Плотность состояний для углеродных нанотрубок в однородном магнитном поле

© В.А. Гейлер, О.Г. Костров, В.А. Маргулис

Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева,
430000 Саранск, Россия

E-mail: geyler@mrsu.ru, kostrovog@mrsu.ru, margulis@mrsu.ru

В модели потенциалов нулевого радиуса получен явный вид законов дисперсии для углеродной нанотрубки в однородном магнитном поле. Исследована зонная структура спектра, численно изучена плотность состояний.

Работа поддержана грантами программы "Университеты России" (проект № 015.01.01.049), Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 01-02-16564), DFG (проект № 436 RUS 113 / 572) и INTAS (проект № 00-257).

В работах [1,2] для изучения зонной структуры спектра углеродной нанотрубки в присутствии магнитного поля применялось приближение сильной связи. С другой стороны, в теории конденсированных сред используется и модель потенциалов нулевого радиуса [3]; в частности, она с успехом применяется при изучении транспортных свойств квазиодномерных систем [4]. В настоящей работе с помощью этой модели изучается одноэлектронный энергетический спектр углеродных нанотрубок, находящихся в однородном магнитном поле $\mathbf{B}$, и численно исследуется плотность состояний для них. Мы рассматриваем ту же область изменения поля, что и в [1,2].

Гамильтониан указанной системы имеет вид

$$H = \frac{1}{2m_e}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + \alpha \sum_{\gamma\in\Gamma} V_\gamma, \qquad (1)$$

где $\mathbf{A} = \mathbf{B}\times\mathbf{r}/2$ — векторный потенциал поля $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, Γ — цепочка атомов нанотрубки, V_γ — потенциал конфайнмента атома, α — константа связи, определяемая длиной рассеяния l_s: $\alpha = 2\pi\hbar^2 m_e^{-1} l_s$. В выбранной калибровке

$$V_\gamma = \delta(\mathbf{r}_\gamma)\left[r_\gamma \frac{\partial}{\partial r_\gamma} + 1 - \pi i \Phi^{-1}\mathbf{B}(\mathbf{r}\times\gamma)\right],$$

где $\Phi = |e|/2\pi\hbar c$ — квант магнитного потока, а $\mathbf{r}_\gamma = \mathbf{r} - \gamma$. Функция Грина для H может быть найдена в явном виде [5]

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) = G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}',E) - \sum_{\gamma,\gamma'\in\Gamma}[Q(E)+\alpha^{-1}]^{-1}_{\gamma\gamma'} G_0(\mathbf{r},\gamma;E)G_0(\gamma',\mathbf{r}',E). \qquad (2)$$

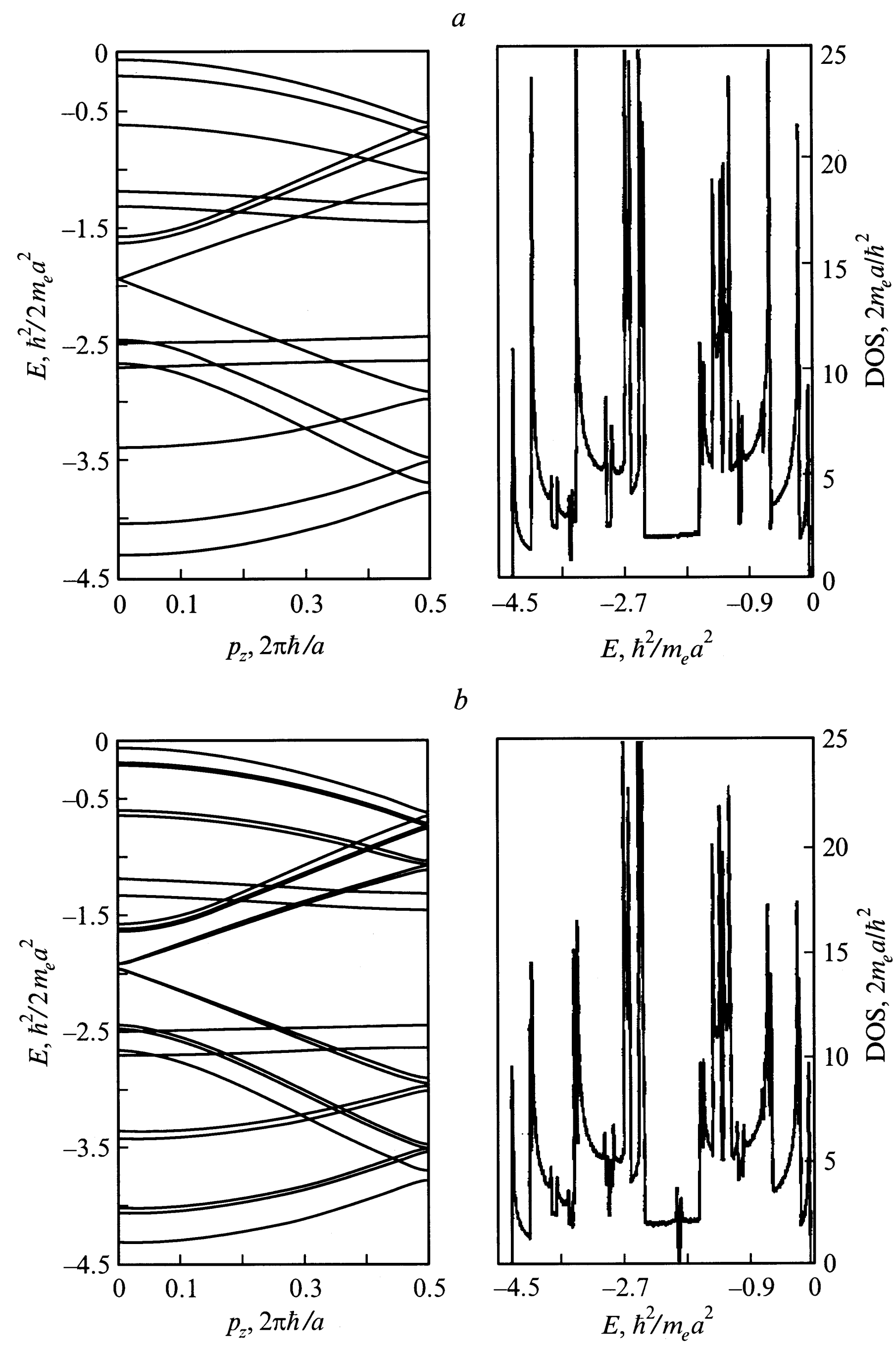
Здесь $G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}';E)$ есть функция Грина свободного электрона в магнитном поле (ее вид приведен в [5]), а $Q(E)$ — бесконечная матрица, элементы которой определяются следующим образом:

$$Q_{\gamma,\gamma'}(E) = \begin{cases} G_0(\gamma,\gamma';E), & \gamma\neq\gamma'; \\ \dfrac{m_e}{2\sqrt{2}\pi\hbar^2 l_B}\,\xi\left(\dfrac{1}{2};\dfrac{1}{2}-\dfrac{E}{\hbar\omega_c}\right), & \gamma=\gamma'. \end{cases} \qquad (3)$$

Здесь $\xi(x;s)$ — обобщенная ξ-функция Римана, l_B — магнитная длина, ω_c — циклотронная частота. Обозначим через Λ и Ω соответственно решетку Браве и элементарную ячейку для Γ; очевидно, Λ состоит из точек вида $m\mathbf{a}$, $m\in Z$.

Состояние свободного электрона в однородном магнитном поле полностью описывается тремя квантовыми числами: n — номер уровня Ландау, y_0 — ордината центра циклотронной орбиты, p_z — проекция импульса на направление поля; при этом в выбранной нами калибровке $y_0 = -cP_x/eB$, где $\hat{P}_x = \hat{p}_x + eBy/2m_e$ — калибровочно инвариантный удлиненный импульс. Для описания состояний электрона в нанотрубке необходимо наложить магнитоблоховские условия на волновую функцию, при этом следует учесть, что при сдвиге на вектор, параллельный $\mathbf{a}$, у свободного электрона сохраняется лишь линейная комбинация $a_xP_x + a_zp_z$. Далее удобно ввести безразмерный параметр $p = (2\pi\hbar)^{-1}(a_xP_x + a_zp_z)$ и обозначить $s = (2\pi\hbar)^{-1}|\mathbf{e}_x|P_x$, если $\mathbf{B}\parallel\mathbf{a}$, и $s = (2\pi\hbar)^{-1}|\mathbf{e}_z|P_x$ в противном случае. Ясно, что вместо пары чисел y_0 и p_z при описании свободного электрона можно использовать p и s. При наличии потенциала нанотрубки сдвиг на вектор $m\mathbf{a}$ из решетки Браве Λ приводит к сохранению p с точностью до целого числа. В связи с этим определим магнитную зону Бриллюэна Z_B как отрезок $[-1/2, 1/2]$, тогда для описания состояния электрона в нанотрубке вместо p необходимо использовать квазиимпульс q из Z_B и целое число j — номер магнитоблоховской зоны.

Картина спектра электрона в нанотрубке при фиксированном квазиимпульсе существенно зависит от направления поля $\mathbf{B}$, а именно: если поле и трубка параллельны, то поле полностью квантует движение в плоскости, перпендикулярной трубке, поэтому при фиксированном квазиимпульсе q спектр свободного электрона является чисто точечным и состоит из бесконечно вырожденных уровней $E_{nj}(q) = \hbar\omega_c(n+1/2) + 2\pi\hbar^2(q+j)^2/m_ea^2$ (s играет роль параметра вырождения). Если поле и трубка не параллельны, то проекция импульса свободного движения вдоль оси z на плоскость, перпендикулярную трубке, отлична от нуля. Поэтому спектр свободного электрона при фиксированном q непрерывный $E_n(s) = \hbar\omega_c(n+1/2) + 2\pi\hbar^2s^2/n_e\mathbf{e}_z^2$, не зависит от q и вырожден по j. При приложении потенциала нанотрубки



Законы дисперсии и плотность состояний структуры "зигзаг" (6,0) в случаях отсутствия (a) и наличия (b) внешнего магнитного поля (область изменения поля та же, что в [1]).

происходит расплывание уровней в манитоблоховские зоны, определяемые из дисперсионного уравнения

$$\det[\tilde{Q}(q;E) + \alpha^{-1}] = 0, \qquad (4)$$

где $\tilde{Q}(q;E)$ — конечная матрица, элементы которой индексируются точками $\varkappa$, $\varkappa'$ из Ω,

$$\tilde{Q}_{\varkappa\varkappa'}(q;E) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp[\pi iem\mathbf{B}(\varkappa \times \mathbf{a})/\hbar c] \times Q_{m\mathbf{a}+\varkappa,\varkappa'}(E)e^{-imq}. \qquad (5)$$

Из формулы (4) следует, что от каждого уровня (в случае $\mathbf{B} \parallel \mathbf{a}$) или от сплошного спектра (в противном случае) отщепляется не более N зон, где N — число точек в Ω. Поскольку при фиксированном квазиимпульсе спектр свободного электрона бесконечно вырожден, спектр возмущенного оператора H состоит из луча $[\hbar\omega_c/2, \infty)$ и конечного числа зон, лежащих ниже $\hbar\omega_c/2$; эти зоны могут перекрываться между собой и с упомянутым выше лучом. Таким образом, число лакун в спектре не превосходит N.

На рисунке для структуры "зигзаг" (6,0) показаны нижние ветви законов дисперсии, построенные путем численного решения уравнения (4), а также плотность состояний для той же области изменения энергии. Сравнение со случаем нулевого поля показывает расщепление ветвей, что обусловливает появление магнитных подзон. Это приводит к возникновению дополнительных особенностей типа Ван Хова на графике плотности состояний. Отметим, что графики для плотности состояний и законов дисперсии находятся в хорошем согласии с результатами [1,2], полученными в приближении сильной связи.

Список литературы

[1] S. Roche, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, R. Saito. Phys. Rev. **B62**, 16 092 (2000).

[2] R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. Physical properties of carbon nanotubes. ICP, London (1998). 259 p.

[3] Ю.Н. Демков, В.Н. Островский. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Изд-во ЛГУ, Л. (1975). 240 с.

[4] В.А. Гейлер, В.А. Маргулис, Л.И. Филина. ЖЭТФ **113**, 1376 (1998).

[5] S. Albeverio, V.A. Geyler, O.G. Kostrov. Rep. Math. Phys. **44**, *1*, 13 (1999).