Диэлектрические свойства намагниченного электронного газа нанотрубки

© П.А. Эминов, Ю.В. Перепелкина, Ю.И. Сезонов*

Московский государственный университет приборостроения и информатики,
107996 Москва, Россия
* Московский государственный институт электроники и математики,
109028 Москва, Россия
E-mail: peminov@mail.ru

(Поступила в Редакцию 17 января 2008 г.
В окончательной редакции 13 марта 2008 г.)

Получена квантовая формула для продольной диэлектрической проницаемости намагниченного электронного газа квантового цилиндра. Вычислены асимптотики закона дисперсии продольных плазменных волн в вырожденном электронном газе. Рассмотрено приближение как слабой, так и сильной пространственной дисперсии. Показано, что продольная диэлектрическая проницаемость является осциллирующей функцией магнитного потока через сечение нанотрубки.

PACS: 71.10.-W, 75.75.+a

1. Введение

Исследования показывают, что физические свойства наноструктур весьма чувствительны к их геометрии. В зависимости от геометрической структуры однослойная углеродная нанотрубка может быть диэлектриком, металлом или полупроводником [1]. Спиральная геометрия приводит к новым по сравнению с цилиндрической проволокой эффектам, которые проявляются в оптических и фотоэлектрических свойствах нанотрубки [2–4].

Уникальные явления предсказываются в низкоразмерных структурах в присутствии внешнего электромагнитного поля.

В магнитном поле наблюдается осциллирующая зависимость квантовых макроскопических свойств квантового цилиндра. Параметром осцилляций является величина, равная отношению магнитного потока через поперечное сечение нанотрубки к кванту магнитного потока. Это открывает принципиальную возможность управлять физическими свойствами наноструктур, изменяя напряженность внешнего поля.

Осцилляции Ааронова–Бома для проводимости квантового цилиндра в баллистическом режиме исследовались, например, в работах [5,6]. Магнитный отклик двумерного электронного газа в нанотрубках с цилиндрической симметрией также испытывает осцилляции Ааронова–Бома [7,8]. Плазменные колебания $2D$-электронов и осцилляции Ааронова–Бома для частоты плазмона рассмотрены в [9] для двух типов нанотрубок: полупроводниковых полых цилиндров и углеродных нанотрубок. Интерес к спиновой наноэлектронике делает актуальным изучение спиновых эффектов в наноструктурах [10].

Настоящая работа посвящена исследованию диэлектрических свойств намагниченного электронного газа квантового цилиндра.

2. Матрица плотности электронного газа квантового цилиндра

Под влиянием возмущения, задаваемого скалярным потенциалом $\varphi = \varphi(\mathbf{r}, t)$, происходит изменение плотности намагниченного электронного газа. Для ее вычисления будем исходить из квантово-механического уравнения для матрицы плотности.

Не зависящая от спина матрица плотности $\rho(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ является решением уравнения [11]

$$i\,\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left(\hat{H}_1 - \hat{H}_2^*\right)\rho, \tag{1}$$

где индексы 1 и 2 относятся к координатам $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$, на которые действует гамильтониан электрона

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + e\varphi(t, \mathbf{r}). \tag{2}$$

Здесь $\hat{H}_0$ — гамильтониан нерелятивистского электрона на цилиндрической поверхности в постоянном магнитном поле, направленном вдоль оси цилиндра

$$\hat{H}_0 = -\varepsilon\,\frac{d^2}{d\varphi^2} - i\,\frac{\omega_c}{2}\,\frac{d}{d\varphi} + \frac{m^*\omega_c^2}{8}\,R^2 + \frac{\hat{p}_3^2}{2m^*}, \tag{3}$$

$\omega_c = |e|H/m^*$ — циклотронная частота, R — средний радиус цилиндра, m^* — эффективная масса электрона, $\hat{p}_3$ — оператор проекции импульса на ось Oz цилиндрической системы координат, H — напряженность магнитного поля, направленного вдоль оси Oz, φ — полярный угол, $\varepsilon = 1/2m^*R^2$ — энергия размерного конфайнмента.

Спектр и нормированные собственные функции гамильтониана (3) определяются формулами

$$E(n, p_3) = \varepsilon\left(n + \frac{\phi}{\phi_0}\right)^2 + \frac{p_3^2}{2m^*}, \tag{4}$$

$$\psi_{n,p_3}(\varphi, z) = \frac{\exp[i(n\varphi + p_3 z)]}{\sqrt{2\pi RL}}. \tag{5}$$

В (4) и (5) приняты следующие обозначения: $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ — азимутальное квантовое число, $\Phi = \pi R^2 H$ — магнитный поток через сечение цилиндра высотой L, $\Phi_0 = 2\pi ch/|e|$ — квант магнитного потока, e — заряд электрона.

Зависимость возмущения $\varphi(t, \mathbf{r})$ от времени и координат в цилиндрической системе координат представим в следующем виде:

$$\varphi(t, \mathbf{r}) = A(r)\exp[-i\omega t + il\varphi + ik_3 z]. \qquad (6)$$

Влияние магнитного поля на электронный газ будем учитывать точно, а реакцию системы на возмущение (6) — по теории возмущений в линейном приближении.

Таким образом, считая возмущение (6) слабым, в уравнении (1) полагаем

$$\rho = \rho_0 + \delta\rho, \qquad (7)$$

где $\rho_0 = \rho_0(\varphi_1 - \varphi_2, z_1 - z_2)$ — точное решение стационарного уравнения (1) в постоянном магнитном поле, а $\delta\rho(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — поправка к матрице плотности за счет возмущения (6).

Подставив (7) в (1) и отбросив члены второго порядка малости, для функции $\delta\rho$ получаем следующее представление:

$$\delta\rho = \exp\left[-i\omega t + ik_3\frac{z_1 + z_2}{2} + il\frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}\right] g(z, \varphi), \qquad (8)$$

где приняты обозначения $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$, $z = z_1 - z_2$, а функция $g(z, \varphi)$ является решением дифференциального уравнения

$$\left[\omega + i\frac{k_3}{m^*}\frac{\partial}{\partial z} + im^* R^2 l\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{l\omega_c}{2}\right] g(z, \varphi) = -eA(R)$$
$$\times\left[\exp\left[ik_3\frac{z}{2} + il\frac{\varphi}{2}\right] - \exp\left[-ik_3\frac{z}{2} - il\frac{\varphi}{2}\right]\right]\rho_0(z, \varphi). \qquad (9)$$

Квантово-механическая матрица плотности должна быть усреднена по большому каноническому распределению Гиббса. В представлении вторичного квантования гейзенберговская операторная волновая функция, отвечающая гамильтониану (3), имеет вид

$$\psi(t, z, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{n, p_3}\exp[-i\tilde{E}(n, p_3, \mu)t + ip_3 z + im\varphi)]a(n, p_3), \qquad (10)$$

где $V = 2\pi RL$ и учтено, что для идеального газа

$$a(t) = \exp\left[-i\tilde{E}(n, p_3, \mu)t\right] a(n, p_3),$$
$$\tilde{E}(n, p_3, \mu) = E(n, p_3) - \mu. \qquad (11)$$

Здесь μ — химический потенциал электронного газа, $a(n, p_3)$ — шредингеровский оператор уничтожения фермиона в стационарном состоянии, задаваемом квантовыми числами n и p_3. В формуле (10) и далее по тексту принято обозначение

$$\sum_{n, p_3} f(n, p_3) \equiv \sum_n\left(\frac{L}{2\pi}\right)\int f(n, p_3)dp_3. \qquad (12)$$

Координатную матрицу плотности намагниченного электронного газа находим по формуле [12]

$$\rho_0(\varphi, z) = \frac{1}{N}\left\langle\psi^+(t, \mathbf{r}_2)\psi(t, \mathbf{r}_1)\right\rangle, \qquad (13)$$

где усреднение проводится по большому каноническому распределению Гиббса, N — полное число электронов. Прямое вычисление (13) с учетом (10), (11) дает

$$\rho_0(\varphi, z) = \frac{1}{N}\left(\frac{1}{V}\right)\sum_{n, p_3}\exp[i(n\varphi + p_3 z)]n_F(n, p_3), \qquad (14)$$

где невозмущенная функция распределения электронов в магнитном поле

$$n_F(n, p_3) = \frac{1}{\exp\left[\frac{E(n, p_3) - \mu}{T}\right] + 1}. \qquad (15)$$

При совпадающих аргументах, когда $z = 0$, $\varphi = 0$, формула (14) с учетом двукратного спинового вырождения энергетических уровней принимает вид

$$\rho_0(\varphi = 0, z = 0) = \frac{N_S}{N}, \qquad (16)$$

а поверхностная плотность частиц равна

$$N_S = \left(\frac{1}{V}\right)2\sum_n\left(\frac{L}{2\pi}\right)\int dp_3 n_F(n, p_3). \qquad (17)$$

Подставив (14) в (9), для изменения поверхностной плотности намагниченного электронного газа под влиянием возмущения (6) получим следующую формулу:

$$\delta N_S = -eA(R)\exp[-i\omega t + il\varphi + ik_3 z]\, 2\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\left(\frac{L}{2\pi}\right)$$
$$\times\int_{-\infty}^{+\infty}dp_3\frac{n_F\left(n - \frac{l}{2}, p_3 - \frac{k_3}{2}\right) - n_F\left(n + \frac{l}{2}, p_3 + \frac{k_3}{2}\right)}{\omega - \frac{p_3 k_3}{m^*} - \frac{nl}{m^* R^2} - \frac{l\omega_c}{2} + i\cdot 0}, \qquad (18)$$

где, согласно правилу обхода полюсов Ландау, при наличии полюса частоту ω следует считать как $\omega + i\cdot 0$, т. е. полюсные множители необходимо понимать в соответствии с формулой Сохоцкого [11].

3. Продольная диэлектрическая проницаемость и закон дисперсии продольных плазменных волн

Пространственная дисперсия приводит к возможности распространения в нанотрубке продольных электрических волн, для которых вектор $\mathbf{E}$ направлен вдоль волнового вектора $\mathbf{k}$ [11,12].

Продольную диэлектрическую проницаемость найдем исходя из связи плотности заряда, индуцированного возмущением (6), с вектором диэлектрической поляризации. В итоге приходим к тому, что возмущение (6) должно быть решением уравнения Пуассона

$$\Delta\varphi = \frac{4\pi e \delta N_S}{\varepsilon_l - 1}\,\delta(r - R), \tag{19}$$

где $\delta(r - R)$ — дельта-функция Дирака, $\varepsilon_l = \varepsilon_l(\omega, k_3)$ — продольная диэлектрическая проницаемость намагниченного электронного газа, δN_S — изменение поверхностной концентрации электронов под влиянием возмущения (6).

Таким образом, функция $A(r)$ является решением дифференциального уравнения

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{dA}{dr}\right) - \left(k_3^2 + \frac{l^2}{r^2}\right)A(r) = \frac{4\pi e}{\varepsilon_l - 1}\,\delta\tilde{N}_S\delta(r - R), \tag{20}$$

где δN_S — предэкспоненциальный множитель в формуле (18).

Умножим обе части (20) на r и проинтегрируем по области $R - \varepsilon < r < R + \varepsilon$. Устремим далее $\varepsilon \to 0$ и учтем явный вид решения (20) в областях $r < R$ и $r > R$

$$A(r) = \begin{cases} C\,\frac{K_l(k_3R)I_l(k_3r)}{I_l(k_3R)}, & r < R, \\ CK_l(k_3R), & r > R, \end{cases} \tag{21}$$

где C — const, а $I_l(x)$ и $K_l(x)$ — модифицированные функции Бесселя мнимого аргумента, образующие фундаментальную систему решений однородного уравнения, соответствующего уравнению (20).

В результате находим следующую формулу для электронного вклада в продольную диэлектрическую проницаемость намагниченного электронного газа квантового цилиндра:

$$\varepsilon_l(\omega, k_3) - 1 = \left(\frac{2e^2}{\pi}\right) I_l(k_3R)K_l(k_3R)$$
$$\times \sum_{n=-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} dp_3\,\frac{n_F\left(n - \frac{l}{2}, p_3 - \frac{k_3}{2}\right) - n_F\left(n + \frac{l}{2}, p_3 + \frac{k_3}{2}\right)}{\omega - \frac{p_3k_3}{m^*} - \frac{nl}{m^*R^2} - \frac{l\omega_c}{2} + i\cdot 0}. \tag{22}$$

Полученный результат является обобщением формулы Силина–Климонтовича [11] применительно к намагниченному электронному газу на цилиндрической поверхности.

Дальнейшее обсуждение проведем для вырожденного электронного газа и при $l = 0$.

В квазиклассическом случае можно разложить функции $n_F(n, p_3, \pm k_3/2)$ в формуле (22) по степеням k_3, что дает

$$n_F\left(n, p_3 + \frac{k_3}{2}\right) - n_F\left(n, p_3 - \frac{k_3}{2}\right) \approx k_3\,\frac{\partial n_F}{\partial p_3}. \tag{23}$$

Учтем также, что в полностью вырожденной электронной плазме

$$\frac{\partial n_F}{\partial p_3} = -\mathrm{sgn}\,p_3\left[\delta(p_3 - p_3^F) + \delta(p_3 + p_3^F)\right], \tag{24}$$

где величина p_3^F связана с энергией Ферми E_F формулой

$$p_3^F = \sqrt{2m^*\left[E_F - \varepsilon\left(n + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2\right]} \equiv m^*V_F(n), \tag{25}$$

а сама энергия Ферми находится из уравнения

$$N_L = \frac{2\sqrt{2m^*}}{\pi}\sum_n \sqrt{E_F - \varepsilon\left(n + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2}, \tag{26}$$

где $N_L = 2\pi RN_S$ — линейная плотность электронов.

В итоге для продольной диэлектрической проницаемости в квазиклассической области значений k_3 получаем следующую формулу:

$$\varepsilon_l(\omega, k_3) = 1 - \frac{4e^2k_3^2}{\pi}\,K_0(k_3R)I_0(k_3R)\sum_n \frac{V_F(n)}{\omega^2 - k_3^2V_F^2(n)}, \tag{27}$$

причем суммирование по n в (26) и (27) ограничено условием положительности подкоренного выражения в (26).

Зависимость частоты от волнового числа для продольных электрических волн определяется уравнением

$$\varepsilon_l(\omega, k) = 0, \tag{28}$$

которое определяет также спектр электронных колебаний плазмы [11].

Таким образом, дисперсионное уравнение для симметричного плазмона в квазиклассической области значений k_3 имеет вид

$$1 = \frac{4e^2k_3^2}{\pi}\,K_0(k_3R)I_0(k_3R)\sum_n \frac{V_F(n)}{\omega^2 - k_3^2V_F^2(n)}. \tag{29}$$

Этот результат совпадает с формулой (12) работы [9] с точностью до общего множителя, равного 2. Проведенный анализ показывает, что для произвольных значений параметра k_3V_F/ω закон дисперсии продольных электрических волн и спектр электронных колебаний даже для случая симметричного плазмона следует вычислить на основе полученной нами квантовой формулы (18), а не его квазиклассического приближения, которое приводит к результату (29) и соответствует случаю относительно слабой пространственной дисперсии [9].

Рассмотрим далее случай сильной пространственной дисперсии. Особый интерес представляет статический случай $\omega \to 0$, когда особенно ясно видна роль пространственной дисперсии в плазме [12].

Используя формулу суммирования Пуассона, из (18) при $l = 0$ получаем следующее точное представление для величины $\varepsilon_l(\omega, k_3)$:

$$\varepsilon_l(\omega, k_3) = 1 + \frac{2e^2R}{\pi} I_0(k_3R)K_0(k_3R) \times \sum_{k=-\infty}^{\infty} \exp\left[-2i\pi k \frac{\Phi}{\Phi_0}\right] G_k, \tag{30}$$

где

$$G_k = \int_0^\infty p\,dp \int_0^{2\pi} d\varphi \exp\left[2i\pi kRp\sin\varphi\right] \times \frac{1}{\exp\left[\left(\frac{p^2}{2m^*} - \mu\right)/T\right] + 1} \times \left[\frac{1}{\omega + \frac{k_3^2}{2m^*} - \frac{k_3 p\cos\varphi}{m^*} + i0} - \frac{1}{\omega - \frac{k_3^2}{2m^*} - \frac{k_3 p\cos\varphi}{m^*} + i0}\right]. \tag{31}$$

В том случае, когда выполнено условие

$$2\frac{\Phi}{\Phi_0} < 1, \tag{32}$$

заполнение электронами дискретных уровней энергии поперечного движения происходит в следующем порядке:

$$E_0 \to E_{-1} \to E_{+1} \to E_{-2} \to E_{+2} \dots .$$

Оценки показывают, что для широкого ряда нанотрубок с цилиндрической симметрией оказываются заполненными электронами только несколько самых низких подзон энергии поперечного движения [13].

Если выполнено также условие

$$N_L = \frac{N}{L} < \frac{\left(1 - \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)}{R}\frac{2}{\pi}, \tag{33}$$

то электроны могут находиться только в основном состоянии $(n = 0)$, для которого квазиимпульс Ферми продольного движения

$$p_3^F = \frac{\pi N_L}{2}, \tag{34}$$

N в (33) — линейная плотность электронов. Как это следует из (32), существование только одного дискретного уровня энергии поперечного движения становится более вероятным с уменьшением радиуса нанотрубки.

Таким образом, если выполнены условия (32) и (33), из формулы (22) при $l = 0$ получаем

$$\varepsilon_l(0, k_3) = 1 + \frac{4e^2}{\pi} I_0(k_3R)K_0(k_3R)\frac{m^*}{k_3}\ln\left|\frac{2p_3^F + k_3}{2p_3^F - k_3}\right|. \tag{35}$$

Существенно, что выражение (35) как функция k_3 в точке $|k_3| = 2p_3^F$ имеет особенность, аналогичную коновской особенности в терхмерном случае для продольной диэлектрической проницаемости свободного электронного газа [11].

Формулы (30) и (31) в явном виде показывают, что продольная диэлектрическая проницаемость электронного газа квантового цилиндра является осциллирующей функцией параметра Ааронова–Бома, равного величине Φ/Φ_0. Например, в статическом случае для вырожденного электронного газа из формул (30) и (31) находим

$$\varepsilon(0, k_3) = 1 + \frac{16e^2m^*p_F}{\pi^2} I_0(k_3R)K_0(k_3R) \times \sum_{k=-\infty}^{k=\infty} \exp\left[-2\pi ik\frac{\Phi}{\Phi_0}\right]\frac{1}{k}\int_0^1 \frac{\sin\left(2\pi kRp_F\sqrt{1-x^2}\right)}{k_3^2 - 4p_F^2x^2}dx, \tag{36}$$

где $p_F = \sqrt{2m^*\mu}$.

Для произвольных значений параметра Φ/Φ_0 и линейной концентрации N_L электронов из формулы (36) в предельном случае $k_3^2 \gg 4p_F^2$ находим следующую асимптотику для функции $\varepsilon_l(0, k_3)$:

$$\varepsilon_l(0, k_3) \approx 1 + 8m^*e^2R\left(\frac{p_F}{k_3}\right)^2 \times \left[1 + 4\sum_{k=1}^{\infty}\cos\left(2\pi k\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\frac{J_1(2\pi kp_FR)}{2\pi kp_FR}\right] I_0(k_3R)K_0(k_3R), \tag{37}$$

где $J_1(x)$ — функция Бесселя первого порядка.

4. Заключение

Сформулируем основные результаты, полученные в работе.

Вычислена статистическая матрица плотности нерелятивистского электронного газа нанотрубки с цилиндрической симметрией во внешнем электромагнитном поле. В качестве внешнего поля выбрана суперпозиция магнитного и электрического полей. Магнитное поле направлено вдоль оси цилиндра и учтено точно, а электрическое — по теории возмущений в линейном приближении.

Получена квантовая формула, описывающая зависимость продольной диэлектрической проницаемости нанотрубки от характерных параметров задачи и от напряженности магнитного поля. Здесь следует отметить, что квантовая формула, впервые полученная в работе, позволила дать полное описание как временно́й, так и пространственной дисперсии. В этом состоит принципиальное отличие наших результатов от приведенных в работе [9], которая, как показано выше, изначально основана на квазиклассическом выражении для поляризационного оператора.

Вычислены асимптотики закона дисперсии продольных плазменных волн и продольной диэлектрической проницаемости в случаях сильной и слабой пространственной дисперсии. Показано, что продольная диэлектрическая проницаемость нанотрубки является осциллирующей функцией параметра Ааронова–Бома.

Список литературы

[1] R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. Physical properties of carbon nanotubes. Imperial College Press, London (1998). 259 p.
[2] Л.И. Магарилл, М.В. Энтин. Письма в ЖЭТФ **78**, 249 (2003).
[3] В.В. Белов, С.Ю. Доброхотов, В.П. Маслов, Т.Я. Тудоровский. УФН **175**, 1004 (2005).
[4] Л.И. Магарилл, А.В. Чаплик, М.В. Энтин. УФН **175**, 995 (2005).
[5] П.М. Островский. Письма в ЖЭТФ **72**, 600 (2000).
[6] V.A. Margulis, A.V. Shorokhov, M.P. Trushin. Phys. Lett. A **276**, 180 (2000).
[7] В.А. Гейлер, В.А. Маргулис, А.В. Шорохов. ЖЭТФ **115**, 1450 (1999).
[8] П.А. Эминов, Ю.И. Сезонов, А.В. Альперн, Н.В. Сальников. ЖЭТФ **130**, 724 (2006).
[9] А.И. Ведерников, А.О. Говоров, А.В. Чаплик. ЖЭТФ **120**, 979 (2001).
[10] А.В. Ведяев. УФН **172**, 1458 (2002).
[11] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Физическая кинетика (Сер. „Теоретическая физика"). Наука, М. (1979). Т. Х. 528 с.
[12] В.Л. Гинзбург. Теоретическая физика и астрофизика. Наука, М. (1987). 334 с.
[13] Н.А. Поклонский, Е.Ф. Кисляков, Г.Г. Федорук, С.А. Вырко. ФТТ **42**, 1911 (2000).