

A Zitterbewegung általános elmélete

PhD dolgozat tézisei

2010

Dávid Gyula

ELTE TTK Fizikai Intézet
Atomfizikai Tanszék

Dolgozatom a Zitterbewegung (ZB), azaz a szabad részecskék gyors oszcilláló mozgása Erwin Schrödinger által immár nyolcvan éve felfedezett, de még ma sem eléggé ismert és értett kvantumjelenségének fizikai és matematikai alapjairól szól, különös tekintettel az utóbbi években számos különböző szilárdtestfizikai és nanofizikai rendszerben felbukkant, az eredeti Schrödinger-féle ZB-hez hasonló, de tőle sok tekintetben eltérő jelenségekre. Főbb megállapításaim a következők:

1. A ZB igen általános kvantumjelenség, számos kvantumrendszerben előfordul. Fellépésének szükséges feltételei a következők:
 - Több komponensű kvantumrendszer, melynek Hilbert-tere a szokásos végtelen dimenziós tér (pl. függvénytér) és egy véges dimenziós komplex vektortér tenzori szorzata. A hullámfüggvény több komponense által leírt véges sok szabadsági fok fizikailag igen eltérő lehet (pl. a Dirac-elektron spinor-komponensei, az egyrétegű grafén elemi cellájának két nem ekvivalens helyzetű atomja, a kétrétegű grafén rétegei, szilárdtestek vegyérték- és vezetési sávja, a másodrendű Klein–Gordon-egyenlet elsőrendűre visszavezetésekor megjelenő komponensek stb.).
 - Kvázi-szabad kvantumrendszer. Ez azt jelenti, hogy a rendszert leíró, dinamikáját megadó Hamilton-operátor csak az impulzustól (vagy kváziimpulzustól) függ, a helyoperátortól nem. Ez kétféleképp fordulhat elő: a rendszer ténylegesen eltolásinvariáns (pl. a relativisztikus szabad elektron), vagy a rendszer matematikai leírása formálisan kiküszöböli a helyfüggést (pl. a szilárdtestek sávmélete, amely a bonyolult helyfüggő részleteket a sokszagos diszperziós reláció függvényalakjába transzformálja). Megjegyzés: ez a feltétel nem azt jelenti, hogy helyfüggő Hamilton-operátor esetén nem léphet fel a ZB-hez hasonló, vagy még bonyolultabb mozgás, hanem inkább arra utal, hogy ilyen esetben nincs egyértelmű módszer a klasszikusnak megfelelő „sima” mozgás és az arra rakódó oszcillációk szétválasztására.
 - A belső szabadsági fok és a translációs szabadsági fok összekapcsolódása. Ezt a legegyszerűbben az impulzuszüggő mátrixelemeket tartalmazó nemdiagonális Hamilton-operátorral tudjuk megvalósítani. Ezt a kapcsolatot nevezhetjük „általánosított spin-pálya-csatolásnak” is.

A fenti feltételek fennállása esetén – hacsak speciális extra szimmetria nem tiltja – a rendszerben fellép a Zitterbewegung.

2. A dolgozatban bemutatott, a [C] cikkben publikált általános eljárás, amely az operátorok projektor-felbontásán alapul, a fenti alakú Hamilton-operátorok esetén megadja a ZB jelenségének teljes leírását, azaz a Heisenberg-képbeli helyoperátor egzakt időfüggését. A helyoperátor a következő tagokból áll:
- A kezdeti helyzet operátora, amely megegyezik a Schrödinger-képbeli helyoperátorral, azaz az impulzus szerinti gradienssel.
 - Lineáris, állandó sebességű mozgás. A sebességoperátor a Hamilton-operátor egyes energia-sajátaltalereire vetítő projektorok és a megfelelő energia-sajátérték impulzus szerinti gradienseként előálló parciális sebességek tenzori szorzatainak összege. E parciális sebességvektorok általában nem párhuzamosok sem egymással, sem az impulzusvektorral.
 - Állandó eltolódás – ez a tag lényegében az oszcilláló tagok kezdeti értékének beállítására szolgál, technikailag érdemes az oszcilláló tagokba beolvasztani.
 - Oszcilláló tagok, azaz a tulajdonképpeni Zitterbewegung. A korábbi vélekedéssel szemben megmutattam, hogy a ZB általában nem egyetlen frekvenciájú jelenség, hanem az adott impulzus-értékhez tartozó összes energiaértékek közti különbségi, lebegési frekvencia megjelenik benne. Az egyes módusok együtthatói az energia-sajátaltalerekre vetítő projektorokból és azok impulzus szerinti gradienséből konstruálhatók meg.
3. A Zitterbewegungnak a közvélekedéssel szemben sem a speciális relativitáselmélethez, sem a spin jelenségéhez nincs közvetlen köze. Pusztán történeti véletlen, hogy a ZB jelensége először az elektron spinjét is leíró relativisztikus Dirac-egyenletben bukkant fel. Ez a jelenségkör is teljesíti a ZB fenti három kritériumát – csak ennyi a kapcsolat. Így már érthető, hogy a szilárdtestfizikai modellrendszerekben, ahol nincsenek relativisztikus sebességek, de van többkomponensű hullámfüggvény és általánosított SO-kölcsönhatás, miért oly gyakori a ZB megjelenése.
4. Mikor nem jelenik meg a ZB? Erre egy érdekes példát tudtam mutatni: a Rashba–Dresselhaus-modell speciális esetét, amikor csak a rendszer energia-sajátértékei függenek az impulzustól, a sajátaltalerek nem, lévén azok fixek. Ebben az esetben a projektorok impulzus szerinti gradiensei, így az összes ZB-együttható is zérus. Hasonló jelenség más kvantumrendszerekben is előfordulhat.

5. Általános tárgyalásunk könnyen alkalmazható volt az irodalomban a ZB-re vonatkozó összes korábbi, elszórt, más-más *ad hoc* számítási módszerrel előállított részeredmény rekonstrukciójára, olykor kiigazítására ([B] és [C] cikkek). Emellett természetesen korábban nem tárgyalt, bonyolultabb rendszerek vizsgálatára is alkalmaztuk. A kétrétegű grafén izotróp modelljében fellépő ZB jelenségét az irodalomban elsőként [C] cikkünk, illetve annak [C1] kiegészítése írta le. A kétrétegű grafén anizotróp modelljére vonatkozó hasonló eredményeink publikálását a közeljövőben tervezzük.

A következő két állítás részletes leírása már nem szerepel a dolgozatban, ezek a dolgozat megírása óta végzett munka új, még csak részben publikált eredményei:

6. Új, meglepő és fontos fejlemény, hogy a vizsgált modellrendszerek transzportjelenségeinek (elektromos vezetőképesség, Hall-effektus stb.) leírása során ugyanazok az együttható-mátrixok jelennek meg, mint a ZB esetén. Ez a két jelenségkör közti mély kapcsolatra utal. A részleteket [A] és [D] cikkünkben írtuk le. A számítás kulcslépése itt is a Hamilton-operátor projektor-felbontása volt. Ez a kapcsolat egyrészt segíthet a ZB – közvetett – kísérleti kimutatásában, másrészt lehetővé teszi a nemtriviális egyedi elektronmozgású rendszerek bonyolult transzportjelenségeinek mélyebb megértését, esetleges vezérlését is.
7. A különböző impulzusú hullámok keveredése a gyakorlatban a ZB kioltásához, gyors lecsengéséhez vezethet. Általános elméletünk segíthet megtalálni azokat az eseteket, amikor a diszperziós reláció impulzsfüggésének speciális alakja miatt a ZB nem cseng le, hanem tartósan fennmaradhat. Ezt a kérdést további tanulmányozást igényel, valószínűleg a másodkvantált formalizmus felhasználásával.

A dolgozat témájából megjelent cikkek:

[A] József Cserti, András Csordás, and Gyula Dávid 'Role of the trigonal warping on the minimal conductivity of bilayer graphene', Phys. Rev. Lett. **99**, 066802 (2007).

[B] József Cserti and Gyula Dávid, 'Unified Description of the Zitterbewegung for Spintronic, Graphene, and Superconducting Systems', Phys. Rev. **B 74**, 172305 (2006).

[C] Gyula Dávid and József Cserti, 'General Theory of the Zitterbewegung', Phys. Rev. **B 81**, 121417(R) (2010).

[C1] Az előző cikk részletesebb verziója: arXiv:0909.2004v3 (2009)

[D] József Cserti and Gyula Dávid, 'Relation between Zitterbewegung and the charge conductivity, Berry curvature and the Chern number of multi band systems', Phys. Rev. **B 82**, 201405(R) (2010).