Магнетотранспорт в углеродных нанотрубах и отрицательное магнетосопротивление. Метод матрицы плотности

© В.Э. Каминский

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,
101999 Москва, Россия

E-mail: kamin@mail.cplire.ru

В приближении малой неравновесности электронного газа найдено стационарное и линейное по электрическому полю решение кинетического уравнения для одноэлектронной матрицы плотности в произвольном магнитном поле при рассеянии на деформационном потенциале. Получено выражение для проводимости нанотрубы в виде суммы по состояниям магнитного квантования. В отсутствие магнитного поля оно совпадает с классическими. В слабых магнитных полях магнетосопротивление многослойной нанотрубы положительное при высокой подвижности электронов и отрицательное при низкой. При средних значениях оно меняет знак при увеличении напряженности поля. Магнетосопротивление однослойной нанотрубы всегда положительное.

Отрицательное магнетосопротивление (ОМС) не имеет объяснения как в рамках классического описания, так и на основе подхода [1]. Объяснение ОМС в квантовых нитях [2] и нанотрубах [3–6] опирается на теорию слабой локализации и интерференционных поправок к проводимости [7–9]. В данной работе предложено кинетическое описание ОМС. В предположении малой неравновесности решено кинетическое уравнение для одноэлектронной матрицы плотности в магнитном поле при рассеянии на деформационном потенциале и получено выражение для проводимости нанотрубы.

Из-за ограниченного объема доклада рассмотрим транспорт только в нанотрубе с большой шириной запрещенной зоны и параболическим законом дисперсии. Примем, что магнитное поле с индукцией B направлено (ось z) перпендикулярно оси нанотрубы. Для нанотрубы ток может быть рассчитан из соотношения

$$j = \mathrm{Tr}(RJ), \tag{1}$$

где $Tr(\dots)$ обозначает след оператора, R — статистический оператор, J — оператор плотности тока в магнитном поле. Свойства рассматриваемой системы в одноэлектронном приближении описывает оператор Гамильтона

$$H = H_0 + W + U = H_e + H_p + W + U, \tag{2}$$

где H_e — гамильтониан электрона в магнитном поле, H_p — гамильтониан фононов в представлении вторичного квантования, W — оператор электрон-фононного взаимодействия, $U = -qE_x x$ — оператор потенциальной энергии в электрическом поле. В представлении Шредингера статистический оператор описывается уравнением Лиувилля

$$i\hbar\frac{\partial R}{\partial t} = [HR]. \tag{3}$$

Для решения этого уравнения рассмотрим сумму $W + U$ как возмущение. Выберем вектор-потенциал магнитного поля в калибровке $A = (-By, 0, 0)$. В случае когда радиус нанотрубы $a \ll \lambda$, приближенные волновые функции (ВФ) оператора H_0 имеют вид

$$\Psi_{nl} = \exp(ikx)\frac{1}{a}\sin(k_0 lz) f_n \chi_s |N\rangle, \tag{4}$$

где

$$\lambda^2 = \frac{\hbar}{qB}, \quad g_{nr} = \frac{4nr}{\pi k_0(n^2 - r^2)^2}\left[1 - (-1)^{n-r}\right], \quad k_0 = \frac{\pi}{2a},$$

$$f_n = \sin\left(k_0 n(y + a)\right) + \frac{2k}{k_0^2\lambda^2}\sum_{r\neq n}\frac{g_{nr}}{n^2 - r^2}\sin\left(k_0 r(y + a)\right),$$

k — волновой вектор электрона вдоль оси x нанотрубы, χ_s — спиновая ВФ, $|N\rangle$ — ВФ фононов в представлении чисел заполнения. Для простоты решения труба была заменена параллелепипедом того же размера. Энергия электрона в этом случае равна

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_1}(n_1^2 + l_1^2) + \mu_{\mathrm{B}} g_s B, \tag{5}$$

где μ_{B} — магнетон Бора, g — фактор Ланде, $s = \pm\frac{1}{2}$. Поскольку операторы тока и возмущения не содержат спиновых операторов, их матричные элементы будут диагональными по спиновым переменным. Будем считать фононную систему равновесной и не квантованной. Для стационарных условий во втором порядке теории возмущений из (3) получаем

$$(E_1 - E_2)R_{12} + U_{13}R_{32} - R_{13}U_{32} + i\pi S_{12} = 0, \tag{6}$$

где S_{12} — интеграл столкновений, зависящий от элементов матрицы плотности. Обоснование метода и процедура получения приближенного уравнения (6) подробно изложены в [10]. Представим матрицу плотности в виде

$$R_{12} = F_1\delta_{12} + G_{12}\delta(k_1 - k_2), \tag{7}$$

где $G_{12} = G_{n_1 l_1, n_2 l_2}(k_1)$. Если электрическое поле не нарушает пространственной однородности электронной системы, то в качестве $F_1 = F(E_1)$ обычно берут функцию распределения Ферми–Дирака, зависящую от энергии (5) и квазиуровня Ферми. В области высоких температур и/или слабого магнитного поля это приближение является вполне удовлетворительным. Для рассеяния на деформационном потенциале, если G_{12} считать малой поправкой, решение уравнения (7) имеет вид

$$G_{12} = \frac{U_{12}(F_1 - F_2)}{E_1 - E_2 + i\hbar\nu_{12}}. \tag{8}$$

Матричные элементы тока и потенциальной энергии в базисе ВФ (4) вычисляются элементарно. Подставляя их и (8) в (1), в результате для проводимости получаем

$$\sigma = \frac{q^2}{2\pi m}\int dk\Bigg[\sum_{s,n,l}\frac{k}{\nu_{11}}\left(-\frac{\partial F}{\partial k}\right) + \frac{2\hbar}{k_0^2\lambda^4} \times \sum_{s,n_1,n_2,l_1=l_2}\frac{\hbar\nu_{12}(F_1 - F_2)}{(E_2 - E_1)^2 + (\hbar\nu_{12})^2}\frac{g^2_{n_1n_2}}{n_2^2 - n_1^2}\Bigg], \tag{9}$$

где

$$\nu_{12} = \frac{\sqrt{kT}}{2\tau_{DA}}\sum_{n_3l_3}\left[\frac{\Theta(z_{13})}{\sqrt{z_{13}}} + \frac{\Theta(z_{23})}{\sqrt{z_{23}}}\right],$$

$$z_{13} = E_1 - \frac{\hbar^2k_0^2}{2m_1}(l_3^2 + n_3^2), \quad \tau_{DA} = \frac{2\sqrt{2}\hbar^2\rho s^2}{mkTE_A^2}.$$

Первое слагаемое в (9) описывает проводимость в отсутствие магнитного поля. Как видно, в поле появляется дополнительное положительное слагаемое, пропорциональное B^2. В сильном поле зависимость будет иной. Для нанотруб с малой шириной запрещенной зоны важен учет спин-орбитального взаимодействия. Оно приводит к линейному закону дисперсии. В этом случае расчет выполняетя аналогично, хотя значительно сложнее. Магнетосопротивление линейно зависит от поля, а знак определяется параметрами спин-орбитального взаимодействия. Современные представления связывают ОМС со слабой локализацией, необходимым условием которой является неупорядоченное распределение рассеивающих центров. Полученные в данной работе результаты показывают, что поперечное ОМС может наблюдаться в электронном газе без случайного потенциала. Это является результатом последовательного учета магнитного квантования.

Список литературы

[1] E. Adams, T. Holstein. J. Phys. Chem. **10**, *4*, 254 (1959). [Э. Адамс, Т. Гольстейн. В сб.: Вопросы квантовой теории необратимых процессов. ИЛ, М. (1961). 255 с.]

[2] А.Д. Виссер, В.И. Кадушкин, В.А. Кульбачинский, В.Г. Кытин, А.П. Сеничкин, Е.Л. Шангина. Письма в ЖЭТФ **59**, *5*, 339 (1994).

[3] А.В. Елецкий. УФН **167**, 945 (1997).

[4] L. Langer, K. Bayot, E. Grivei, J.-P. Issi, J.P. Heremans, C.H. Olk, L. Stockman, C. Van Haesendonck, Y. Bruynseraede. Phys. Rev. Lett. **76**, *3*, 479 (1996).

[5] S.N. Song, X.K. Wang, R.P.H. Chang, J.B. Ketterson. Phys. Rev. Lett. **72**, *5*, 697 (1994).

[6] G. Baumgartner, M. Carrard, L. Zuppiroli, W. Basca, W.A. de Heer, L. Forro. Phys. Rev. **B65**, *11*, 6704 (1997).

[7] S. Hikami, A. Larkin, Y. Nagaoka. Prog. Theor. Phys. **63**, *2*, 707 (1980).

[8] B. Altshuler, D. Khmel'nitskii, A. Larkin, P. Lee. Phys. Rev. **B22**, *19*, 5142 (1980).

[9] Б.Л. Альтшулер, А.Г. Аронов, Д.Е. Хмельницкий, А.И. Ларкин. ЖЭТФ **81**, *9*, 768 (1981).

[10] А.И. Ахиезер, С.В. Пелетминский. Методы статистической физики. Наука, М. (1977). Гл. 3–5.