Операторы координаты и плотности вероятности в полупроводниковых углеродных нанотрубках

Румянцев Е.Л., Кунавин П.Е., Германенко А.В.

Институт Естественных Наук, Уральский Федеральный Университет, 620000, Екатеринбург, пр.Ленина 51

DOI 10.34077/Semicond2019-178

Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) обладают уникальными физическими свойствами, обусловленными присущим им квази-релятивистским поведением [1]. Поскольку описание поведения носителей в ОУНТ формально подобно описанию поведения электрона в теории Дирака, в данной работе предложен квантово-полевой подход к построению одно-частичного оператора плотности вероятности (ПВ) для двузонной модели ОУНТ [1]. Предложенный подход является альтернативой обычно рассматриваемому преобразованию Фолди-Ваутхаузена, которое позволяет разделить положительно и отрицательно частотные решения. Показано, что в рассмотренном “no-pair” приближении полученная одноэлектронная ПВ отличается от “классической” Шредингеровской ПВ, задаваемой квадратом волновой функции. Полученная ПВ указывает на вспомогательную роль волновой функции при анализе эксперимента, поскольку демонстрирует дополнительно к стандартному квантово-механическому размытию положения электрона, размытие, связанное с многозонностью проблемы. С точки зрения квантовой теории поля, дополнительное динамическое размытие связано с флуктуациями вакуума-заполненной валентной зоной (аналог “моря” Дирака). Налетающий электрон аннигилирует с дыркой виртуальной пары, а электрон пары продолжает движение [2]. Как показано, такая телепортация проявляется не только в особенности поведения ПВ, но и обуславливает существенную модификацию внешнего потенциала в полученном для однокомпонентной волновой функции одно-частичном уравнении типа Салпетера. К нелокальности псевдо-дифференциального оператора кинетической энергии добавляется нелокальное воздействие внешнего потенциала, который в общем случае представляет собой интегральный оператор. Обсуждаются условия существования псевдо-релятивистского эффекта дрожания электрона (Zitterbewegung) и его связь с полученным нелокальным потенциальным членом типа Дарвина. Показано, что описанные особенности поведения электрона в ОУНТ связаны с необычными свойствами оператора координаты $\hat{r}$ в одно-частичном секторе: $\hat{r}^n \neq (\hat{r})^n$.

Предсказанные эффекты размытия достаточно велики (характерная длина-аналог Комптоновской длины в теории Дирака порядка 28,6А [1]) и, следовательно, наблюдаемы, например, с помощью сканирующей зондовой микроскопии. Однозначное соответствие в рамках предложенного подхода между решениями в ОУНТ и решениями (1+1) проблемы Дирака, предсказания для которой вне современных экспериментальных возможностей, представляет возможность экспериментального наблюдения и теоретического описания в ОУНТ таких релятивистских эффектов, как Zitterbewegung [3] и эффекта порождения электрон-дырочных пар - эффекта нестабильности вакуума Саутера-Швингера [4].

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки (проект №3.9534.2017/8.9) и Программы повышения конкурентоспособности УрФУ (соглашение №02.А03.21.0006)

[1] W.Zawadzki, *Phys. Rev. B* **74**, 205439 (2006).

[2] T.Cheng et al., *Contemporary Phys.* **51**, 315 (2010).

[3] T.M.Rusin, W.Zawadzki, *Phys. Rev., B* **76**, 195439 (2007)

[4] M.F.Linder et al., *Phys. Rev.*, **97**, 035203 (2018)