1995 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 37, № 1
1995 SOLID STATE PHYSICS Vol. 37, N 1

ЭЛЕКТРОН-ФОТОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ФУЛЕРЕНОВЫХ ТРУБКАХ СО СПИРАЛЬНОЙ СИММЕТРИЕЙ

О.В.Кибис, Д.А.Романов

Новосибирский государственный технический университет
Поступило в Редакцию 25 апреля 1994 г.

Показано, что в квазиодномерных проводниках со спиральной кристаллической структурой (типа фуллереновых трубок) возможно внутризонное поглощение и излучение фотонов свободными носителями заряда.

Уровень развития современных технологий позволяет изготавливать новые твердотельные объекты с заданными параметрами кристаллической структуры, обладающие подчас нетривиальными физическими свойствами. В последнее время пристальное внимание привлекли к себе фуллерены — относительно недавно полученные углеродные структуры нанометровых масштабов и различных кристаллических модификаций. Особый интерес представляет исследование фуллеренов в форме трубочек диаметром 20÷100 Å, образованных расположенными вдоль винтовой линии атомами углерода [1,2]. Этот интерес обусловлен тем, что наличие кристаллической структуры со спиральной симметрией приводит к возможности появления ряда принципиально новых эффектов [3–5]. Настоящая работа посвящена процессам взаимодействия электронов в таких структурах с внешним переменным электромагнитным полем.

Используем в нашем рассмотрении модель [5], согласно которой проводящая система образована атомами, расположенными с периодом a вдоль винтовой линии, характеризуемой радиусом $R \gg a$ и шагом s. Для такой системы волновые функции электронов в приближении сильной связи при наличии произвольного внешнего электромагнитного поля со скалярным потенциалом $\varphi = 0$ и векторным потенциалом $\mathbf{A}$ определяются уравнением

$$i\hbar\frac{\partial C_n}{\partial t} = E_0 C_n - D\exp(i\varphi_{n+1})C_{n+1} - D\exp(i\varphi_{n-1})C_{n-1} -$$
$$- B\exp(i\varphi_{n-N})C_{n-N} - B\exp(i\varphi_{n+N})C_{n+N}.$$

Здесь C_n — амплитуда нахождения электрона у атома с номером n (нумерация атомов осуществляется вдоль винтовой линии, а номер атома

$n = \ldots, -1, 0, 1, \ldots$), E_0 — уровень энергии электрона в изолированном атоме, D и B — вещественные интегралы перекрытия для переходов между соседними атомами вдоль винтовой линии и между соседними витками, N — число атомов в одном витке винтовой линии,

$$\varphi_{n\pm1} = \frac{e}{\hbar c} \int\limits_{n\pm1}^{n} \mathbf{A} d\mathbf{r} \tag{2}$$

где интегрирование ведется вдоль дуги винтовой линии, соединяющей атомы $n \pm 1$ и n, и

$$\varphi_{n\pm N} = \frac{e}{\hbar c} \int\limits_{n\pm N}^{n} \mathbf{A} d\mathbf{r}, \tag{3}$$

где интегрирование ведется вдоль отрезка прямой, соединяющего атомы $n \pm N$ и n. Отметим, что в частном случае постоянного однородного магнитного поля, направленного вдоль оси винтовой линии, уравнение (1) переходит в ранее исследовавшееся уравнение сильной связи [5].

Будем рассматривать взаимодействие электронов с электромагнитным полем в рамках теории возмущений, в связи с чем разложим (1) в ряд по степеням $1/c$, ограничиваясь линейными членами. Тогда (1) примет вид

$$i\hbar \frac{\partial C_n}{\partial t} = E_0 C_n - DC_{n+1} - DC_{n-1} - BC_{n+N} - BC_{n-N} -$$
$$- iD\varphi_{n+1} C_{n+1} - iD\varphi_{n-1} C_{n-1} - iB\varphi_{n+N} C_{n+N} - iB\varphi_{n-N} C_{n-N}. \tag{4}$$

Поместим теперь нашу систему в бегущую вдоль оси винтовой линии z плоскую электромагнитную волну с круговой поляризацией. При этом в (2), (3) компоненты векторного потенциала равны

$$A_x = A_0 e^{i[(\omega z/c) + (\pi/2) - \omega t]}, \quad A_y = A_0 e^{i[(\omega z/c) + \pi - \omega t]}, \quad A_z = 0. \tag{5}$$

Тогда

$$\varphi_{n\pm1} = \pm \frac{2\pi e A_0 a R}{\hbar c l} e^{ina[2\pi + (\omega s/c)]/l} e^{-i\omega t}, \quad \varphi_{n\pm N} = 0, \tag{6}$$

где $l = 2\pi\sqrt{R^2 + (s^2/4\pi^2)}$ — длина одного витка винтовой линии. Собственные волновые функции $C_n(k)$ и энергетический спектр $E(k)$ электронов, определяемые при отсутствии возмущения ($A_0 = 0$), описываются соотношениями [5]

$$C_n(k) = \sqrt{a/L} e^{ikna} e^{-iE(k)t/\hbar}, \tag{7}$$

$$E(k) = E_0 - 2D \cos ka - 2B \cos Nka, \tag{8}$$

где k — волновой вектор электрона вдоль винтовой линии, L — длина винтовой линии. Поэтому матричный элемент энергии возмущения

$$\langle k'|V|k\rangle \equiv -iD \int dt \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^*(k')[\varphi_{n+1} C_{n+1}(k) + \varphi_{n-1} C_{n-1}(k)] \tag{9}$$

с учетом (5)–(7) определяется выражением

$$\langle k'|V|k\rangle = \frac{16\pi^3 eA_0RDa}{lLc}\sin(ka)\delta\times$$
$$\times[k-k'+(2\pi/l)+\omega s/cl]\times\delta(E(k')-E(k)-\hbar\omega).$$

Соответственно вероятность перехода электрона из состояния k в состояние k' в единицу времени под действием электромагнитной волны, отнесенная к объему одного состояния в **k**-пространстве, есть

$$W_{(kk')} = \frac{32\pi^3}{\hbar^3}\left(\frac{eA_0RDa}{lc}\right)^2\sin^2(ka)\delta\times$$
$$\times[k'-k+(2\pi/l)+(\omega s/cl)]\times\delta(E(k')-E(k)-\hbar\omega).$$

Из анализа (8) и (11) следует, что для произвольных состояний k и k' вероятность перехода $W_{k'k}$, вообще говоря, не равна нулю. Отличие от нуля (11) приводит к целому ряду эффектов. Так, например, если рассматриваемую проводящую систему замкнуть в электрическую цепь, то под действием электромагнитного излучения функция распределения электронов по состояниям k будет отличаться от своего равновесного значения, благодаря чему в цепи потечет электрический ток J. Решая кинетическое уравнение Больцмана в границах применимости приближения времени релаксации, получим

$$J = \frac{2e}{\pi\hbar}\int dk\frac{\partial E(k)}{\partial k}\tau(k)\int dk'\Big[W_{kk'}f_{k'}(1-f_k)-W_{k'k}f_k(1-f_{k'})\Big], \quad (12)$$

где f_k — функция распределения Ферми–Дирака, $\tau(k)$ — время релаксации. Если же цепь разомкнута, то под действием света возникнет градиент электронной плотности, приводящий к появлению разности потенциалов между концами проводника. Иными словами, в анализируемой системе существует фотогальванический эффект.

Необходимо отметить также, что если электронная система с помощью любого внешнего воздействия выведена из равновесного состояния, то функция распределения электронов будет релаксировать к своему равновесному значению не только благодаря традиционным механизмам электронного рассеяния, но и за счет испускания электронами фотонов. Отсюда следует, в частности, что протекание постоянного электрического тока в проводящей системе со спиральной симметрией будет сопровождаться излучением электромагнитных волн. Таким образом, возможность внутризонного поглощения и излучения фотонов в квазиодномерной проводящей системе со спиральной симметрией приводит к новым эффектам, которые могут наблюдаться в экспериментах.

Список литературы

[1] Iijima S. // Nature. 1991. V. 354. P. 56.
[2] Dresselhaus M.S. // Nature. 1992. V. 358. P. 195.
[3] Kibis O.V. // Phys. Lett. A. 1992. V. 166. P. 393.
[4] Кибис О.В. // ФТТ. 1992. Т. 34. С. 3511.
[5] Romanov D.A., Kibis O.V. // Phys. Lett. A. 1993. V. 178. P. 335.