Особенности электрон-фононного взаимодействия в нанотрубках с хиральной симметрией в магнитном поле

© О.В. Кибис

Новосибирский государственный технический университет,
630092 Новосибирск, Россия

E-mail: Oleg.Kibis@nstu.ru

(Поступила в Редакцию 16 апреля 2001 г.)

Рассмотрено взаимодействие электронов с акустическими фононами в нанотрубке с хиральной симметрией при наличии магнитного поля, параллельного оси нанотрубки. Показано, что в такой системе электронный энергетический спектр асимметричен относительно инверсии волнового вектора электрона, в связи с чем электрон-фононное взаимодействие оказывается различным для одинаковых фононов со взаимно противоположными направлениями волнового вектора. Этот феномен приводит к возникновению электродвижущей силы при пространственно однородном нагреве электронного газа и к появлению квадратичного по току слагаемого в вольт-амперной характеристике нанотрубки.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 00-02-17987 и 00-02-18010), Министерства образования Российской Федерации (грант № E00-3.4-506) и INTAS (грант № 99-1661).

В последнее время пристальное внимание теоретиков и экспериментаторов привлекают к себе низкоразмерные структуры с одновременным нарушением пространственной симметрии относительно инверсии координат и фундаментальной симметрии относительно обращения времени. Интерес к исследованию таких систем обусловлен появляющимся в них асимметричным энергетическим спектром электронов

$$\varepsilon(k) \neq \varepsilon(-k), \tag{1}$$

где k — волновой вектор электрона. Благодаря асимметрии (1) электронные свойства этих структур оказываются различными для взаимно противоположных направлений, что приводит к целому ряду принципиально новых физических явлений [1–11]. Так, в частности, здесь возникает асимметрия элементарных электронных взаимодействий, заключающаяся в различном взаимодействии электронов с любыми элементарными возбуждениями (фотонами, акустическими фононами и т. д.), имеющими противоположно направленные волновые векторы [5–7]. В свою очередь асимметрия электрон-фононного взаимодействия приводит к новым термомагнитным эффектам, предсказанным теоретически в работах [8–10] и совсем недавно обнаруженным экспериментально в двумерных структурах с асимметричным квантующим потенциалом [11]. В ходе этих исследований возник вопрос о том, существуют ли другие системы, отличные от двумерных структур, в которых будут реализовываться асимметричный энергетический спектр (1) и связанные с его асимметрией явления. Новым низкоразмерным твердотельным объектом, перспективным с этой точки зрения, является нанотрубка с хиральной симметрией.

Физические свойства нанотрубок с хиральной симметрией (трубок диаметром около нанометра, расположение атомов в которых обладает симметрией винтовой линии) стали предметом интенсивных исследований сразу же после первого сообщения о синтезе углеродных нанотрубок [12]. Эти нанотрубки представляют собой свернутый графитовый слой, способ сворачивания которого описывается двумя кристаллографическими параметрами (n, m), определяющими диаметр нанотрубки и ее хиральность [13–15]. Благодаря винтовой симметрии кристаллической структуры в нанотрубке отсутствует центр инверсии, а при наличии магнитного поля нарушается еще и симметрия относительно обращения времени. Поэтому в углеродных нанотрубках с хиральной симметрией, помещенных в магнитное поле, следует ожидать появления аномальных кинетических эффектов, подобных тем, о которых шла речь выше. Данная работа посвящена первому теоретическому исследованию эффектов, обусловленных особенностями электрон-фононного взаимодействия в такой структуре.

1. Асимметрия энергетического спектра электронов при наличии магнитного поля

При описании нанотрубки с хиральной симметрией воспользуемся моделью [16,17], в рамках которой нанотрубка рассматривается как совокупность одинаковых атомов (или атомных ячеек), расположенных с периодом b вдоль винтовой линии (схематичное изображение фрагмента нанотрубки приведено на рисунке). Пусть при этом диаметр винтовой линии $D \gg b$, а шаг винтовой линии $d \ll D$, так что длина одного витка винтовой линии

$$\sqrt{\pi^2 D^2 + d^2} = N_0 b,$$

где

$$N_0 \gg 1$$

есть число атомов в одном витке. Поместим нанотрубку в магнитное поле $\mathbf{H}$, направленное вдоль оси винтовой линии. Если магнитное поле является достаточно слабым, то оно практически не влияет на величину модуля волновой функции электрона в отдельно взятом атоме, приводя лишь к изменениям ее фазы при переходе от одного атома к другому. В этом случае гамильтониан электрона в нанотрубке в приближении сильной связи определяется выражением

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_n \big(|n\rangle\langle n|\mathcal{H}|n\rangle\langle n| + |n\rangle\langle n|\mathcal{H}|n+1\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n|\mathcal{H}|n-1\rangle\langle n-1| + |n\rangle\langle n|\mathcal{H}|n + N_0\rangle\langle n+N_0| + |n\rangle\langle n|\mathcal{H}|n-N_0\rangle\langle n-N_0|\big), \quad (2)$$

где $|n\rangle$ — состояние электрона, соответствующее его нахождению у атома с номером n (нумерация атомов $n = \ldots -1, 0, 1\ldots$ ведется вдоль винтовой линии), $\langle n|\mathcal{H}|n\rangle = \varepsilon_0$ — энергия электрона в изолированном атоме, а матричные элементы гамильтониана, определяющие амплитуду перехода электрона от атома n к его четырем ближайшим соседям $n \pm 1$ и $n \pm N_0$, имеют вид

$$\langle n|\mathcal{H}|n\pm 1\rangle = -A(l_{n,n\pm 1})\exp(i\varphi_{n\pm 1}),$$

$$\langle n|\mathcal{H}|n\pm N_0\rangle = -A(l_{n,n\pm N_0})\exp(i\varphi_{n\pm N_0}).$$

Здесь $-A(l_{n,m})$ — вещественный интеграл перекрытия волновых функций атомов n и m в отсутствие магнитного поля, зависящий от расстояния $l_{n,m}$ между этими атомами, а обусловленные магнитным полем фазовые сдвиги определяются выражениями

$$\varphi_{n\pm N_0} = \frac{e}{\hbar c}\int_n^{n\pm N_0} \mathbf{A}_H(\mathbf{r}')d\mathbf{r}', \quad (3)$$

$$\varphi_{n\pm 1} = \frac{e}{\hbar c}\int_n^{n\pm 1} \mathbf{A}_H(\mathbf{r}')d\mathbf{r}', \quad (4)$$

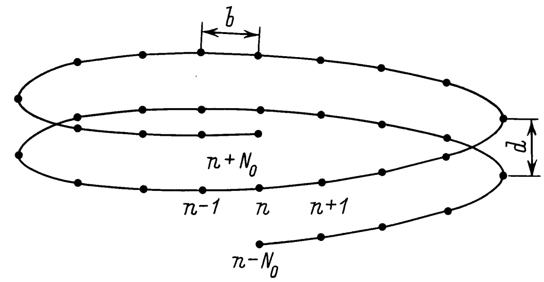
где $\mathbf{A}_H(\mathbf{r})$ — векторный потенциал магнитного поля, e — модуль заряда электрона. При этом интегрирование в (3) ведется вдоль отрезка прямой, соединяющего расположенные в соседних витках атомы n и $n \pm N_0$, а в (4) — вдоль отрезка, соединяющего атомы n и $n \pm 1$. Выбрав векторный потенциал в аксиально-симметричной калибровке

$$\mathbf{A}_H = \frac{1}{2}\mathbf{H}\times\mathbf{r},$$

получим из общих соотношений (3) и (4)

$$\varphi_{n\pm N_0} = 0,$$

$$\varphi_{n\pm 1} = \pm 2\pi\,\frac{\nu(H)}{N_0},$$



Фрагмент нанотрубки, образованной расположенными вдоль винтовой линии атомами.

где

$$\nu(H) = \frac{\pi D^2 eH}{4ch}$$

есть число квантов магнитного потока hc/e через поперечное сечение нанотрубки. Рассмотрим сначала ситуацию, когда фононы в нанотрубке отсутствуют, благодаря чему межатомные расстояния $l_{n,m}$ не меняются с течением времени, так что в любой момент $l_{n,n\pm 1} = b$ и $l_{n,n\pm N_0} = d$. В этом случае гамильтониан (2) принимает вид

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_n \big(|n\rangle\varepsilon_0\langle n| - |n\rangle A(b)\exp(i\varphi_{n+1})\langle n+1| - |n\rangle A(b)\exp(i\varphi_{n-1})\langle n-1| - |n\rangle A(d)\langle n+N_0| - |n\rangle A(d)\langle n-N_0|\big). \quad (5)$$

Собственно волновые функции этого гамильтониана определяются выражением

$$\psi_k = \sum_n C_n(k)|n\rangle, \quad (6)$$

где амплитуда нахождения электрона у атома с номером n есть

$$C_n(k) = \frac{1}{\sqrt{N}}\exp(inkb)\exp[-i\varepsilon(k)t/\hbar], \quad (7)$$

k — волновое число электрона, соответствующее его движению вдоль винтовой линии, N — полное число атомов в нанотрубке, а энергия электронов в нанотрубке

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_0 - 2A(b)\cos\left(kb + 2\pi\,\frac{\nu(H)}{N_0}\right) - 2A(d)\cos(N_0kb). \quad (8)$$

Из (8) следует, что энергетический спектр электрона в нанотрубке является периодической функцией магнитного поля, причем при магнитных полях, удовлетворяющих условию

$$\frac{\nu(H)}{N_0} \neq z \quad (z = 0, 1, 2, 3, \ldots),$$

возникает интересующий нас асимметричный энергетический спектр (1).

Прежде чем перейти к анализу эффектов, появляющихся в нанотрубках благодаря асимметрии (1), адаптируем нашу модель применительно к простому случаю углеродных нанотрубок со слабой хиральностью типа $(n, 1)$, где $n \gg 1$. В таких нанотрубках межатомные расстояния $b \approx d$, вследствие чего интегралы перекрытия атомных волновых функций $A(b) \approx A(d)$. Поэтому во всех дальнейших расчетах будем полагать, что

$$b = d = a, \quad A(b) = A(d) = A(a),$$

где $a \sim 10^{-8}$ cm — характерный период кристаллической структуры нанотрубки, $A(a) \sim$ eV — характерный интеграл перекрытия. Ограничимся в последующем анализе случаем слабых магнитных полей, удовлетворяющих условию

$$\frac{\nu(H)}{N_0} \ll 1, \tag{9}$$

и будем рассматривать ситуацию, когда электроны занимают состояния в небольшой окрестности минимума энергетической зоны (8), расположенного в отсутствие магнитного поля в точке $k = 0$. Выбирая начало отсчета энергии в точке минимума, получим из соотношения (8), что энергетический спектр электрона вблизи этого минимума при наличии магнитного поля имеет вид

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 (k - k_H)^2}{2m}, \tag{10}$$

где сдвиг минимума зоны проводимости под действием магнитного поля

$$k_H = -\frac{2\pi}{aN_0^3}\,\nu(H),$$

а эффективная масса электрона

$$m = \frac{\hbar^2}{2A(a)N_0^2 a^2}.$$

2. Пространственная асимметрия электрон-фононного взаимодействия

В рассматриваемой нанотрубке фононные состояния описываются волновым числом q, характеризующим распространение акустической волны вдоль винтовой линии. При этом могут существовать продольные акустические фононы (для которых смещения атомов из положения равновесия происходят вдоль винтовой линии) и поперечные акустические фононы (для которых смещения атомов происходят в направлении, перпендикулярном винтовой линии). Рассмотрим взаимодействие электронов с этими различными типами колебаний кристаллической решетки при наличии асимметричного энергетического спектра (1).

В присутствии продольных фононов координата x_n атома n вдоль винтовой линии определяется соотношением

$$x_n = na + \tilde{x}_n, \tag{11}$$

где смещение атома из положения равновесия

$$\tilde{x}_n = \sum_{q_l} u_{q_l} \exp(inq_l a) \exp[-i\omega(q_l)t],$$

q_l — волновое число продольного фонона, амплитуда смещения атома

$$u_{q_l} = \left[\frac{\hbar}{2\omega(q_l)NM}\right]^{1/2},$$

частота фонона

$$\omega(q_l) = v_l |q_l|,$$

v_l — скорость продольной акустической волны, M — масса атома. Подставим (11) в интегралы перекрытия и учтем, что изменение межатомного расстояния вследствие наличия фононов существенно меньше кристаллического периода a, так что

$$\frac{|\tilde{x}_n - \tilde{x}_{n\pm1}|}{a} \ll 1.$$

Тогда, разлагая интегралы перекрытия атомных волновых функций $A(l_{n,m})$ в ряд по степеням этого малого параметра и ограничиваясь величинами первого порядка малости, получим из (2)

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \sum_{q_l} \hat{\mathcal{H}}_{q_l}. \tag{12}$$

Здесь $\hat{\mathcal{H}}_{q_l}$ — гамильтониан взаимодействия электрона с продольным фононом q_l, определяемый выражением

$$\hat{\mathcal{H}}_{q_l} = \sum_n \big(|n\rangle\langle n|\mathcal{H}_{q_l}|n+1\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n|\mathcal{H}_{q_l}|n-1\rangle\langle n-1|\big), \tag{13}$$

где матричные элементы

$$\langle n|\mathcal{H}_{q_l}|n+1\rangle = (\Xi/a)u_{q_l} \exp[-i\omega(q_l)t] \exp(inq_l a) \times \exp(i\varphi_{n+1})[\exp(iq_l a) - 1],$$

$$\langle n|\mathcal{H}_{q_l}|n-1\rangle = (\Xi/a)u_{q_l} \exp[-i\omega(q_l)t] \exp(inq_l a) \times \exp(i\varphi_{n-1})[1 - \exp(-iq_l a)],$$

а константа деформационного потенциала нанотрубки

$$\Xi = -a\,\frac{dA(l)}{dl}\,\Big|_{l=a}.$$

Вероятность поглощения электронами фонона q_l определяется хорошо известным квантово-механическим соотношением

$$W_a(q_l) = \frac{f_{\mathrm{BE}}(q_l)}{\hbar^2} \sum_k \sum_{k'} \big|\langle\psi_{k'}|\hat{\mathcal{H}}_{q_l}|\psi_k\rangle\big|^2 \times f_{\mathrm{FD}}(\varepsilon_k)[1 - f_{\mathrm{FD}}(\varepsilon_{k'})], \tag{14}$$

где $f_{\mathrm{BE}}(q)$ — функция распределения Бозе–Эйнштейна для фонона в состоянии с волновым числом q, $f_{\mathrm{FD}}(\varepsilon)$ —

функция распределения Ферми–Дирака для электрона в состоянии с энергией ε, а $\langle\psi_{k'}|\hat{\mathcal{H}}_{q_l}|\psi_k\rangle$ есть матричный элемент электрон-фононного взаимодействия, соответствующий переходу электрона из состояния k в состояние k' при поглощении фонона q_l. Подставляя в этот матричный элемент явные выражения для волновой функции (6), (7) и для гамильтониана электрон-фононного взаимодействия (13), получим

$$\langle\psi_{k'}|\hat{\mathcal{H}}_{q_l}|\psi_k\rangle = i\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2\left(\frac{\Xi\hbar}{N}\right)\left(\frac{2\hbar}{\omega(q_l)NM}\right)^{1/2} \times\delta(\varepsilon_k+\hbar\omega(q_l)-\varepsilon_{k'})\delta(k+q_l-k') \times\left[\sin\left([q_l+k]a+2\pi\frac{\nu(H)}{N_0}\right) - \sin\left(ka+2\pi\frac{\nu(H)}{N_0}\right)\right]. \quad (15)$$

Из (14), (15) с учетом (10) получаем, что в линейном порядке по магнитному полю вероятность поглощения продольного фонона в единицу времени на единице длины винтовой линии определяется выражением

$$w_a(q_l) = w_{a0}(q_l)\left[1-\frac{4\pi amv_l}{\hbar N_0}\frac{q_l}{|q_l|}\nu(H)\right], \quad (16)$$

где

$$w_{a0}(q_l) = \left(\frac{4\Xi^2 m}{\hbar^2 v_l MN}\right) f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_l}{\hbar}-\frac{|q_l|}{2}\right]^2\right) \times\left[1-f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_l}{\hbar}+\frac{|q_l|}{2}\right]^2\right)\right] f_{\mathrm{BE}}(q_l) \quad (17)$$

есть вероятность поглощения фонона в отсутствие магнитного поля. Соответственно вероятность излучения продольного фонона q_l определяется выражением

$$w_e(q_l) = w_{e0}(q_l)\left[1-\frac{4\pi amv_l}{\hbar N_0}\frac{q_l}{|q_l|}\nu(H)\right], \quad (18)$$

где

$$w_{e0}(q_l) = \left(\frac{4\Xi^2 m}{\hbar^2 v_l MN}\right) f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_l}{\hbar}+\frac{|q_l|}{2}\right]^2\right) \times\left[1-f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_l}{\hbar}-\frac{|q_l|}{2}\right]^2\right)\right]\left[f_{\mathrm{BE}}(q_l)+1\right] \quad (19)$$

есть вероятность излучения фонона в отсутствие магнитного поля.

Анализ взаимодействия электронов с поперечными акустическими фононами по идее аналогичен проведенному выше анализу взаимодействия с продольными фононами. Отличие от случая продольных фононов заключается лишь в том, что поперечные фононы меняют расстояние между атомами, расположенными в различных витках винтовой линии. При наличии поперечных фононов координата z_n атома n вдоль оси винтовой линии определяется соотношением

$$z_n = na + \tilde{z}_n, \quad (20)$$

где смещение атома из положения равновесия

$$\tilde{z}_n = \sum_{q_t} u_{q_t}\exp(inq_t a)\exp[-i\omega(q_t)t],$$

q_t — волновое число поперечного фонона, амплитуда смещения атома

$$u_{q_t} = \left[\frac{\hbar}{2\omega(q_t)NM}\right]^{1/2},$$

частота поперечного фонона

$$\omega(q_t) = v_t|q_t|,$$

а v_t — скорость поперечной акустической волны. Подставим (2) в интегралы перекрытия и учтем, что изменение межатомного расстояния вследствие наличия фононов существенно меньше шага винтовой линии, так что

$$\frac{|\tilde{z}_n-\tilde{z}_{n\pm1}|}{a} \ll 1.$$

Тогда, разлагая интегралы перекрытия атомных волновых функций $A(l_{n,m})$ в ряд по степеням этого малого параметра и ограничиваясь величинами первого порядка малости, получим из (2)

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \sum_{q_t}\hat{\mathcal{H}}_{q_t}. \quad (21)$$

Здесь $\hat{\mathcal{H}}_{q_t}$ — гамильтониан взаимодействия электрона с поперечным фононом q_t, определяемый выражением

$$\hat{\mathcal{H}}_{q_t} = \sum_n\big(|n\rangle\langle n|\mathcal{H}_{q_t}|n+N_0\rangle\langle n+N_0| + |n\rangle\langle n|\mathcal{H}_{q_t}|n-N_0\rangle\langle n-N_0|\big), \quad (22)$$

где матричные элементы

$$\langle n|\hat{\mathcal{H}}_{q_t}|n+N_0\rangle = (\Xi/a)u_{q_t}\exp[-i\omega(q_t)t] \times\exp(inq_t a)[\exp(iN_0q_t a)-1],$$

$$\langle n|\mathcal{H}_{q_t}|n-N_0\rangle = (\Xi/a)u_{q_t}\exp[-i\omega(q_t)t] \times\exp(inq_t a)[1-\exp(-iN_0q_t a)].$$

Соответственно вероятность поглощения электронами поперечного фонона

$$W_a(q_t) = \frac{f_{\mathrm{BE}}(q_t)}{\hbar^2}\sum_k\sum_{k'}\left|\langle\psi_{k'}|\hat{\mathcal{H}}_{q_t}|\psi_k\rangle\right|^2 \times f_{\mathrm{FD}}(\varepsilon_k)[1-f_{\mathrm{FD}}(\varepsilon_{k'})], \quad (23)$$

где матричный элемент электрон-фононного взаимодействия, соответствующий переходу электрона из состояния k в состояние k' при поглощении фонона q_t, есть

$$\langle\psi_{k'}|\hat{\mathcal{H}}_{q_t}|\psi_k\rangle = i\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2\left(\frac{\Xi\hbar}{N}\right)\left(\frac{2\hbar}{\omega(q_t)NM}\right)^{1/2} \times \delta(\varepsilon_k + \hbar\omega(q_t) - \varepsilon_{k'})\delta(k + q_t - k') \times \left[\sin\left(N_0[q_t + k]a\right) - \sin\left(N_0ka\right)\right]. \tag{24}$$

Из (23) и (24) с учетом (10) получаем, что в линейном порядке по магнитному полю вероятность поглощения поперечного фонона в единицу времени на единице длины винтовой линии определяется выражением

$$w_a(q_t) = w_{a0}(q_t)\left[1 + \frac{4\pi amv_t}{\hbar N_0}\frac{q_t}{|q_t|}\nu(H)\right], \tag{25}$$

где

$$w_{a0}(q_t) = \left(\frac{4\Xi^2mN_0^2}{\hbar^2v_tMN}\right)f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_t}{\hbar} - \frac{|q_t|}{2}\right]^2\right) \times \left[1 - f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_t}{\hbar} + \frac{|q_t|}{2}\right]^2\right)\right]f_{\mathrm{BE}}(q_t) \tag{26}$$

есть вероятность поглощения поперечного фонона в отсутствие магнитного поля. Соответственно вероятность излучения поперечного фонона определяется выражением

$$w_e(q_t) = w_{e0}(q_t)\left[1 + \frac{4\pi amv_t}{\hbar N_0}\frac{q_t}{|q_t|}\nu(H)\right], \tag{27}$$

где

$$w_{e0}(q_t) = \left(\frac{4\Xi^2mN_0^2}{\hbar^2v_tMN}\right)f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_t}{\hbar} + \frac{|q_t|}{2}\right]^2\right) \times \left[1 - f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_t}{\hbar} - \frac{|q_t|}{2}\right]^2\right)\right]\left[f_{\mathrm{BE}}(q_t) + 1\right] \tag{28}$$

есть вероятность излучения поперечного фонона в отсутствие магнитного поля.

Из полученных выражений (16), (18), (25) и (27) непосредственно следует пространственная асимметрия электрон-фононного взаимодействия: вероятности взаимодействия электронов с одинаковыми фононами, имеющими взаимно противоположные направления волнового вектора, оказываются различными.

3. Возникновение ЭДС при однородном нагреве электронного газа

Обсудим теперь взаимодействие между электронной и фононной системами, находящимися в неравновесном состоянии вследствие пространственно однородного нагрева. В этом случае распределение фононов по энергии описывается функцией Бозе–Эйнштейна

$$f_{\mathrm{BE}}(q) = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega(q)}{k_{\mathrm{B}T}}\right) - 1\right]^{-1},$$

где T — температура кристаллической решетки, а распределение электронов по энергии описывается функцией Ферми–Дирака

$$f_{\mathrm{FD}}(\varepsilon) = \left[\exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_{\mathrm{F}}}{k_{\mathrm{B}}T_e}\right) + 1\right]^{-1},$$

где T_e — электронная температура. При $T_e < T$ происходит передача энергии от фононной системы к электронной системе, сопровождающаяся поглощением фононов электронами. При $T_e > T$, наоборот, происходит передача энергии от электронов к фононной системе, сопровождающаяся излучением фононов. Поскольку вероятности электрон-фононного взаимодействия различны для фононов с противоположными направлениями волнового вектора, передача энергии сопровождается изменением импульса электронной системы, что приведет к появлению электродвижущей силы при $T_e \neq T$. Этот феномен представляет собой частное проявление универсального эффекта [7], заключающегося в возникновении ЭДС при изотропном возмущении любой электронной системы с асимметричным энергетическим спектром (1). В данном случае в роли изотропного возмущения выступает пространственно однородный нагрев.

Будем рассматривать достаточно низкие температуры, когда можно пренебречь электрон-фононными процессами переброса за пределы первой зоны Бриллюэна. В этом случае средняя сила, действующая на один электрон со стороны фононной системы, есть

$$F = \frac{\hbar}{n_L}\sum_{q_l} q_l[w_a(q_l) - w_e(q_l)] + \frac{\hbar}{n_L}\sum_{q_t} q_t[w_a(q_t) - w_e(q_t)], \tag{29}$$

где n_L — концентрация электронов на единицу длины винтовой линии. Соответственно напряженность электрического поля сторонних сил

$$E^* = -\frac{F}{e}, \tag{30}$$

и возникающая в нанотрубке ЭДС имеет вид

$$\mathcal{E} = \int_{-L/2}^{L/2} E^*dx, \tag{31}$$

где $L = Na$ — длина винтовой линии. Из (29)–(31) получаем, что интересующая нас ЭДС определяется выражением

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar L}{n_L e}\sum_{q_l} q_l[w_e(q_l) - w_a(q_l)] + \frac{\hbar L}{n_L e}\sum_{q_t} q_t[w_e(q_t) - w_a(q_t)]. \qquad (32)$$

Из соотношений для вероятностей электрон-фононного взаимодействия (16)–(19) и (25)–(28) следует, что

$$\frac{w_a(q_t)}{w_a(q_l)} \sim \frac{w_e(q_t)}{w_e(q_l)} \sim N_0^2 \gg 1,$$

в связи с чем основной вклад в формирование ЭДС (32) вносит взаимодействие с поперечными фононами. Пренебрежем в (32) взаимодействием электронов с продольными фононами и подставим в это выражение соотношения (25)–(28). Тогда, переходя от суммирования по фононным состояниям к интегрированию по фононному волновому числу, получаем из (32)

$$\mathcal{E} = \left(\frac{4\Xi ma}{\hbar}\right)^2\left(\frac{LN_0}{Men_L}\right)\nu(H) \times \int_0^\infty dq_t q_t\left\{\left[1 - f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_t}{2} - \frac{|q_t|}{2}\right]^2\right)\right] f_{\mathrm{FD}} \times \left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_t}{\hbar} + \frac{|q_t|}{2}\right]^2\right)[f_{\mathrm{BE}}(q_t) + 1] - \left[1 - f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_t}{\hbar} + \frac{|q_t|}{2}\right]^2\right)\right] f_{\mathrm{FD}} \times \left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_t}{\hbar} - \frac{|q_t|}{2}\right]^2\right) f_{\mathrm{BE}}(q_t)\right\}. \qquad (33)$$

Будем полагать электрон-фононное взаимодействие квазиупругим процессом, что адекватно требованию

$$\frac{mv_t^2}{k_{\mathrm{B}}T_e} \ll 1,$$

и рассматривать случай сильного перегрева электронного газа, когда

$$\frac{T}{T_e} \ll 1.$$

При выполнении этих условий выражение (33) принимает простой вид

$$\mathcal{E} = \left(\frac{4\Xi ma}{\hbar}\right)^2\left(\frac{LN_0}{Men_L}\right)\nu(H) \times \int_0^\infty dq_t q_t\left[1 - f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2 q_t^2}{8m}\right)\right] f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2 q_t^2}{8m}\right), \qquad (34)$$

и после элементарного интегрирования в (34) получаем окончательное выражение для интересующей нас ЭДС

$$\mathcal{E} = \left(\frac{8\Xi ma}{\hbar^2}\right)^2\left(\frac{LN_0 mk_{\mathrm{B}}T_e}{Men_L}\right)\nu(H) \times \left[1 + \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\mathrm{F}}}{k_{\mathrm{B}}T_e}\right)\right]^{-1}. \qquad (35)$$

В случае вырожденного электронного газа

$$\exp\left(-\frac{\varepsilon_{\mathrm{F}}}{k_{\mathrm{B}}T_e}\right) \ll 1$$

и ЭДС (35) линейно зависит от температуры

$$\mathcal{E} = \left(\frac{8\Xi ma}{\hbar^2}\right)^2\left(\frac{LN_0 mk_{\mathrm{B}}T_e}{Men_L}\right)\nu(H). \qquad (36)$$

Для невырожденного электронного газа

$$\exp\left(-\frac{\varepsilon_{\mathrm{F}}}{k_{\mathrm{B}}T_e}\right) \gg 1,$$

$$n_L = \sqrt{\frac{mk_{\mathrm{B}}T_e}{2\hbar^2\pi}}\exp\left(\frac{\varepsilon_{\mathrm{F}}}{k_{\mathrm{B}}T_e}\right),$$

в связи с чем ЭДС (35) в этом случае корневым образом зависит от температуры

$$\mathcal{E} = \left(\frac{8\Xi ma}{\hbar^2}\right)^2\left(\frac{LN_0\hbar}{Me}\right)\nu(H)\sqrt{2\pi mk_{\mathrm{B}}T_e}. \qquad (37)$$

Для углеродных нанотрубок с диаметром $D \sim 10^{-9}$ m при магнитных полях $H \sim 10^4$ G и электронных температурах $T_e \sim 10^2$ K получаем из (37)

$$\frac{\mathcal{E}}{L} \sim 10^{-4}\ \mathrm{V/cm}.$$

4. Влияние асимметричного электрон-фононного взаимодействия на вольт-амперную характеристику нанотрубки

Наиболее простым способом разогрева электронной системы относительно кристаллической решетки, приводящим к появлению ЭДС $\mathcal{E}$, является разогрев с помощью джоулева тепла. Поэтому протекание по нанотрубке электрического тока J при наличии внешнего магнитного поля будет сопровождаться возникновением ЭДС $\mathcal{E}$, приводящей к изменению вольт-амперной характеристики. Таким образом, для анализа влияния электрон-фононного взаимодействия на вольт-амперную характеристику нанотрубки необходимо установить взаимосвязь между величинами J и $\mathcal{E}$.

Энергия J^2R, получаемая электронной системой от источника тока в единицу времени, передается кристаллической решетке посредством излучения фононов, в связи с чем уравнение энергетического баланса между электронной и фононной системами имеет вид

$$J^2R = L\sum_{q_l}\hbar\omega(q_l)[w_e(q_l) - w_a(q_l)]$$

$$+ L\sum_{q_t}\hbar\omega(q_t)[w_e(q_t) - w_a(q_t)], \qquad (38)$$

где R — сопротивление нанотрубки. Из ранее проведенного анализа следует, что основной вклад в процессы электрон-фононного взаимодействия вносят поперечные фононы, благодаря чему можно пренебречь в (38) взаимодействием электронов с продольными фононами. Подставляя в (38) соотношения (25)–(28) для вероятностей взаимодействия электронов с поперечными фононами и переходя от суммирования по фононным состояниям к интегрированию по фононному волновому числу, получаем

$$J^2R = \left(\frac{4\Xi^2 m N_0^2 La}{\hbar\pi M}\right)$$

$$\times \int_0^\infty dq_t q_t \left\{\left[1 - f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_t}{\hbar} - \frac{|q_t|}{2}\right]^2\right)\right] f_{\mathrm{FD}}\right.$$

$$\times \left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_t}{\hbar} + \frac{|q_t|}{2}\right]^2\right)[f_{\mathrm{BE}}(q_t) + 1]$$

$$- \left[1 - f_{\mathrm{FD}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_t}{\hbar} + \frac{|q_t|}{2}\right]^2\right)\right] f_{\mathrm{FD}}$$

$$\left.\times \left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{mv_t}{\hbar} - \frac{|q_t|}{2}\right]^2\right) f_{\mathrm{BE}}(q_t)\right\}. \qquad (39)$$

Из сопоставления (39) и (33) следует, что фигурирующие в этих выражениях интегралы идентичны, благодаря чему прямая подстановка (39) в (33) приводит к интересующему нас соотношению между величинами $\mathcal{E}$ и J

$$\mathcal{E} = \alpha(H)J^2, \qquad (40)$$

где

$$\alpha(H) = \frac{4\pi maR}{\hbar e n_L N_0}\,\nu(H).$$

Разность потенциалов U между концами нанотрубки при протекании по ней тока J будет представлять собой сумму обычного омического члена JR и ЭДС (40), в связи с чем вольт-амперная характеристика нанотрубки $U(J)$ будет определяться выражением

$$U(J) = JR + \alpha(H)J^2. \qquad (41)$$

Из (41) следует, что пространственная асимметрия электрон-фононного взаимодействия приводит к появлению квадратичного по току слагаемого в вольт-амперной характеристике. При $N_0 \approx 5$, $n_L \sim 10^4\,\mathrm{cm}^{-1}$, $J \sim 10\,\mathrm{nA}$ и $H \sim 10^5\,\mathrm{G}$ вклад квадратичного по току слагаемого в напряжение (41) составляет десятые доли процента от вклада омического члена.

Итак, в нанотрубках с хиральной симметрией при наличии направленного вдоль оси нанотрубки магнитного поля появляется асимметричный энергетический спектр электронов. Благодаря этой асимметрии возникает различное взаимодействие электронов с одинаковыми фононами, движущимися во взаимно противоположных направлениях. Эта пространственная асимметрия электрон-фононного взаимодействия приводит к тому, что передача энергии от электронной системы к кристаллической решетке посредством излучения фононов сопровождается изменением импульса электронной системы и как следствие возникновением ЭДС. В частности, эта ЭДС может появляться при разогреве электронной системы джоулевым теплом протекающего по нанотрубке электрического тока. Поскольку разогрев электронной системы не зависит от направления тока, возникающая ЭДС приводит к появлению квадратичного по току слагаемого в вольт-амперной характеристике нанотрубки. Величина этого квадратичного слагаемого и соответственно приобретаемые нанотрубкой выпрямляющие свойства управляются магнитным полем, что открывает новые перспективы для использования нанотрубки в качестве элемента функциональной электроники.

Список литературы

[1] А.А. Горбацевич, В.В. Капаев, Ю.В. Копаев. Письма в ЖЭТФ **57**, *9*, 565 (1993).
[2] Ю.А. Алещенко, И.Д. Воронова, С.П. Гришечкина, В.В. Капаев, Ю.В. Копаев, И.В. Кучеренко, В.И. Кадушкин, С.И. Фомичев. Письма в ЖЭТФ **58**, *5*, 377 (1993).
[3] О.Е. Омельяновский, В.И. Цебро, В.И. Кадушкин. Письма в ЖЭТФ **63**, *3*, 197 (1996).
[4] А.А. Горбацевич, В.В. Капаев, Ю.В. Копаев, И.В. Кучеренко, О.Е. Омельяновский, В.И. Цебро. Письма в ЖЭТФ **68**, *5*, 380 (1998).
[5] О.В. Кибис. Письма в ЖЭТФ **66**, *8*, 551 (1997).
[6] O.V. Kibis. Phys. Lett. **A237**, 292 (1998); **A244**, 574 (1998).
[7] O.V. Kibis. Physica **B256–258**, 449 (1998).
[8] O.V. Kibis. Phys. Lett. **A244**, 432 (1998).
[9] О.В. Кибис. ЖЭТФ **115**, *3*, 959 (1999).
[10] O.V. Kibis. Phys. Low-Dim. Struct. **9/10**, 143 (1999).
[11] A.G. Pogosov, M.V. Budantsev, O.V. Kibis, A. Pouydebasque, D.K. Maude, J.C. Portal. Phys. Rev. **B61**, *23*, 15 603 (2000).
[12] S. Iijima. Nature **354**, 56 (1991).
[13] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C. Eklund. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes. Academic Press Inc., San Diego (1996).
[14] А.В. Елецкий. УФН **167**, *9*, 945 (1997).
[15] L.G. Bulusheva, A.V. Okotrub, D.A. Romanov, D. Tomanek. Phys. Low-Dim. Struct. **3/4**, 107 (1998).
[16] D.A. Romanov, O.V. Kibis. Phys. Lett. **A178**, 335 (1993).
[17] О.В. Кибис, Д.А. Романов. ФТТ **37**, *1*, 127 (1995).