

PACS: 73.22.-f, 73.63.Fg

M.J. Majid¹, С.С. Савинский²

ДИНАМИКА ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ В УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

¹University of Basrah /IRAQ-Basrah

²Удмуртский государственный университет
ул. Университетская, 1, г. Ижевск, 426034, Россия

Статья поступила в редакцию 25 марта 2013 года

В гейзенберговском представлении для электронов проводящей углеродной нанотрубки в длинноволновом приближении проанализирована временная зависимость операторов координат, содержащих линейно-растущие и осциллирующие во времени слагаемые. Для локализованных электронных состояний проводящей углеродной нанотрубки изучено явление осциллирующей зависимости средних значений координат, известное в литературе как явление Zitterbewegung (ZBW).

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, локализованные квантовые состояния, волновые пакеты

У гейзенбергівському представленні для електронів провідної вуглецевої нанотрубки у довгохвильовому наближенні проаналізовано часову залежність операторів координат, які містять доданки, що лінійно зростають та осцилюють у часі. Для локалізованих електронних станів провідної вуглецевої нанотрубки вивчено явище осцилювальної залежності середніх значень координат, відоме в літературі як явище Zitterbewegung (ZBW).

Ключові слова: вуглецеві нанотрубки, локалізовані квантові стани, хвильові пакети

Авторами работы [1] в длинноволновом приближении $ak_0 \leq 1$ (где a – межатомное расстояние в углеродной нанотрубке, k_0 – несущий волновой вектор пакета) рассмотрена задача эволюции локализованных квантовых состояний с использованием модельного гамильтониана Ando. Показано, что для волновых пакетов в проводящих нанотрубках может иметь место сложная динамика, связанная с интерференцией квантовых состояний валентной зоны и зоны проводимости. Впервые эта задача для локализованных электронных квантовых состояний, обладающих цилиндрической симметрией, в полупроводниковой углеродной нанотрубке анализировалась в работе [2]. В дополнение к [2] нами рассмотрена общая постановка задачи об эволюции локализованного квантового состояния в проводящей углеродной нанотрубке.

Интерференция квантовых состояний валентной и проводящих зон электронного спектра приводит к осциллирующим зависимостям средних значений координат и скоростей электрона, известным в литературе как явление ZBW, теоретически изученным в ряде работ применительно к графену и двумерным полупроводниковым структурам (см. обзор [3]).

Сходство явлений ZBW в графене и проводящей углеродной нанотрубке связано с особенностями электронного спектра и «наследованием» электронными свойствами углеродной нанотрубки электронных свойств графена. Факт наследования электронных свойств имеет геометрическую интерпретацию: углеродную нанотрубку можно представить как результат сворачивания графенового листа. Отличие явлений ZBW в углеродной нанотрубке и графене обусловлено квантованием поперечной компоненты импульса электрона при сворачивании графенового листа, а также различной размерностью: графен – двумерный объект, углеродная нанотрубка – квазиодномерный.

В длинноволновом пределе гамильтониан электрона углеродной нанотрубки наследуется от гамильтониана графена:

$$H = V_F (\sigma_x p_x + \sigma_y p_y), \quad (1)$$

где V_F – скорость носителей; p_x, p_y – компоненты оператора импульса; σ_x, σ_y – матрицы Паули. Из (1) следует сохранение импульса, собственные функции оператора Гамильтона представляют собой плоские волны.

В настоящей работе рассмотрим уравнения эволюции операторов координаты в гейзаенберговском представлении для гамильтониана (1), используя соотношения

$$-i\hbar\dot{x}(t) = [H, x(t)], \quad -i\hbar\dot{y}(t) = [H, y(t)], \quad (2)$$

где $x(t), y(t)$ – гейзенберговские операторы координаты; \hbar – постоянная Планка; квадратными скобками обозначен коммутатор операторов. Вычисление правых частей (2) с учетом коммутационных соотношений операторов импульса и координаты $[p_x, x(t)] = -i\hbar$, $[p_y, y(t)] = -i\hbar$ приводит к эволюционным уравнениям

$$\begin{aligned} -i\hbar\dot{x}(t) &= -i\hbar\sigma_x(t)V_F, & -i\hbar\dot{y}(t) &= -i\hbar\sigma_y(t)V_F, \\ -i\hbar\dot{\sigma}_x(t) &= [H, \sigma_x(t)], & -i\hbar\dot{\sigma}_y(t) &= [H, \sigma_y(t)], \end{aligned} \quad (3)$$

где $\sigma_x(t), \sigma_y(t)$ – гейзенберговские операторы, соответствующие в исходный (нулевой) момент времени матрицам Паули $\sigma_x(0), \sigma_y(0)$. Интегрирование уравнений (3) приводит к следующим временным зависимостям операторов координат от времени:

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0) + \frac{V_F^2 p_x t}{H} + \frac{i\hbar V_F}{2} \left(\sigma_x(0) - \frac{V_F p_x}{H} \right) \frac{1}{H} (\exp(-2iHt/\hbar) - 1), \\ y(t) &= y(0) + \frac{V_F^2 p_y t}{H} + \frac{i\hbar V_F}{2} \left(\sigma_y(0) - \frac{V_F p_y}{H} \right) \frac{1}{H} (\exp(-2iHt/\hbar) - 1), \end{aligned} \quad (4)$$

где $x(0)$, $y(0)$ – начальные значения координат, $1/H$ – обратный оператор Гамильтона. Формулы (4) содержат линейно-растущие во времени слагаемые и осциллирующие во времени слагаемые, ответственные за явление ZBW. Дифференцируя по времени уравнения (4), можно получить гейзенберговские операторы для проекций скорости электрона и тока.

Рассмотрим геометрическую процедуру получения углеродной нанотрубки путем сворачивания полосы на графеновой плоскости, определяемой вектором хиральности

$$C = i_1 a_1 + i_2 a_2,$$

где a_1 , a_2 – базисные векторы элементарной ячейки графена; i_1 , i_2 – целые числа (индексы хиральности).

Тип проводимости углеродной нанотрубки определяется из условий [4]: разность индексов хиральности удовлетворяет соотношению $|i_1 - i_2| = 3N + \nu$ (где N – целое число; ν принимает три значения $\nu = 0, \pm 1$: значение $\nu = 0$ определяет проводящие углеродные нанотрубки, $\nu = \pm 1$ – полупроводниковые). Трансформацию электронного спектра при сворачивании графеновой полосы можно понять из следующих соображений: для гамильтониана (1) рассмотрим собственные функции, представляющие собой плоские волны, которые соответствуют условию периодичности на противоположных краях полосы; направление вектора хиральности примем за направление координатной оси Ox . Это условие приводит к собственным функциям [1]:

$$|\Psi_{k_y, nS}\rangle = \frac{1}{\sqrt{BL}} \exp(ik_x(n)x + ik_y y) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} b(n, k_y) \\ S \end{pmatrix}, \quad b(n, k_y) = \frac{k_x(n) - ik_y}{\sqrt{k_x^2(n) + k_y^2}}, \quad (5)$$

здесь B – длина полосы в направлении оси Oy ; L – ширина графеновой полосы в направлении оси Ox ; $k_x(n) = \frac{2\pi n}{L}$ – дискретная компонента проекции

волнового вектора на ось Ox , где n – число, нумерующее дискретные квантовые состояния на полосе, $0 \leq x \leq L$. Волновая функция (5) представляет собой двухкомпонентный псевдоспинор, каждая из компонент которого определяет координатную волновую функцию электрона, локализованного на одной из двух атомных подрешеток графеновой полосы. В формуле (5) параметр $S = \pm 1$ нумерует положительную и отрицательную ветви энергии $E_{k_y, nS} = SV_F \hbar \sqrt{k_x^2(n) + k_y^2}$, $\hbar k_y$ – импульс электрона вдоль оси Oy .

Приведенные выше формулы (5) позволяют идентифицировать волновые функции и энергии электронных состояний в длинноволновом приближении на поверхности углеродной нанотрубки. Для этого в формулах сделаем замену переменных и введем новые обозначения: $x \rightarrow R\varphi$, $y \rightarrow z$, $L = 2\pi R$, R – радиус нанотрубки, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ – полярная координата. В результате волновые функции (5), определенные на графеновой полосе в цилиндрических координатах (φ , z) на поверхности углеродной нанотрубки, могут быть представлены в следующем виде [1]:

$$|\Psi_{kmS}\rangle = \frac{1}{2\pi\sqrt{R}} \exp(im\varphi + ikz) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{b(m,k)}{S} \right), \quad b(m,k) = \frac{k_\varphi(m) - ik}{\sqrt{k_\varphi^2(m) + k^2}}, \quad (6)$$

$$E_{kmS} = SV_F \hbar \sqrt{k_\varphi^2(m) + k^2},$$

где $k_\varphi(m) = \frac{1}{R} \left(m - \frac{\nu}{3} \right)$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ – магнитное квантовое число, наследуемое от используемого в формуле (5) квантового числа n ; волновой вектор k наследуется от компоненты волнового вектора k_y . В дальнейшем мы ограничимся случаем $\nu = 0$, который соответствует проводящим углеродным нанотрубкам. Заметим, волновая функция (6), построенная из (5), представляет собой двухкомпонентный псевдоспинор, компоненты которого определяют волновые функции электрона, локализованного на двух подрешетках углеродной нанотрубки. Условие нормировки для функций (6) имеет вид

$$\langle \Psi_{kmS} | \Psi_{k'm'S'} \rangle = \delta(k - k') \delta_{mm'} \delta_{SS'}, \quad (7)$$

где в правой части стоит произведение дельта-функции Дирака и символов Кронекера, интегрирование в левой части (7) ведется по бесконечной цилиндрической поверхности нанотрубки радиуса R . Нормировочные множители волновой функции (6) формально можно получить из формулы (5), рассмотрев предел $B \rightarrow \infty$.

Квантовое состояние (6) представляет собой волну, локализованную на цилиндрической поверхности. Величина $\hbar k$ в квантовом состоянии определяет импульс электрона вдоль образующей цилиндра, значение магнитного квантового числа m определяет момент импульса электрона $\hbar m$.

Рассмотрим произвольное квантовое состояние в исходный (нулевой) момент времени для электрона на углеродной нанотрубке, которое представим в виде суперпозиции по собственным функциям (6):

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_{m,S} \int_{-\infty}^{\infty} a_{kmS} |\Psi_{kmS}\rangle dk, \quad a_{kmS} = \langle \Psi_{kmS} | \Psi(0) \rangle. \quad (8)$$

Средние значения цилиндрических координат для квантового состояния (8) в произвольный момент времени могут быть вычислены с помощью приведенных выше формул для гейзенберговских операторов координаты: операторы $\varphi(t)$, $z(t)$ определяются из формул (4) путем переобозначения координат $x(t) \rightarrow R\varphi(t)$, $y(t) \rightarrow z(t)$ и замены операторов импульса:

$$p_x \rightarrow -i\hbar \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad p_y \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$$

Формулы для вычисления средних значений цилиндрических координат квантового состояния

$$R\bar{\varphi}(t) = \langle \psi(0) | R\varphi(t) \rangle | \psi(0) \rangle, \quad \bar{z}(t) = \langle \psi(0) | z(t) \rangle | \psi(0) \rangle \quad (9)$$

содержат матричные элементы операторов $\langle \psi_{kmS} | R\varphi(t) | \psi_{k'm'S'} \rangle$ и $\langle \psi_{kmS} | z(t) | \psi_{k'm'S'} \rangle$. Интегрирование по пространственным цилиндрическим переменным в матричных элементах с учетом (6) приводит к множителю, который равен произведению дельта-функции Дирака и символа Кронекера $\delta(k - k')\delta_{mm'}$. Суммирование по индексу m' в (9) приводит окончательно к следующим формулам:

$$R\bar{\varphi}(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{S,S'=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a_{kmS}^* a_{k'mS'} \langle \psi_{kmS} | R\varphi(t) | \psi_{k'mS'} \rangle dk dk', \quad (10)$$

$$\bar{z}(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{S,S'=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a_{kmS}^* a_{k'mS'} \langle \psi_{kmS} | z(t) | \psi_{k'mS'} \rangle dk dk'.$$

Здесь отличные от нуля матричные элементы операторов координаты вычисляются с использованием формул (4) и (6):

$$\langle \psi_{km+1} | R\varphi(t) | \psi_{k'm+1} \rangle = -\langle \psi_{km-1} | R\varphi(t) | \psi_{k'm-1} \rangle = \frac{V_F k_{\varphi}(m)t}{\sqrt{k_{\varphi}^2(m) + k^2}} \delta(k - k'),$$

$$\langle \psi_{km+1} | R\varphi(t) | \psi_{k'm-1} \rangle = \langle \psi_{k'm-1} | R\varphi(t) | \psi_{km+1} \rangle^* =$$

$$= -\frac{1}{2} \left(\frac{k}{k_{\varphi}^2(m) + k^2} \right) \left(\exp\left(+2iV_F \sqrt{k_{\varphi}^2(m) + k^2} t\right) - 1 \right) \delta(k - k'), \quad (11)$$

$$\langle \psi_{km+1} | z(t) | \psi_{k'm+1} \rangle = -\langle \psi_{km-1} | z(t) | \psi_{k'm-1} \rangle = \frac{V_F kt}{\sqrt{k_{\varphi}^2(m) + k^2}} \delta(k - k'),$$

$$\langle \psi_{km+1} | z(t) | \psi_{k'm-1} \rangle = \langle \psi_{k'm-1} | z(t) | \psi_{km+1} \rangle^* =$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{k_{\varphi}(m)}{k_{\varphi}^2(m) + k^2} \right) \left(\exp\left(+2iV_F \sqrt{k_{\varphi}^2(m) + k^2} t\right) - 1 \right) \delta(k - k').$$

Заметим, что в формулах (11) значения матричных элементов в нулевой момент времени полагаются равными нулю.

Для вычисления волновой функции и распределения электронной плотности на цилиндрической поверхности нанотрубки в произвольный момент времени для квантового состояния необходимо воспользоваться шредингеровским представлением для волновой функции квантового состояния:

$$|\psi(t)\rangle = \exp(-iHt / \hbar) |\psi(0)\rangle.$$

Используя формулу (8), имеем

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{m,S} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{kmS} t\right) a_{kmS} |\psi_{kmS}\rangle. \quad (12)$$

Рассмотрим локализованное электронное состояние, представляющее собой в нулевой момент времени волновой пакет, центрированный на поверхности углеродной нанотрубки для значения угла $\bar{\varphi}(0) = \pi$ и координаты $\bar{z}(0) = 0$:

$$|\psi(0)\rangle = A \exp\left(-\frac{z^2}{2d^2} + ik_0 z\right) \exp\left(-\frac{(\varphi - \pi)^2}{2\sigma^2} + im_0 \varphi\right) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (13)$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{|\alpha|^2 + |\beta|^2} \sqrt{\pi d R \sigma} \operatorname{erf}\left(\frac{\pi}{\sigma}\right)},$$

где d определяет размер области локализации пакета по осевой координате, параметр σ – область локализации пакета по угловой переменной, k_0 – несущий волновой вектор, m_0 – магнитное квантовое число. Параметры α и β определяют соотношения между компонентами псевдоспиновой функции. Коэффициенты разложения волновой функции (13) по собственным функциям (6) $a_{kmS} = \langle \psi_{kmS} | \psi(0) \rangle$ приводят к следующим формулам:

$$a_{kmS} = \frac{Ad\sigma\sqrt{R}}{2\sqrt{2}} (\alpha b_0^*(m, k) + \beta S) \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2 d^2}{2}\right) \exp\left(i\pi(m_0 - m) - \frac{\sigma^2}{2}(m - m_0)^2\right) \times$$

$$\times \left(\operatorname{erf}\left(\frac{\pi + i\sigma^2(m_0 - m)}{\sqrt{2}\sigma}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{\pi - i\sigma^2(m_0 - m)}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right), \quad (14)$$

где $\operatorname{erf}(\dots)$ – функция Лапласа [5]. Заметим, что из формулы (13) для квантового локализованного состояния следует: при любых параметрах α и β имеются состояния с положительной и отрицательной энергией (для значений параметра $S = \pm 1$).

Рассмотрим каждое из локализованных квантовых состояний с положительной и отрицательной энергией как два независимых волновых пакета. Скорости движения этих волновых пакетов вдоль оси цилиндра определяются через групповые скорости, вычисленные для $k = k_0, m = m_0$:

$$V_{\text{gr}} = \frac{1}{\hbar} \left. \frac{\partial E_{km_0 S}}{\partial k} \right|_{k=k_0} = \frac{S V_F k_0}{\sqrt{k_\varphi^2(m_0) + k_0^2}}, \quad (15)$$

знак групповой скорости определяется через значение параметра S . Угловая скорость вращения волновых пакетов по цилиндрической поверхности может быть приближенно оценена по формуле

$$R\Omega \approx \frac{SV_F k_\varphi(m_0)}{\sqrt{k_\varphi^2(m_0) + k_0^2}}, \quad (16)$$

где Ω – угловая скорость вращения.

Таким образом, два волновых пакета, формирующих квантовое состояние (13), совершают во времени вращение и смещение по цилиндрической поверхности нанотрубки в направлениях, определяемых знаком параметра S . Траекторию движения отдельного волнового пакета можно представить как винтовую линию на цилиндрической поверхности. Заметим, что для каждого из уединенных волновых пакетов может быть вычислена средняя координата $\bar{z}(t)$ по формулам (10) и (11) с учетом только диагонального матричного элемента для z координаты. Получаемая при этом линейная зависимость от времени $\bar{z}(t) = \bar{V}_z t$ содержит среднюю по состояниям скорость \bar{V}_z , совпадающую с групповой скоростью движения волнового пакета вдоль оси цилиндра (15). К аналогичным выводам для уединенного волнового пакета можно прийти, рассматривая диагональный матричный элемент оператора координаты φ при вычислении среднего $\bar{\varphi}(t)$. Получаемая при этом линейная зависимость $\bar{\varphi}(t) = \bar{\Omega} t$ содержит среднюю по состояниям угловую скорость вращения $\bar{\Omega}$, которая приближенно может быть вычислена по формуле (16).

На рис. 1,а схематически показаны локализованное квантовое состояние (13) в исходный (нулевой) момент времени и трансформация этого состояния в последующие моменты времени в виде двух волновых пакетов (расчеты проводили по формуле (12)). Зависимости средних значений осевой и угловой координат данного состояния от времени представлены на рис. 2, I. При численных расчетах средних значений $\bar{z}(t)$ и $\bar{\varphi}(t)$ по формулам (10) с учетом (11) использовали безразмерные переменные: волновой вектор $q = kR$, несущий волновой вектор $q_0 = k_0 R$, безразмерный параметр локализации квантового состояния вдоль оси цилиндра d/R . Как следует из рис. 2, I, имеет

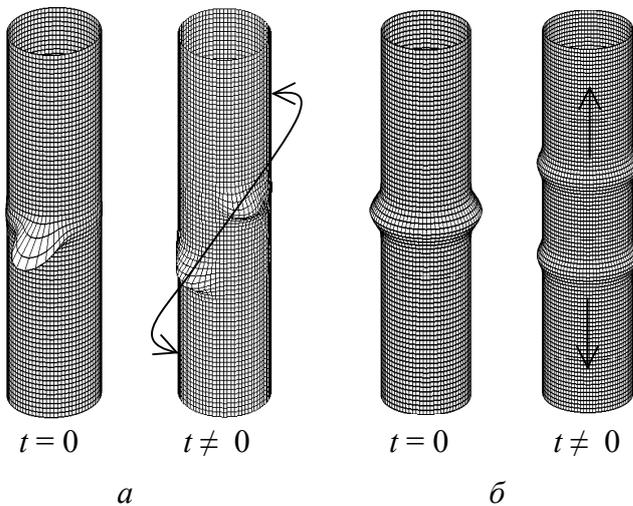


Рис. 1. Временная эволюция плотности вероятности локализованных квантовых состояний (13) (а) и (20) (б) на углеродной нанотрубке

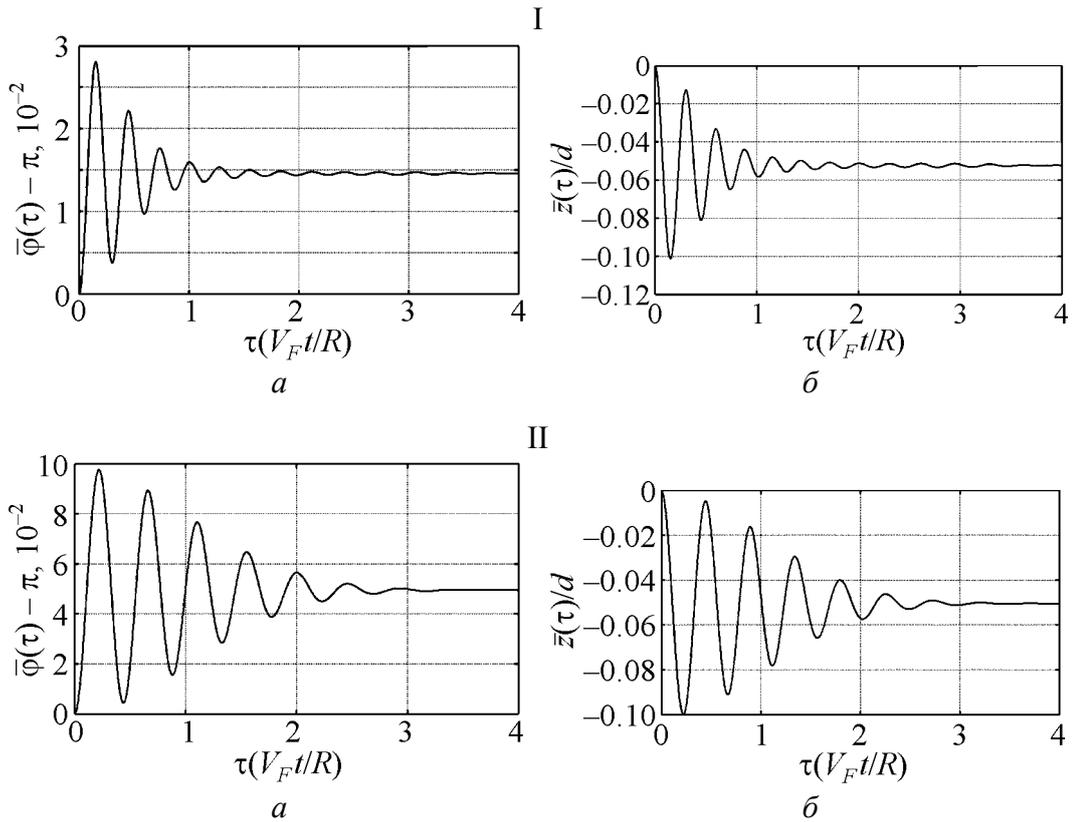


Рис. 2. Временная зависимость средних значений осевой (а) и угловой (б) координат локализованных квантовых состояний (13) (I) и (20) (II) с параметрами $\alpha = 1$, $\beta = 0$: I – $q_0 = 5$, $m_0 = 10$, $d/R = 0.5$, $\sigma = 0.4$; II – $q_0 = 5$, $m_0 = 5$, $d/R = 1$

место осциллирующая зависимость от времени средних значений координат квантового состояния (13) $\bar{z}(t)$ и $\bar{\varphi}(t)$. Осциллирующая зависимость средних значений координат от времени связана с недиагональными матричными элементами операторов координаты (11), характерная частота которых для локализованного квантового состояния (13) может быть оценена по формуле

$$\omega^{\text{ZBW}} \approx 2V_F \sqrt{k_\varphi^2(m_0) + k_0^2}. \quad (17)$$

Соответственно, характерный пространственный масштаб этих осцилляций по осевой и угловой координатам также может быть оценен из формулы (11) для слагаемых, ответственных за ZBW:

$$\frac{\Delta z^{\text{ZBW}}}{d} \approx \frac{R}{d} \left(\frac{m_0}{m_0^2 + q_0^2} \right), \quad \Delta \varphi^{\text{ZBW}} \approx \frac{q_0}{m_0^2 + q_0^2}. \quad (18)$$

Осциллирующие зависимости на рис. 2, I являются затухающими, времена затухания могут быть оценены из кинематических характеристик движения волновых пакетов (см. рис. 1, а):

$$\Delta t_z^{\text{ZBW}} \approx \frac{d\sqrt{k_\varphi^2(m_0) + k_0^2}}{V_F k_0}, \quad \Delta t_\varphi^{\text{ZBW}} \approx \frac{R\sigma\sqrt{k_\varphi^2(m_0) + k_0^2}}{V_F k_\varphi(m_0)}. \quad (19)$$

Рассмотрим еще один пример локализованного квантового состояния, которое можно рассматривать как предельный случай выбора параметра $\sigma \rightarrow \infty$ в формуле (13):

$$|\psi(0)\rangle = A \exp\left(-\frac{z^2}{2d^2} + ik_0 z + im_0 \varphi\right) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad A = \frac{1}{\sqrt{|\alpha|^2 + |\beta|^2} \sqrt{2\pi} \sqrt{\pi} dR}. \quad (20)$$

Коэффициенты $a_{kmS} = \langle \psi_{kmS} | \psi(0) \rangle$ в данном случае могут быть легко вычислены, отличным от нуля будет коэффициент a_{kmS} при значении квантового числа $m = m_0$:

$$a_{km_0S} = Ad\sqrt{R}\sqrt{\pi}(\alpha b_0^*(m_0, k) + \beta S) \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2 d^2}{2}\right).$$

На рис. 1,б схематически показано локализованное квантовое состояние (20) и трансформация данного состояния в последующие моменты времени. Временные зависимости средних значений осевой и угловой координат данного квантового состояния в различные моменты времени представлены на рис. 2,II. Видно, что имеют место затухающие осциллирующие зависимости средних значений координат. Численные расчеты были проведены по формулам (10) с учетом зависимости коэффициентов a_{kmS} от квантового числа m состояния (20):

$$\begin{aligned} R\bar{\varphi}(t) &= \sum_{S, S'=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} a_{km_0S}^* a_{km_0S'} \langle \psi_{km_0S} | R\varphi(t) | \psi_{km_0S'} \rangle dk, \\ \bar{z}(t) &= \sum_{S, S'=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} a_{km_0S}^* a_{km_0S'} \langle \psi_{km_0S} | z(t) | \psi_{km_0S'} \rangle dk. \end{aligned}$$

Как следует из рис. 2,II, средние значения координат для состояния (20) имеют осциллирующий временной характер, подобно данным рис. 2,I.

Для численной оценки приведенных в работе данных по ZBW необходимо определить следующие величины: скорость носителей в графене, радиус нанотрубки, параметры локализованных состояний в формулах (13) и (20). Значение скорости носителей в графене (см., напр., [3]) $V_F \approx 10^6$ m/s; для радиуса нанотрубки $R = 10^{-8}$ m временной масштаб на рис. 2 равен 10^{-14} s; пространственный масштаб осевых осцилляций на рисунках определяется через значение параметра d , для $R = 10^{-8}$ m на рис. 2,I $d = 0.5 \cdot 10^{-8}$ m, на рис. 2,II $d = 10^{-8}$ m. Несоциальный волновой вектор k_0 на рисунках для $R = 10^{-8}$ m равен $5 \cdot 10^8$ m⁻¹.

Таким образом, в настоящей работе аналитически показана возможность существования явлений ZBW для локализованных квантовых состояний

электрона на поверхности проводящей углеродной нанотрубки. В качестве локализованных квантовых состояний рассмотрены квантовые волновые пакеты, построенные из состояний валентной и проводящих зон электронного спектра, явления ZBW возможны только в данной ситуации.

Приведенные в работе оценки для частот и амплитуд ZBW в проводящей углеродной нанотручке могут быть использованы для их экспериментальной идентификации.

1. *T. Ando*, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 777 (2005).
2. *T.M. Rusin, W. Zawadzki*, Phys. Rev. **B76**, 195439 (2007).
3. *W. Zawadzki, T.M. Rusin*, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 143201 (2011).
4. *F. Leonard*, The physics of carbon nanotube devices, William Andrew Inc., Norwich, NY, USA (2009).
5. *В.А. Диткин, Л.Н. Кармазина*, Справочник по специальным функциям, Наука, Москва (1979).

M.J. Majid, S.S. Savinsky

DYNAMICS OF ELECTRONIC WAVE PACKETS IN CARBON NANOTUBES

For the electrons of conductive carbon nanotubes, the problem of evolution of localized quantum states is solved. The localized quantum states are interpreted as superposition of the valence band and the conduction band. Localization of electronic states results in an oscillatory dependences of the mean values of coordinates and velocities that are known as a phenomenon of Zitterbewegung, which is studied theoretically for free relativistic electrons and the electronic states of graphene. The electronic states in carbon nanotubes are considered by means of linear approximation in momentum operators of the Hamiltonian. This approximation is valid for localized electronic states in the long-wave limits. It is shown for the wave packets in the conductive and dielectric nanotubes, that there exist a complicated dynamics related to the states interference of the valence and conduction bands. The dynamic of the wave packet represented by quantum states with cylindrical symmetry is considered, the interference phenomenon in this case results in the axial coordinates oscillations of the packet. For the localized quantum states of the angular and axial coordinates in the carbon nanotubes, oscillations of the mean values of the angular and longitudinal coordinates are present. In this paper, the evaluations of the frequency and amplitude of Zitterbewegung in the conductive carbon nanotube are presented, which can be used for the experimental identification.

Keywords: carbon nanotubes, localized quantum states, wave packets

Fig. 1. Time evolution of probability density of the localized quantum states (13) (a) and (20) (b) in a carbon nanotube

Fig. 2. Time dependence of the expectation values of axial (a) and angular (b) coordinates of localized quantum states (13) (I) and (20) (II) with parameters $\alpha = 1$, $\beta = 0$: I – $q_0 = 5$, $m_0 = 10$, $d/R = 0.5$, $\sigma = 0.4$; II – $q_0 = 5$, $m_0 = 5$, $d/R = 1$