

Электронный спектр и баллистический транспорт спиральной нанотрубки

© А.А. Григорькин, С.М. Дунаевский

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Российской академии наук,
188300 Гатчина, Ленинградская обл., Россия

E-mail: dunaevsk@mail.pnpi.spb.ru

(Поступила в Редакцию 23 мая 2006 г.)

Предложена и исследована модель спиральной нанотрубки, допускающая аналитическое вычисление спектра и волновых функций. Показано, что специфика симметрии гамильтониана приводит к тому, что электронный спектр не имеет зонной структуры, несмотря на периодичность потенциала вдоль оси системы. В качестве предельных случаев модели рассмотрены свернутая в спираль двумерная лента и квазиодномерная спираль в магнитном поле. Показано, что наличие дополнительных локальных минимумов у подзон электронного спектра приводит к немонотонной зависимости баллистического контактанса системы от химического потенциала.

PACS: 73.22.-f, 73.63.Fg

1. Введение

Физические свойства двумерного электронного газа на искривленной поверхности обнаруживают ряд интересных особенностей, что обуславливает интерес к теоретическим исследованиям таких моделей, как, например, квантовый цилиндр [1–3] и квантовая сфера [4,5]. Среди наноструктур особое внимание привлекают углеродные нанотрубки и цилиндрические структуры, получаемые с использованием слоев напряженного GaAs/In_xGa_{1-x}As [6], поскольку успехи технологии позволяют надеяться на их применение в приборах нанoeлектроники.

В настоящее время имеется значительное число работ, в которых теоретически исследуются электронный спектр и физические характеристики нанотрубок различной геометрии [7–10]. Однако аналитические результаты имеются лишь для сравнительно небольшого числа моделей таких структур.

Особый интерес представляет учет спиральной симметрии, которая может существенно влиять на физические свойства нанотрубок. Так, известно, что нарушение фундаментальной симметрии относительно инверсии координат приводит к тому, что становится возможным ряд интересных явлений, таких как, например, фотогальванический эффект [11] и изменение правил квантования холловской проводимости [12].

В [13,14] предложен подход к исследованию спиральных квантовых проволок посредством перехода в неортогональную криволинейную систему координат. В этом методе граничные условия, накладываемые на волновую функцию, упрощаются за счет усложнения вида оператора кинетической энергии в уравнении Шредингера. Однако круг точно решаемых с помощью данного метода задач достаточно узок: в абсолютном большинстве случаев спектр и электронные волновые функции в структурах со сложной геометрией поверхности прихо-

дится находить либо численно [13], либо приближенно, используя теорию возмущений [14,15].

В связи с этим представляется актуальным исследование модели спиральной двумерной наноструктуры, допускающей явное решение уравнения Шредингера. Целью настоящей работы является исследование электронного энергетического спектра и баллистического контактанса спиральной нанотрубки.

2. Спектр и собственные функции гамильтониана спиральной нанотрубки

В качестве модели нанотрубки рассмотрим цилиндр радиуса R с бесконечно тонкими стенками. Спиральная симметрия трубки описывается посредством протяженного спирального возмущения, моделируемого δ -потенциалом (рис. 1).

В цилиндрической системе координат одноэлектронный гамильтониан H для нанотрубки, помещенной в продольное магнитное поле B , имеет вид

$$H = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{R^2} \left(\frac{\partial}{i\partial\varphi} + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 \right) + V_0\delta(\varphi - \alpha z), \quad (1)$$

где m^* — эффективная масса электрона, $\Phi = \pi R^2 B$ — поток магнитного поля через поперечное сечение цилиндра, $\Phi_0 = ch/|e|$ — квант потока, V_0 — амплитуда возмущения. Константа α определяется периодом T_z спирали по оси цилиндра: $T_z = 2\pi/\alpha$.

Гамильтониан (1) не коммутирует ни с импульсом P_z , ни с моментом импульса L_z , а только с их линейной комбинацией — оператором K

$$K = P_z + \alpha L_z. \quad (2)$$

Это обусловлено симметрией структуры, которая инвариантна к бесконечно малому смещению относительно

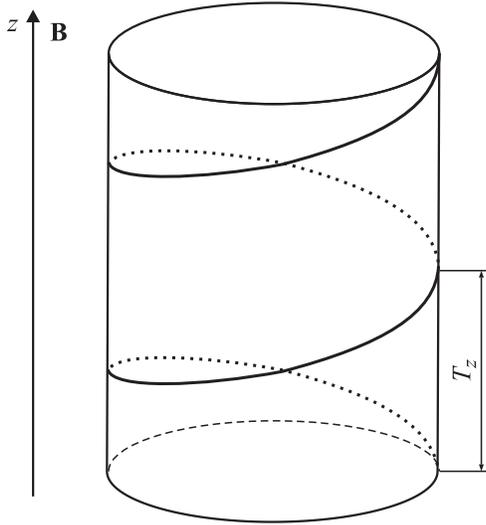


Рис. 1. Нанотрубка со спиральным δ -дефектом.

оси Oz с одновременным бесконечно малым поворотом вокруг нее.

Задача нахождения спектра и собственных функций гамильтониана (1) решается путем перехода к неортогональной системе координат $\{z_1, \varphi_1\}$, соответствующей симметрии задачи,

$$\begin{cases} z_1 = z, \\ \varphi_1 = \varphi - \alpha z. \end{cases} \quad (3)$$

В новых координатах гамильтониан принимает следующий вид:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\left(\frac{\partial}{i\partial z_1} - \alpha \frac{\partial}{i\partial \varphi_1} \right)^2 + \frac{1}{R^2} \left(\frac{\partial}{i\partial \varphi_1} + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 \right) + V_0 \delta(\varphi_1). \quad (4)$$

Собственные функции гамильтониана (4) будем искать как состояния, соответствующие определенному значению оператора импульса вдоль винтовой линии спирали $\hbar \frac{\partial}{i\partial z_1}$, который в обычных цилиндрических координатах является оператором K :

$$\Psi(z_1, \varphi_1) = e^{ikz_1} f(\varphi_1). \quad (5)$$

При подстановке функции (5) в (4) получаем уравнение для функции $f(\varphi_1)$

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\left(k - \alpha \frac{\partial}{i\partial \varphi_1} \right)^2 + \frac{1}{R^2} \left(\frac{\partial}{i\partial \varphi_1} + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 \right) \times f(\varphi_1) + V_0 \delta(\varphi_1) f(\varphi_1) = E f(\varphi_1). \quad (6)$$

Частный случай уравнения (6) при $\alpha = 0$ рассматривался в [2], где исследовался цилиндр с прямым δ -барьером, проходящим по образующей.

Функция $f(\varphi_1)$ должна удовлетворять граничным условиям

$$\begin{cases} f(0) = f(2\pi), \\ f'(0) - f'(2\pi) = V f(0). \end{cases} \quad (7)$$

Здесь $V = 2m^* V_0 R^2 / \hbar^2 (1 + \alpha^2 R^2)$.

Решая уравнение (6) с учетом граничных условий (7), находим одноэлектронный спектр, который определяется парой квантовых чисел

$$E(k, m) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m^*} \varphi(k, m),$$

где

$$\varepsilon(k, m) = \frac{1}{1 + \alpha^2 R^2} \left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + (1 + \alpha^2 R^2) \frac{\Delta_m^2}{4\alpha^2 R^2}. \quad (8)$$

Здесь $m = 1, 2, \dots$ нумерует энергетические подзоны.

Граничные условия приводят к тому, что при фиксированном значении числа k число Δ_m принимает дискретные значения, являющиеся решениями следующего трансцендентного уравнения:

$$-\frac{\Delta}{V} = \frac{\sin(\pi \Delta)}{\cos(\pi \Delta) - \cos(\pi S)}, \quad (9)$$

где

$$S = 2 \frac{\alpha R^2 k - \Phi / \Phi_0}{1 + \alpha^2 R^2}. \quad (10)$$

Из (9) и (10) следует, что Δ_m является периодической функцией k/α и Φ/Φ_0 . Соответствующие периоды Δ_m равны

$$T_{k/\alpha} = \frac{1 + \alpha^2 R^2}{\alpha^2 R^2},$$

$$T_{\Phi/\Phi_0} = 1 + \alpha^2 R^2.$$

Кроме того, нетрудно показать, что имеет место следующее соотношение:

$$\Delta_m(k/\alpha, \Phi/\Phi_0) = \Delta_m(k/\alpha - N, \Phi/\Phi_0 + N), \quad (11)$$

где N — целое число.

Зависимость Δ_m от k/α показана на рис. 2. Амплитуда осцилляций Δ_m как функция k/α определяется амплитудой барьера V_0 . В случае $V_0 = \infty$ имеем числа $\Delta_m = m$, не зависящие от k и Φ/Φ_0 . При уменьшении V_0 амплитуда осцилляций возрастает. В пределе $V_0 = 0$, когда наша модель переходит в модель квантового цилиндра, максимумы $\Delta_m(k/\alpha)$ совпадают с минимумами $\Delta_{m+1}(k/\alpha)$.

Аналогичное сближение максимумов и минимумов соседних ветвей $\Delta_m(k/\alpha)$ имеет место при конечном значении V_0 с ростом номера m . Это означает, что высокие уровни электронного спектра цилиндра мало чувствительны к наличию возмущения.

Как видно из рис. 2, при любых конечных значениях амплитуды барьера максимумы функции $\Delta_m(k/\alpha)$ лежат на прямых, соответствующих $\Delta_m = m$.

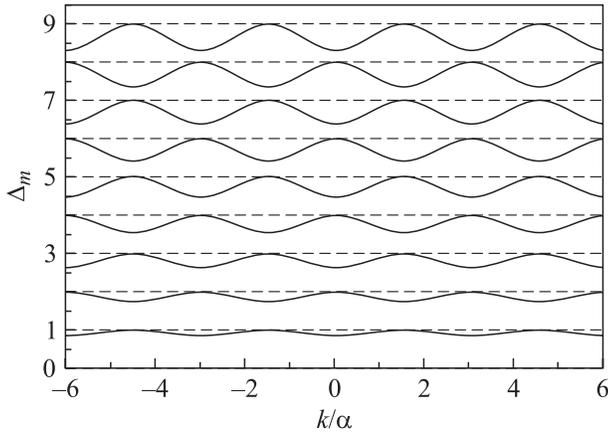


Рис. 2. $\Delta_m(k/\alpha)$ при $V = 4$ (сплошные линии) и $V = \infty$ (штриховые линии). $\alpha^2 R^2 = 0.5$, $\Phi/\Phi_0 = 0$.

Электронный спектр (8) не периодичен по k и магнитному потоку (рис. 3, *a, b*). Он состоит из двух слагаемых, одно из которых при изменении магнитного поля меняется квадратично, а другое — периодически. Вследствие этого в магнитном поле имеем асимметричный спектр $E(k) \neq E(-k)$, типичный для систем без центра инверсии при наличии возмущения, нарушающего t -инвариантность [8,11,12].

Однако наличие у Δ_m свойства (11) приводит к тому, что при изменении магнитного потока на целое число квантов график дисперсионной зависимости $\varepsilon(k/\alpha)$, изображенный на рис. 3, *a*, без искажений смещается по оси k/α на расстояние, равное потоку. А поскольку большинство физических характеристик системы определяется энергетическим спектром электронов, зависимость этих характеристик от магнитного поля будет периодической.

Собственные функции (5) в обычных цилиндрических координатах $\{z, \varphi\}$ имеют блоховский вид

$$\Psi_{km}(z, \varphi) = e^{ikz} u_{km}(z, \varphi). \quad (12)$$

Периодическую по z часть волновой функции с точностью до нормирующего множителя можно записать как

$$u_{km}(z, \varphi) = e^{i\lambda\varphi} \left(1 - e^{i\Delta_m\varphi} e^{-i\pi\Delta_m} \frac{\sin(\pi\lambda)}{\sin(\pi(\lambda + \Delta_m))} \right). \quad (13)$$

Здесь

$$\lambda = \frac{1}{1 + \alpha^2 R^2} (\alpha R^2 k - \Phi/\Phi_0) - \frac{\Delta_m}{2}, \quad (14)$$

$$\phi = \varphi - \alpha z - 2\pi M, \quad (15)$$

где M — целое число (такое, что $0 \leq \phi \leq 2\pi$).

Остановимся на двух предельных случаях.

1) Рассмотрим предельный случай бесконечной амплитуды спирального δ -барьера. При $V_0 = \infty$ переходы электронов через барьер становятся невозможными, и мы получаем модель, соответствующую двумерной

ленте, свернутой в спираль. Подобные квазидвумерные системы сравнительно недавно были реализованы в эксперименте [6].

Спектр и волновые функции для случая $V_0 = \infty$ принимают вид

$$\varepsilon(k, m) = \frac{1}{1 + \alpha^2 R^2} \left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + (1 + \alpha^2 R^2) \frac{m^2}{4\alpha^2 R^2}, \quad (16)$$

$$\Psi_{km}(z, \varphi) = e^{ikz} e^{i\frac{\Phi}{\Phi_0}\varphi} \sin\left(\frac{m}{2}(\varphi - \alpha z)\right). \quad (17)$$

Здесь S определяется формулой (10), а ϕ — формулой (15), $m = 1, 2, \dots$

Дисперсионная зависимость $\varepsilon(k)$ при $V_0 = \infty$ представляется набором парабол (штриховые линии на рис. 3). При уменьшении V_0 на этих параболах появляются осцилляции, положение которых определяется отношением периода спирали к радиусу трубки и величиной магнитного потока через сечение цилиндра, а амплитуда растет с уменьшением V_0 . При этом при любом $V_0 < \infty$ локальные максимумы дисперсионной зависимости m -й подзоны электронного спектра всегда лежат на соответствующей параболе (16). При достижении значения $V_0 = 0$ для $\varepsilon(k)$ снова получаем параболический закон дисперсии, но соответствующий уже спектру квантового цилиндра.

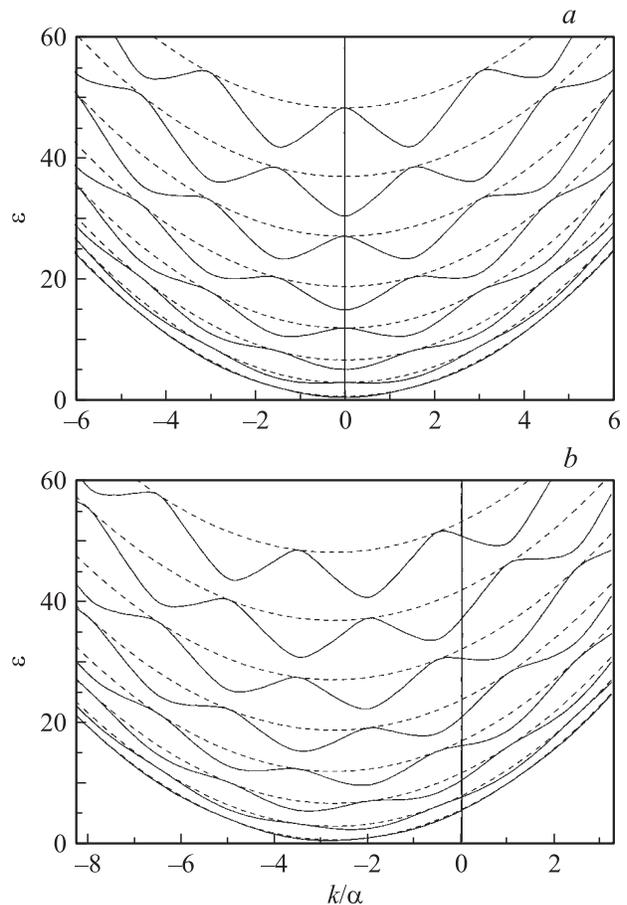


Рис. 3. $\varepsilon(k/\alpha)$ при $V = 4$ (сплошные линии) и $V = \infty$ (штриховые линии). $\alpha^2 R^2 = 0.5$. $\Phi/\Phi_0 = 0$ (*a*) и 2.7 (*b*).

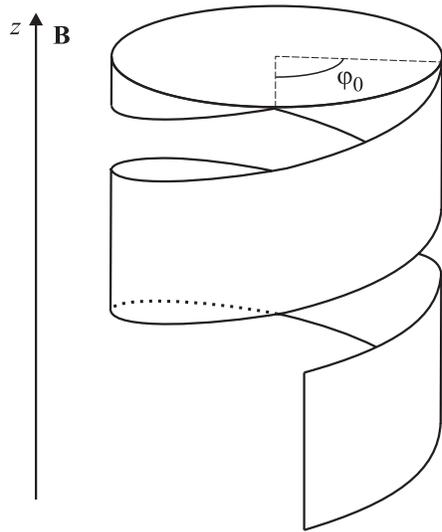


Рис. 4. Спиральная лента. φ_0 — угловая ширина щели.

2) Рассматриваемая модель позволяет получить аналитическое решение в том случае, когда спиральная симметрия цилиндру придается посредством прямоугольного потенциала конечной ширины. Обсудим здесь интересный с точки зрения практических приложений случай, когда амплитуда такого потенциала равна бесконечности. В этом случае наша модель соответствует спиральной ленте, витки которой пространственно разделены. Для характеристики щели, разделяющей витки, удобно ввести ее угловую ширину φ_0 (рис. 4).

Решая уравнение (6) с нулевыми граничными условиями на границах щели, получим электронный спектр

$$\varepsilon(k, m) = \frac{1}{1 + \alpha^2 R^2} \left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + (1 + \alpha^2 R^2) \frac{m^2}{4\alpha^2 R^2 (1 - \varphi_0/2\pi)}. \quad (18)$$

При стремлении φ_0 к нулю спектр (18) переходит в формулу (16).

При $\varphi_0 \rightarrow 2\pi$ расстояние между вершинами соседних подзон спектра (18) стремится к бесконечности. Поэтому при конечном числе электронов в системе они будут занимать только нижнюю подзону, соответствующую $m = 1$. Таким образом, получаем однопараметрическую формулу электронного спектра квазиодномерной спирали, которая соответствует спектру, рассмотренному в работе [16].

3. Баллистический транспорт

Продольная скорость v электрона в трубке определяется формулой

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}. \quad (19)$$

Вследствие (19) при простом параболическом виде зависимости энергии электрона от квантового числа k

баллистический кондактанс G определяется формулой Ландауэра [17,18], и проводимость при $T = 0$ имеет ступенчатую зависимость от химического потенциала μ

$$G = G_0 N(\mu). \quad (20)$$

Здесь $G_0 = 2e^2/\hbar$ — квант кондактанса, а $N(\mu)$ — число энергетических подзон, пересекаемых уровнем Ферми. Для нашей модели эта ситуация реализуется в предельных случаях цилиндра и спиральной двумерной ленты.

Различия баллистического кондактанса в этих двух случаях обусловлены тем, что электронные уровни орбитального движения спиральной ленты всегда невырождены, а энергетические уровни квантового цилиндра в отсутствие магнитного поля имеют двукратное вырождение, сохраняющееся при магнитном потоке, равном целому или полуцелому числу квантов. Следствием этого является различная высота ступенек кондактанса как функции химического потенциала системы μ (рис. 5, а).

При конечном значении амплитуды спирального δ -потенциала на дисперсионной зависимости энергетических подзон имеем участки с разными знаками скорости (19). Вследствие этого вклад каждой подзоны электронного спектра в баллистический кондактанс

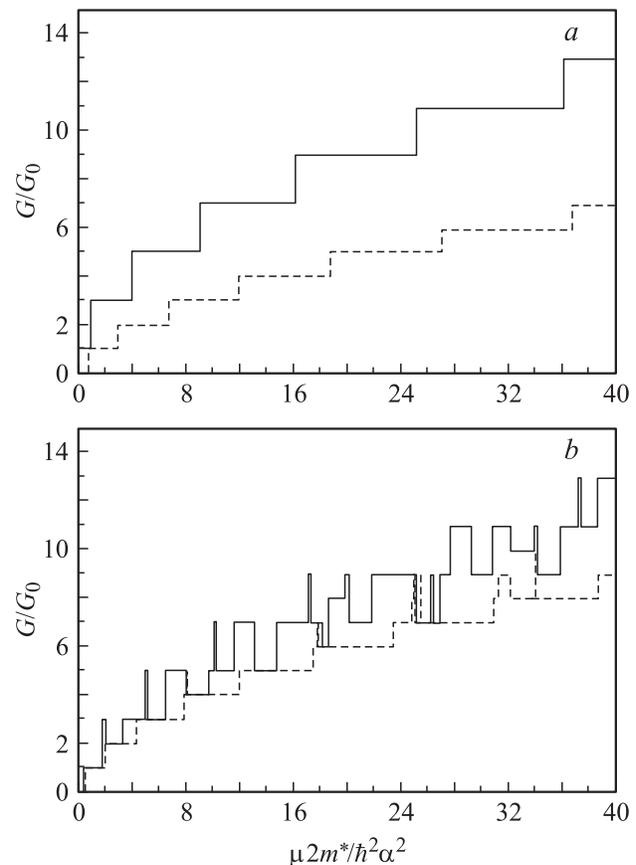


Рис. 5. Баллистический кондактанс нанотрубки для случая $\alpha^2 R^2 = 0.5$, $\Phi/\Phi_0 = 0$. а — $V = 0$ (сплошная линия) и $V = \infty$ (штриховая линия), б — $V = 3$ (сплошная линия) и $V = 30$ (штриховая линия).

структуры существенно зависит от ее заполнения электронами. Это приводит к немонотонной зависимости кондактанса от химического потенциала системы μ (рис. 5, *b*). Когда уровень Ферми пересекает локальный минимум подзоны, кондактанс системы увеличивается на один квант, а при пересечении локального максимума уменьшается. В данном случае такой немонотонный характер зависимости является следствием спиральной симметрии структуры и не наблюдается в пределе $\alpha = 0$.

Если проследить эволюцию баллистического кондактанса какие функции химического потенциала при постепенном росте амплитуды спирального возмущения V_0 , увидим, что на обычной ступенчатой зависимости кондактанса квантового цилиндра появляются провалы, которые с ростом V_0 расширяются. В пределе $V_0 = \infty$ вновь получаем ступенчатую функцию, соответствующую уже спиральной ленте.

Кондактанс как функция магнитного поля проявляет периодическую зависимость с периодом, равным кванту потока. Рост V_0 приводит, однако, к уменьшению влияния продольного магнитного поля на кондактанс системы. В пределе $V_0 = \infty$ баллистическая проводимость от поля не зависит.

4. Заключение

В настоящей работе аналитически найдены электронный спектр и волновые функции для модели цилиндрической нанотрубки со спиральной симметрией, помещенной в продольное магнитное поле. Собственные состояния гамильтониана этой системы являются бегущими волнами, распространяющимися вдоль винтовой линии спирали. Импульс движения вдоль спирали сохраняется. Частными случаями рассмотренной структуры являются спиральная двумерная лента и квазиодномерная спираль.

Локальные минимумы электронной энергии при ненулевых значениях k , возникающие при конечных значениях амплитуды спирального потенциала и существенно влияющие на физические свойства системы, ранее получались для цилиндрических структур вследствие учета релятивистского спин-орбитального взаимодействия (см., например, [2]). В нашем случае возникновение подобных минимумов представляет собой чисто орбитальный эффект и является следствием спиральной симметрии системы. Возникающая благодаря этой особенности спектра немонотонная зависимость кондактанса от химического потенциала системы делает спиральные структуры перспективным материалом с точки зрения создания прецизионных наноэлектронных устройств с отрицательной дифференциальной проводимостью.

Еще одним интересным свойством спиральной нанотрубки является асимметричный вид дисперсионных кривых в магнитном поле, что может проявляться, например, в фотогальваническом эффекте [11,12].

Заметим, что потенциал системы является периодической функцией по координате z , однако спектр (8)

не имеет типичной для периодических систем зонной структуры. В этом проявляется специфическое отличие нашей модели от обычной кристаллической решетки, обладающей лишь дискретными трансляциями, в которой число k соответствует квазиимпульсу и все неэквивалентные значения энергии находятся в пределах первой зоны Бриллюэна.

Авторы выражают глубокую признательность В.В. Дерягузову за полезные обсуждения и ценные замечания.

Список литературы

- [1] И.О. Кулик. Письма в ЖЭТФ **11**, 407 (1970).
- [2] Л.И. Магарилл, Д.А. Романов, А.В. Чаплик. ЖЭТФ **113**, 1411 (1998).
- [3] V.A. Margulis, M.A. Pyataev. Phys. Rev. B **72**, 075 312 (2005).
- [4] D.N. Aristov. Phys. Rev. B **59**, 6368 (1999).
- [5] J. Brüning, V.A. Geyler, V.A. Margulis, M.A. Pyataev. J. Phys. A: Math. Gen. **35**, 4239 (2002).
- [6] V.Y. Prinz. Physica E **24**, 54 (2004).
- [7] S. Roche, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, R. Saito. Phys. Rev. B **62**, 16 092 (2000).
- [8] О.В. Кибис. ФТТ **43**, 2237 (2001).
- [9] В.М. Осадчий, В.Я. Принц. Письма в ЖЭТФ **72**, 451 (2000).
- [10] В.А. Гейлер, О.Г. Костров, В.А. Маргулис. ФТТ **44**, 449 (2002).
- [11] А.А. Горбацевич, В.В. Капаев, Ю.В. Копаев. Письма в ЖЭТФ **57**, 565 (1993).
- [12] В.Я. Демиховский, А.А. Перов. Письма в ЖЭТФ **76**, 723 (2002).
- [13] M. Okamoto, T. Uda, K. Takayanagi. Phys. Rev. B **64**, 033 303 (2001).
- [14] M.V. Entin, L.I. Magarill. Phys. Rev. B **66**, 205 308 (2002).
- [15] В.Я. Демиховский, С.С. Савинский. ФТТ **34**, 2382 (1992).
- [16] Л.И. Магарилл, М.В. Энтин. Письма в ЖЭТФ **78**, 249 (2003).
- [17] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, S. Pinhas. Phys. Rev. B **31**, 6207 (1985).
- [18] В.М. Гантмахер. ФНТ **31**, 436 (2005).