第 57 卷 第 6 期 2008 年 6 月
1000-3290/2008/57(06)/3775-05

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.57, No.6, June, 2008

准粒子谱函数对单层石墨片最小电导率的影响*

罗 涛 朱 伟 石勤伟† 王晓平
(中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室,合肥 230026)
(2007 年 10 月 17 日收到;2007 年 11 月 15 日收到修改稿)

在有效质量近似下,利用久保(Kubo)公式计算了单层石墨片的最小电导率.结果发现最小电导率的大小依赖于准粒子谱函数的函数形式.如果准粒子谱函数取洛伦兹分布,得到最小电导率为 $4e^2/\pi h$.如果准粒子谱函数满足高斯分布,则最小电导率为 $2e^2/h$.

关键词:单层石墨片,最小电导率,久保公式
PACC:7125X,7280R

1. 引 言

自 2004 年英国曼彻斯特大学 Geim 小组成功地剥离出单层石墨片以来,这种只有一个原子层厚度的理想二维体系显示了不同寻常的奇异特性,已成为当前凝聚态物理研究的热点之一.实验上已经发现该体系具有很多新颖的物理性质.例如,强磁场下反常的量子霍耳效应[1]、反弱局域化[2]、弹道输运[3,4]、Josephson 效应[5]、双极性超导特性[6]等.理论上,单层石墨片独特的电子结构和无质量费米子的特征,使得人们可以利用低能的凝聚态物理来模拟一些量子场论所预言的相对论量子现象[1,3,4],例如克莱因佯谬(Klein paradox)[7].人们还研究了单层石墨片条带,解析地给出了锯齿形(zigzag)条带和扶手椅形(armchair)条带的本征能量和本征波函数[8,9],并以石墨条带设计和构筑量子点器件等[10].这些研究工作与进一步完善的微纳加工技术相结合,例如在钌(Ru)表面上制备单层石墨片[11],有望实现基于单层石墨片的全碳集成电路,预示着这种材料具有潜在的广阔应用前景.

对于单层石墨片这一标准的二维体系,根据单参数标度理论的预言[12],其最小电导率在极低温度下应该是连续地趋于零.然而,实验上观察到单层石墨片电导率随着门电压(或载流子浓度)的变化,存在一个相对稳定的极小值(即最小电导率)约为 $4e^2/h$[3,4].因此,如何理解该体系存在普适的最小电导率引起了理论物理学家的广泛兴趣.计算单层石墨片最小电导率最常见的方法是利用久保公式,但迄今发表的计算结果仍存在一定的差异.例如,Katsnelson[13],Castro Neto[14],Gusynin 和 Sharapov[15],Zheng 和 Ando[16] 等得到的结果为 $4e^2/\pi h$,而 Cserti[17] 和 Ziegler[18] 的结果则分别为 $\pi e^2/2h$ 和 $\pi e^2/h$.此外,Ziegler 发现最小电导率取值依赖于不同的极限过程,因而不是普适的[19].Nomura[20] 发现在考虑库仑长程散射情况下,单层石墨片最小电导率的数值计算与文献[3]的实验结果基本符合.

最近针对单层石墨片最小电导率的进一步实验测量表明:最小电导率的大小依赖于电子的输运方式,即弹道输运还是扩散输运[21].在弹道区,最小电导率与样品的尺度有关,仅对短而宽的样品其最小电导率才约为 $4e^2/\pi h$;而在扩散区,最小电导率不依赖于样品的尺寸,因而是普适的,它的取值是弹道区的四倍左右.

上述研究表明,单层石墨片最小电导率的物理起因尚未完全阐明,因此值得我们做进一步研究.我们注意到,已发表的理论工作均是采用洛伦兹分布来描述准粒子的谱函数.但值得指出的是:在传统的二维电子气中,若考虑杂质屏蔽的长程库仑势散射,理论推导的结果表明准粒子谱函数的形式在外加磁场下应是高斯分布,它比用洛伦兹分布描述准粒子谱函数更加符合实验结果[22].这提示我们在研究单

* 国家自然科学基金(批准号:10574119,50121202)资助的课题.
† 通讯联系人.E-mail:phsqw@ustc.edu.cn

层石墨片最小电导率时，是否也可以使用高斯分布来描述准粒子谱函数，同时也考察准粒子谱函数的形式对最小电导率的大小是否存在影响．

本文分别采用洛伦兹分布和高斯分布描述准粒子谱函数，在外加磁场情况下利用久保公式计算了单层石墨片的最小电导率．结果发现：洛伦兹分布时得到的最小电导率是 $4e^2/\pi h$，并且与外加磁场的强弱无关；而高斯分布时最小电导率与外加磁场有关，其在外磁场趋于零时的数值为 $2e^2/h$．这一结果表明最小电导率的数值与准粒子满足的谱函数形式密切相关．

2．计算方法与结果

从久保公式出发，交流电导率 σ_{xx} 可表示为[23]

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2\hbar}{\pi L_x L_y}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}E\frac{f(E)-f(E+\hbar\omega)}{\hbar\omega}\times\mathrm{tr}\{v_x\mathrm{Im}G(E+\hbar\omega)v_x\mathrm{Im}G(E)\},\quad(1)$$

其中 $f(E)=\dfrac{1}{1+\exp(\beta(E-E_F))}$ 是准粒子在温度 T 时的费米分布函数，$\beta=1/k_\mathrm{B}T$．L_x 和 L_y 是样品在 x 轴和 y 轴方向的长度．v_x 为速度算符，由海森伯方程得到 $v_x=\dfrac{i}{\hbar}[H,x]$．其中 $\mathrm{Im}G(E)=-\pi\delta(E-H)$．为了计算直流电导率，我们采用先取极限 $\omega\to 0$，从而 $[f(E)-f(E+\hbar\omega)]/\hbar\omega$ 近似为 $-\partial f/\partial E$．在 $T\to 0(\beta\to\infty)$ 时，直流电导率为

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2\hbar}{\pi L_x L_y}\mathrm{Tr}\{v_x\mathrm{Im}G(E_\mathrm{F})v_x\mathrm{Im}G(E_\mathrm{F})\}.\quad(2)$$

在单层石墨片上外加垂直的均匀磁场 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$，采用有效质量近似，其单电子哈密顿量为

$$H = v_\mathrm{F}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A}),\quad(3)$$

其中费米速度 $v_\mathrm{F}\approx 8\times10^5\ \mathrm{m\cdot s^{-1}}$，泡利矩阵 $\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_x,\sigma_y)$，动量算符 $\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar(\partial x,\partial y)^\mathrm{T}$，$\boldsymbol{A}$ 为磁矢势．我们选择朗道规范 $A=xB\hat{y}$，得到能量本征值和本征波函数为

$$E_{s,n} = sE_n = s\sqrt{2n}\hbar\omega_\mathrm{c},\quad n=0,1,2,3,\cdots\quad(4)$$

其中回旋频率 $\omega_\mathrm{c}=\dfrac{v_\mathrm{F}}{l_\mathrm{c}}$，$\hbar\omega_\mathrm{c}$ 可以用来反映朗道能级之间间隔的一种能量单位．我们注意到能量本征值 E_n 不是正比于 n 的，这一点与薛定谔方程所描述的自由电子的朗道能级的性质是不同的．

当 $n=0$ 时，本征函数是

$$\langle r\mid 0k_y\rangle = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y y}}{\sqrt{L_y}}\begin{pmatrix}0\\ \phi_{0,k_y}\end{pmatrix},$$

$$\phi_{0,k_y}(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}l_\mathrm{c}}}\exp\left(-\frac{(x+l_\mathrm{c}^2k_y)^2}{2l_\mathrm{c}^2}\right).\quad(5\mathrm{a})$$

当 $n=1,2,3,\cdots$ 时，本征函数是

$$\langle r\mid nk_y\rangle_s = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y y}}{\sqrt{2L_y}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i}s\phi_{n-1,k_y}\\ \phi_{n,k_y}\end{pmatrix},$$

$$\phi_{n,k_y}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}l_\mathrm{c}}}\times\exp\left(-\frac{(x+l_\mathrm{c}^2k_y)^2}{2l_\mathrm{c}^2}\right)\times H_n\left(\frac{x+l_\mathrm{c}^2k_y}{l_\mathrm{c}}\right),\quad(5\mathrm{b})$$

其中 $s=\pm1$ 分别描述导带和价带，H_n 是 Hermite 多项式，n 是描述朗道能级的量子数，量子数 $k_y=2\pi m/L_y$（m 是整数，其取值范围受到 L_x 大小限制），回旋半径 $l_\mathrm{c}=\sqrt{\hbar/eB}$．

由于狄拉克方程存在电子-空穴对称性，电中性的单层石墨片的费米能级 E_F 是不依赖于磁场强度的，始终钉扎在狄拉克点上，这里我们可以令 $E_\mathrm{F}=0$，得到

$$_{s'}\langle n'k'_y\mid\mathrm{Im}G(E_\mathrm{F})\mid nk_y\rangle_s = \delta_{s',s}\delta_{n',n}\delta_{k'_y,k_y}(-\pi)\delta(E_n).\quad(6)$$

由海森伯方程得到速度算符为

$$v_x = v_\mathrm{F}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}.\quad(7)$$

当 $n'\geqslant1$ 和 $n\geqslant1$ 时，

$$_{s'}\langle n'k'_y\mid v_x\mid nk_y\rangle_s = \frac{v_\mathrm{F}}{2}\delta_{k_y,k'_y}(-\mathrm{i}s\delta_{n',n-1}+\mathrm{i}s'\delta_{n'-1,n}).\quad(8\mathrm{a})$$

当 $n'=0$ 时，

$$\langle 0k'_y\mid v_x\mid nk_y\rangle_s = -\mathrm{i}s\frac{v_\mathrm{F}}{\sqrt{2}}\delta_{k_y,k'_y}\delta_{0,n-1}.\quad(8\mathrm{b})$$

当 $n=0$ 时，

$$_{s'}\langle n'k'_y\mid v_x\mid 0k_y\rangle = \mathrm{i}s'\frac{v_\mathrm{F}}{\sqrt{2}}\delta_{k_y,k'_y}\delta_{n'-1,0}.\quad(8\mathrm{c})$$

在同一朗道能级上的简并度是 $L_xL_y/2\pi l_\mathrm{c}^2$，所以

$$\mathrm{Tr}\{v_x\mathrm{Im}G(E_\mathrm{F})v_x\mathrm{Im}G(E_\mathrm{F})\} = \frac{L_xL_y}{2\pi l_\mathrm{c}^2}\sum_{n=1}2\pi^2v_\mathrm{F}^2\delta(E_n)\delta(E_{n-1}).\quad(9)$$

在下面的计算过程中，我们分别采用洛伦兹分布和高斯分布描述的准粒子谱函数来计算单层石墨的最小电导率.

洛伦兹分布描述准粒子谱函数为 $\delta_\eta(\varepsilon)=\eta/\pi(\varepsilon^2+\eta^2)$，参数 η 的物理意义是电子受到杂质散射、声子散射以及电子间库仑散射对自能修正虚部的贡献.将洛伦兹分布带入(9)式得到

$$\mathrm{Tr}\{v_x \mathrm{Im}G(E_\mathrm{F})v_x \mathrm{Im}G(E_\mathrm{F})\} = \frac{L_xL_y}{2\pi l_\mathrm{c}^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2\eta^2v_\mathrm{F}^2}{(2n(\hbar\omega_\mathrm{c})^2+\eta^2)(2(n-1)(\hbar\omega_\mathrm{c})^2+\eta^2)}. \tag{10}$$

利用求和公式 $\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{[p+(k-1)q](p+kq)}=\frac{1}{pq}$，得到

$$\mathrm{Tr}\{v_x \mathrm{Im}G(E_\mathrm{F})v_x \mathrm{Im}G(E_\mathrm{F})\} = \frac{L_xL_y}{2\pi\hbar^2}. \tag{11}$$

将上式代入直流电导(2)式计算

$$\sigma_{xx}=\frac{e^2\hbar}{\pi L_xL_y}\cdot\frac{L_xL_y}{2\pi\hbar^2}=\frac{e^2}{\pi h}. \tag{12}$$

如果考虑自旋和子格点简并，最小电导率要乘以因子4，所以最后得到的最小电导率为 $4e^2/\pi h$，这个结果与郑以松等人的结果一致[13—16,19].

如果将高斯分布准粒子谱函数 $\delta_\eta(\varepsilon)=\sqrt{1/2\pi\eta^2}\exp(-\varepsilon^2/2\eta^2)$ 代入(9)式，得到

$$\begin{aligned}&\mathrm{Tr}\{v_x \mathrm{Im}G(E_\mathrm{F})v_x \mathrm{Im}G(E_\mathrm{F})\}\\ &=\frac{L_xL_y}{2\pi l_\mathrm{c}^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{v_\mathrm{F}^2\pi}{\eta^2}\exp\left(-\frac{(2n-1)(\hbar\omega_\mathrm{c})^2}{\eta^2}\right)\\ &=\frac{L_xL_y}{2\pi l_\mathrm{c}^2}\cdot\frac{v_\mathrm{F}^2\pi}{\eta^2}\cdot\frac{\exp\left(-\frac{(\hbar\omega_\mathrm{c})^2}{\eta^2}\right)}{1-\exp\left(-\frac{2(\hbar\omega_\mathrm{c})^2}{\eta^2}\right)}.\end{aligned} \tag{13}$$

令 $t=(\hbar\omega_\mathrm{c})^2/\eta^2=\hbar v_\mathrm{F}^2eB/\eta^2$，它是一个无量纲的数，代表朗道能级之间间隔的能量单位与准粒子谱展宽之比的平方.

将(13)式代入(2)式，得到准粒子谱函数为高斯分布时的最小电导率为

$$\sigma_{xx}=\frac{e^2}{h}\cdot\frac{te^{-t}}{1-e^{-2t}}. \tag{14}$$

从这个结果中我们可以看到，如图1所示，最小电导率由参数 t 的大小决定.当外磁场趋于零时(即 $t\to0$)，最小电导率 $\sigma_{xx}=e^2/2h$，与准粒子谱函数展宽无关，因而是普适的.如果考虑自旋和子格点简并，那么 $\sigma_{xx}=4\times e^2/2h=2e^2/h$.当外加磁场和准粒子谱函数展宽有限时，最小电导率随 $t\sim B/\eta^2$ 的变化而改变.当准粒子谱函数展宽趋于零时(即 $t\to\infty$)，最小电导率 σ_{xx} 也趋于零.

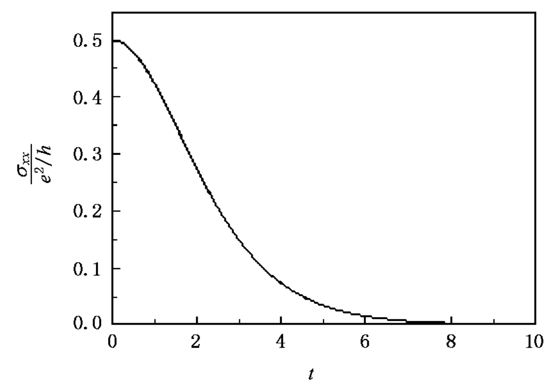

图1　准粒子谱函数满足高斯分布时最小电导率 σ_{xx} 随 t 的变化

采用高斯分布描述准粒子谱函数得到的无外加磁场时单层石墨片的最小电导率 $2e^2/h$ 比用洛伦兹分布描述准粒子谱函数所得结果 $4e^2/\pi h$ 要大一些，更加接近实验的结果.另外，从结果中可以看出，如果准粒子谱函数形式满足高斯分布，那么在外磁场趋于零的时候，杂质引起的展宽是不会影响到最小电导率的，因而是普适的.但是当外磁场不为零的时候，最小电导率依赖于外磁场强度和杂质引起的谱分布的展宽，这与洛伦兹分布得到的结果是截然不同的.从(12)式中看出，如果准粒子谱函数为洛伦兹分布时，最小电导率是不依赖于外磁场强度与杂质引起的展宽的.从我们的计算可以看出，最小电导率的大小及其性质依赖于准粒子谱函数的分布形式，这还有待于实验的进一步验证.

准粒子谱函数的分布形式及其展宽代表的是杂质散射及电子间库仑相互作用对费米面附近自由粒子的修正.尤其在狄拉克点附近，一方面由于库仑相互作用没有得到很好的屏蔽，另一方面由于单层石墨片是一个严格的二维体系，热力学的涨落会引起各种形式的缺陷，因此在狄拉克点附近的输运性质主要是由库仑相互作用和杂质散射决定的.我们的工作表明，准确地了解杂质散射和库仑相互作用如何影响狄拉克点附近准粒子谱函数的性质，对进一步理解扩散区最小电导率是至关重要的.最近的研究表明，库仑相互作用的修正使得费米液体的概念在狄拉克点附近是边缘的(marginal)[24]，因此，在狄拉克点附近准粒子谱函数应取何种表达形式，仍需要理论和实验更深入的研究.

3. 结 论

本文从久保公式出发，计算了在外加均匀磁场情况下单层石墨片的最小电导率.研究结果表明，最小电导率的大小及其性质依赖于准粒子谱函数的分布形式.若采用洛伦兹分布描述准粒子谱函数，得到的最小电导率大小为 $4e^2/\pi h$，并且这一结果与外加磁场的强弱和准粒子谱函数展宽无关.若采用高斯分布描述准粒子谱函数，在外磁场趋于零时，其最小电导率为 $\sigma_{xx}=2e^2/h$，这一结果不依赖于准粒子谱函数的展宽，因而是普适的，但在外磁场不为零时，最小电导率依赖于外磁场的强弱和准粒子谱函数展宽之比.

[1] Novoselov K S ，Geim A K，Mozorov S V，Jiang D，Zhang Y，Dubonos S V，Gregorieva I V，Firsov A A 2004 *Science* **306** 666

[2] Morozov S V，Novoselov K S，Katsnelson M I，Schedin F，Ponomarenko L A，Jiang D，Geim A K 2006 *Phys*. *Rev*. *Lett*. **97** 016801

[3] Novoselov K S，Geim A K，Morozov S V，Jiang D，Katsnelson M I，Grigorieva I V，Dubonos S V，Firsov A A 2005 *Nature* **438** 197

[4] Zhang Y B，Tan Y W，Stormer Horst L，Kim Philip 2005 *Nature* **438** 201

[5] Titov M，Beenakker C W J 2006 *Phys*. *Rev*. B **74** 041401

[6] Heersche Hubert B，Jarillo-Herrero Pablo，Oostinga Jeroen B，Vandersypen Lieven M K，Morpurgo Alberto F 2007 *Nature* **446** 56

[7] Katsnelson M I，Novoselov K S，Geim A K 2006 *Nat*. *Phys*. **2** 620

[8] Sasaki K，Murakami S，Saito R 2006 *Appl*. *Phys*. *Lett*. **88** 113110

[9] Zheng H X，Wang Z F，Luo T，Shi Q W，Chen Jie 2007 *Phys*. *Rev*. B **75** 165414

[10] Wang Z F，Shi Q W，Li Q X，Wang X P，Hou J G，Zheng H X，Y Y，Chen J 2007 *Appl*. *Phys*. *Lett*. **91** 053109

[11] Pan Y，Shi D X，Gao H J 2007 *Chinese Physics* **16** 3151

[12] Abrahams E，Anderson P W，Licciardello D C，Ramakrishnan T V 1979 *Phys*. *Rev*. *Lett*. **42** 673

[13] Katsnelson M I 2006 *Eur*. *Phys*. *J*. B **51** 157

[14] Peres N M R，Guinea F，Castro Neto A H 2006 *Phys*. *Rev*. B **73** 125411

[15] Gusynin V P，Sharapov S G 2006 *Phys*. *Rev*. B **73** 245411

[16] Zheng Y，Ando T 2002 *Phys*. *Rev* B **65** 245420

[17] Cserti J 2007 *Phys*. *Rev*. B **75** 033405

[18] Ziegler K 2007 *Phys*. *Rev*. *Lett*. **97** 266802

[19] Ziegler K 2007 *Phys*. *Rev*. B **75** 233407

[20] Nomura K，MacDonald A H 2006 *Phys*. *Rev*. *Lett*. **96** 256602

[21] Miao F，Wijeratne S，Zhang Y，Coskun U C，Bao W，Lau C N 2007 *Science* **317** 1530

[22] Ando T，Fowler A B，Stern F 1982 *Rev*. *Mod*. *Phys*. **54** 437

[23] Grosso G，Parravicini G P 2006 *Solid State Physics*，*Elsevier* (Singapore) Pte Ltd. p439

[24] Das Sarma S，Hwang E H，Tse Wang-Kong 2007 *Phys*. *Rev*. B **75** 121406

Effect of the spectral function of quasiparticle on minimal conductivity of graphene *

Luo Tao Zhu Wei Shi Qin-Wei† Wang Xiao-Ping

(*Hefei National Laboratory for Physical Sciences at Microscale*, *University of Science and Technology of China*, *Hefei* 230026, *China*)

(Received 17 October 2007; revised manuscript received 15 November 2007)

Abstract

Under effective-mass approximation, the Kubo formula is used to calculate the minimal conductivity of graphene. It is found that the minimal conductivity depends on the spectral function of quasiparticle. If the distribution of the spectral function is taken to be Lorentz distribution, the minimal conductivity is $4e^2/\pi h$. If the distribution of the spectral function satisfies Gaussian distribution, however, the minimal conductivity is $2e^2/h$.

Keywords: graphene, minimal conductivity, Kubo formula

PACC: 7125X, 7280R

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10574119, 50121202).

† Corresponding author. E-mail: phsqw@ustc.edu.cn