich (z dodatnim i ujemnym k_y), tworzących fale stojące w kierunku y ; szczególnie ten jednak nie ma znaczenia dla prezentowanych dalej rachunków.
- [9] E. C. Kemble, *Phys. Rev.* **48**, 549 (1935). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.48.549>.
- [10] Yu. V. Sharvin, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **48**, 984 (1965) [*Sov. Phys. JETP* **21**, 655 (1965)]. <http://www.jetp.ras.ru/cgi-bin/e/index/e/21/3/p655?a=list>.
- [11] M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge University Press, Cambridge, UK 2012, rozdział 1.
- [12] Należy nadmienić, że równanie (13) stosuje się dla otoczenia doliny K w relacji dyspersji; dla doliny K' macierz σ_y należy zastąpić przez $\sigma_y^* = -\sigma_y$.
- [13] M. V. Berry, R. J. Mondragon, *Proc. R. Soc. Lond. A* **412**, 53 (1987). <https://doi.org/10.1098/rspa.1987.0080>.
- [14] Podobnie jak w przypadku równania Schrödingera, warunki zszycia funkcji falowej są konsekwencją zasady zachowania ładunku. Aby otrzymać operator gęstości prądu, w operatorze Hamiltona po lewej stronie równania (13), $H = v_F \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} + V(x)$, podstawiamy $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}$, a następnie różniczkujemy otrzymany operator $H(\mathbf{A})$ po potencjale wektorowym \mathbf{A} . W efekcie, dostajemy $\mathbf{j} = ev_F \boldsymbol{\sigma}$, a zatem ciągłość prądu sprowadza się do ciągłości komponentów funkcji falowej (operator \mathbf{j} nie zawiera różniczkowania po współrzędnych).
- [15] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, Cambridge, UK 1997.
- [16] R. Danneau, F. Wu, M. F. Craciun, S. Russo, M. Y. Tomi, J. Salmilehto, A. F. Morpurgo, P. J. Hakonen, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 196802 (2008). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.196802>.
- [17] F. Miao, S. Wijeratne, Y. Zhang, U. C. Coskun, W. Bao, C. N. Lau, *Science* **317**, 1530 (2007). <https://doi.org/10.1126/science.1144359>.
- [18] Wykonując całkowanie dla $T_{k_y}^2$, zamiast równania (29) używamy tożsamości

$$I_2(a) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{d\phi}{[1 + a^2 \sin^2 \phi]^2} = \frac{1 + \frac{1}{2}a^2}{(1 + a^2)^{3/2}}. \text{ Niestety, brak zwartego wzoru dla dowolnej całkowitej potęgi } T_{k_y}^n; \text{ wprowadzając zwyczajną (gaussowską) funkcję}$$

hipergeometryczną ${}_2F_1(a, b, c; z)$ możemy zapisać

$$I_n(a) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{d\phi}{[1 + a^2 \sin^2 \phi]^n} = \frac{\Gamma(n - 1/2)}{2\sqrt{\pi} \Gamma(n) (1 + a^2)^{n-1/2}} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, 1 - n, \frac{3}{2} - n; 1 + a^2\right) \\ + \frac{1}{2} {}_2F_1(1/2, n, 1; -a^2) + \frac{\Gamma(1/2 - n)}{2\sqrt{\pi} \Gamma(1 - n)} {}_2F_1(1/2, n, 1/2 + n; 1 + a^2).$$

- [19] L. DiCarlo, J. R. Williams, Y. Zhang, D. T. McClure, C. M. Marcus, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 156801 (2008). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.156801>.
- [20] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, A. K. Geim, *Universal Dynamic Conductivity and Quantized Visible Opacity of Suspended Graphene*, <https://arxiv.org/abs/0803.3718>. [*Science* **320**, 1308 (2008).]