

ОБМЕННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И ОСЦИЛЛЯЦИИ НАМАГНИЧЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА В КВАНТОВОМ ЦИЛИНДРЕ

П. А. Эминов, Ю. И. Сезонов, А. В. Альперн, Н. В. Сальников*

*Московский государственный университет приборостроения и информатики
107996, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 28 марта 2006 г.

Вычислена обменная энергия электронного газа на цилиндрической поверхности в постоянном магнитном поле. Получены аналитические формулы, описывающие вклад обменного взаимодействия в осцилляции намагниченности квантового цилиндра. Показано, что магнитный отклик системы испытывает осцилляции Ааронова – Бома как в случае вырожденного, так и в случае бoльцмановского электронного газа.

PACS: 71.10.-w, 75.75.+a

1. ВВЕДЕНИЕ

Модель углеродной нанотрубки в виде свернутого в цилиндр двумерного электронного газа находит широкое применение при теоретических исследованиях физических свойств таких наноструктур, как квантовый цилиндр и квантовый браслет [1–3]. В связи с этим большое внимание уделяется изучению квантовых эффектов, индуцированных внешним электромагнитным полем не только в плоских, но и в искривленных низкоразмерных слоях электронного газа. Особый интерес традиционно представляют осцилляционные эффекты. Сюда можно отнести, например, изучение осцилляций фотопроводимости двумерного электронного газа в магнитном поле, магнитотранспортные исследования в холловской геометрии для случая двумерного электронного газа на цилиндрической поверхности и осцилляции магнитосопротивления низкоразмерных наноструктур [4].

Наряду с этим продолжается активный поиск различных механизмов управления спиновой степенью свободы подвижных носителей тока и исследование возможности спин-зависимой локализации электронов в кристаллах за счет спин-орбитального взаимодействия [5]. В частности, электронная спиновая поляризация под воздействием статического внешнего электрического поля и спин-зависимое

туннелирование электронов через барьер рассматривались в работе [6]. На возможность электронной спиновой поляризации в нанотрубках со сложной пространственной геометрией указывается в работе [7].

В настоящей работе вычислена энергия обменного взаимодействия двумерного электронного газа на цилиндрической поверхности в присутствии магнитного поля, направленного вдоль оси цилиндра. Получены явные аналитические формулы, описывающие вклад обменного взаимодействия в осцилляции намагниченности квантового цилиндра как в случае вырожденного, так и в случае бoльцмановского электронного газа. Изучена зависимость полученных результатов от характерных параметров задачи в различных предельных случаях.

2. ОБМЕННАЯ ЭНЕРГИЯ

Для энергии обменного взаимодействия электронного газа можно получить следующее представление [8–10]:

$$V = -\frac{e^2}{2} \sum_{\alpha_1 \neq \alpha_2, \sigma = \pm 1} n_F(\alpha_1, \sigma) n_F(\alpha_2, \sigma) \times \\ \times \int \psi_{\alpha_1}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \times \\ \times \psi_{\alpha_2}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (1)$$

*E-mail: pEminov@mail.ru

где суммирование проводится по всем квантовым числам α и проекциям спина σ пар электронных состояний, $\psi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1)$ и $\psi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2)$ — волновые функции стационарных состояний электронов, взятых в различных точках с радиус-векторами \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , $n_F(\alpha, \sigma)$ — число заполнения данного квантового состояния электронов, e — заряд электрона. Векторный потенциал однородного магнитного поля, направленного вдоль оси z , совпадающей с осью цилиндра, выберем в виде

$$A_x = -\frac{yH}{2}, \quad A_y = \frac{xH}{2}, \quad A_z = 0. \quad (2)$$

Тогда гамильтониан \hat{H} нерелятивистского уравнения Паули коммутирует с операторами проекции спина электрона (\hat{S}_z), проекции орбитального момента импульса (\hat{L}_z) и проекции импульса электрона (\hat{p}_z) на направление магнитного поля \mathbf{H} , параллельного оси z :

$$[\hat{H}, \hat{S}_z] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{H}, \hat{p}_z] = 0. \quad (3)$$

В результате для нормированной волновой функции и уровней энергии электрона в поле (2) получим формулы

$$\psi_{\alpha, \sigma}(\mathbf{r}) = \frac{\exp(in\varphi + ip_3z)}{\sqrt{2\pi RL}} C, \quad (4)$$

$$E(n, p_3, \sigma) = \varepsilon \left(n + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + \frac{p_3^2}{2m} + \mu_0 H \sigma. \quad (5)$$

Спиновая часть волновой функции электрона в выражении (4) имеет вид

$$C \equiv C \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad C \equiv C \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

для случаев, когда спин направлен соответственно по ($\sigma = +1$) или против ($\sigma = -1$) направления оси z . Кроме того, в формулах (4), (5) приняты следующие обозначения: m — эффективная масса электрона, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ — азимутальное квантовое число, задающее величину $L_z = n\hbar$; $\varepsilon = \hbar^2/2mR^2$ — энергия размерного квантования; $\mu_0 = |e|\hbar/2m_0c$ — магнетон Бора; $\Phi = \pi R^2 H$ — поток магнитного поля через сечение цилиндра высотой L и радиусом R , $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/|e|$ — квант магнитного потока (далее используется система единиц, где $\hbar = c = 1$). Таким образом, в формуле (1) стационарное состояние электрона задается тремя квантовыми числами, $(\alpha; \sigma) \equiv (n, p_3; \sigma)$, а химический потенциал μ идеального электронного газа связан с температурой T ,

полным количеством N электронов в газе и напряженностью магнитного поля соотношением

$$N = \frac{L}{2\pi} \sum_{\sigma=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} dp_3 \times \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\exp\left(\frac{E(n, p_3, \sigma) - \mu}{T}\right) + 1 \right]^{-1}. \quad (6)$$

Из уравнения (1) с учетом соотношений (4) и (5) находим энергию обменного взаимодействия в виде

$$V = -\frac{e^2}{2\pi L} \sum_{\alpha_1 \neq \alpha_2; \sigma = \pm 1} n_F(\alpha_1, \sigma) n_F(\alpha_2, \sigma) \times \int_0^{2\pi} e^{in\varphi} K_0\left(2pR \sin \frac{\varphi}{2}\right) d\varphi, \quad (7)$$

где $n = n_1 - n_2$, $p = |p_{1z} - p_{2z}|$, $K_0(x)$ — функция Макдональда, а суммирование проводится по квантовым состояниям $\alpha_1 = (n_1, p_{1z})$ и $\alpha_2 = (n_2, p_{2z})$. Формула (7) описывает непосредственно и вклад обменного взаимодействия в термодинамический потенциал электронного газа, который можно представить в виде

$$V = \Omega^{ex} = -\frac{\pi e^2}{2L} \times \sum_{\alpha_1 \neq \alpha_2; \sigma = \pm 1} n_F(\alpha_1, \sigma) n_F(\alpha_2, \sigma) I_n(pR) K_n(pR), \quad (8)$$

где I_n — модифицированная функция Бесселя n -го порядка, K_n — функция Макдональда n -го порядка. Таким образом, формула (8) описывает энергию обменного взаимодействия электронов на цилиндрической поверхности в продольном магнитном поле, когда длина цилиндра велика по сравнению с фермиевской длиной волны электрона. Этот результат будет ниже использован для вычисления вклада обменного взаимодействия в намагниченность квантового цилиндра,

$$m_z^{ex} = -\left(\frac{\partial \Omega^{ex}}{\partial H}\right)_{\mu, T}, \quad (9)$$

в различных предельных случаях.

3. ВЫРОЖДЕННЫЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ ГАЗ

Рассмотрим квантовые осцилляции намагниченности вырожденного газа для реальных ситуаций, когда выполняется условие

$$\mu(T=0) = \varepsilon_F \gg \varepsilon, \quad (10)$$

где ε_F — энергия Ферми. В этом случае из формул (7), (8) находим

$$\Omega^{ex} \approx -\frac{e^2 L}{8\pi^2} \sum_{n_1, n_2 = -\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 dp_2 \times \\ \times \frac{1}{\sqrt{(n_1 - n_2)^2 + R^2 p^2}} n_F(n_1, p_1) n_F(n_2, p_2), \quad (11)$$

где мы также пренебрегли зависимостью энергии электрона в функциях распределения Ферми–Дирака от спина электрона.

Осциллирующая часть намагниченности выделяется с помощью формулы суммирования Пуассона [11]

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{2\pi i n x} dx. \quad (12)$$

Введем также новые переменные интегрирования $r_{1,2}$ и $\phi_{1,2}$ вместо $x_{1,2}$ и $p_{1,2}$:

$$x_{1,2} = r_{1,2} \sin \phi_{1,2} \sqrt{2mR^2}, \\ p_{1,2} = \sqrt{2m} r_{1,2} \cos \phi_{1,2}. \quad (13)$$

В результате получим

$$m_z = C \sum_{n_1, n_2 = -\infty}^{\infty} \exp \left[-2\pi i (n_1 + n_2) \frac{\Phi}{\Phi_0} \right] \times \\ \times \int r_1 dr_1 d\phi_1 r_2 dr_2 d\phi_2 \times \\ \times \exp \left[2\pi i \sqrt{2mR^2} (n_1 r_1 \sin \phi_1 + n_2 r_2 \sin \phi_2) \right] \times \\ \times \frac{r_1 \sin \phi_1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\phi_1 - \phi_2)}} \times \\ \times \left[4 \operatorname{ch}^2 \left(\frac{r_1^2 - \mu}{2T} \right) \exp \left(\frac{r_2^2 - \mu}{T} \right) + 1 \right]^{-1}, \quad (14)$$

где

$$C = -e^2 L \frac{\mu_0}{2\pi^2} \frac{(mR)^2}{T}. \quad (15)$$

Вычислим интеграл по r_1 , считая, что наряду с (10) выполняется условие

$$\frac{\mu}{T} \gg 1. \quad (16)$$

Для этого перейдем к переменной интегрирования

$$\tau = \frac{r_1^2 - \mu}{T} \quad (17)$$

и учтем, что основной вклад в интеграл вносят только малые τ . При этом в силу неравенства (16) можно без существенной погрешности заменить нижний предел интегрирования на $-\infty$. Ограничиваясь первым членом разложения, получим

$$m_z = C \frac{T}{2} \sqrt{\mu} \sum_{n_1 \neq n_2} \exp \left[-2\pi i (n_1 + n_2) \frac{\Phi}{\Phi_0} \right] \times \\ \times \int r_2 dr_2 \sin \phi_1 d\phi_1 d\phi_2 \times \\ \times \frac{\exp \left[2\pi i n_1 \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \sin \phi_1 + 2\pi i n_2 r_2 \sqrt{2mR^2} \sin \phi_2 \right]}{\sqrt{\mu + r_2^2 - 2r_2 \sqrt{\mu} \cos(\phi_1 - \phi_2)}} \times \\ \times \left[\exp \left(\frac{r_2^2 - \mu}{T} \right) + 1 \right]^{-1}. \quad (18)$$

Оставшиеся в выражении (18) интегралы либо являются табличными, либо вычисляются методом стационарной фазы.

В результате для осциллирующей части вклада обменного взаимодействия в намагниченность квантового цилиндра получаем следующую асимптотическую формулу:

$$-\frac{m_z}{\mu_0} = \tilde{C} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n}} \times \\ \times \sin \left(2\pi n \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} - \frac{\pi}{4} \right) \sin \left(2\pi n \frac{\Phi}{\Phi_0} \right), \quad (19)$$

где

$$\tilde{C} = \frac{2}{\pi^2} \alpha m_0 L \left(\frac{\mu}{\varepsilon} \right)^{3/4}$$

и $\alpha = e^2/4\pi$ — постоянная тонкой структуры.

Здесь следует отметить, что выражение, стоящее под знаком суммы в формуле (19), является периодической функцией дробных частей параметров Φ/Φ_0 и $\sqrt{\mu/\varepsilon}$, а сама намагниченность представляет собой осциллирующую функцию магнитного потока через поперечное сечение нанотрубки.

Магнитный отклик идеального вырожденного двумерного электронного газа на цилиндрической поверхности в продольном постоянном магнитном поле вычислен в работе [1]. Например, при $\sqrt{\mu/\varepsilon} = 10.6$ и $\Phi/\Phi_0 = 0.45$ отношение вклада обменного взаимодействия в намагниченность квантового цилиндра к аналогичному результату работы [1] можно представить в виде

$$\frac{m_z^{ex}}{m_z^{id}} \approx 2\alpha R m, \quad (20)$$

где R — радиус цилиндра, m — эффективная масса электрона, причем в реальных наноструктурах $mR \gg 1$.

Таким образом, обменное взаимодействие вносит существенный вклад в намагниченность квантового цилиндра, а магнитный отклик испытывает осцилляции Ааронова–Бома при изменении магнитного потока через поперечное сечение наноструктуры.

4. БОЛЬЦМАНОВСКИЙ ГАЗ

Вычислим вклад обменного взаимодействия в термодинамический потенциал в предельном случае бoльцмановского газа, т. е. при условии

$$|\mu_e| \gg T, \quad \mu_e < 0. \quad (21)$$

В этом случае интегралы по p_1 и p_2 вычисляются с помощью замены переменных

$$\begin{aligned} p_1 - p_2 &= p, \\ p_1 + p_2 &= 2s. \end{aligned} \quad (22)$$

В итоге вычисление по формуле (7) дает

$$\begin{aligned} \Omega^{ex} &= A \sum_{n_1, n_2 = -\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} d\varphi \exp\left(2mR^2T \sin^2 \frac{\varphi}{2}\right) \times \\ &\times \exp\left[-\frac{\varepsilon}{T} \left(n_1 + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2 - \frac{\varepsilon}{T} \left(n_2 + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2\right] \times \\ &\times \exp[i(n_1 - n_2)\varphi] K_0\left(2mTR^2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}\right), \end{aligned} \quad (23)$$

где

$$A = -\frac{\alpha}{16\pi^2} (mTL) \exp\left(\frac{2\mu_e}{T}\right). \quad (24)$$

Для проведения суммирования по n_1 и n_2 воспользуемся равенством

$$\begin{aligned} \sum_{m \in \mathbb{Z}} \exp[-\pi t(m + \varphi)^2] &= \frac{1}{\sqrt{t}} \times \\ &\times \sum_{m \in \mathbb{Z}} \exp\left(-\frac{\pi m^2}{t} + 2\pi im\varphi\right) \equiv \frac{1}{\sqrt{t}} \Theta(\varphi, q), \end{aligned} \quad (25)$$

где $q = e^{-\pi/t} < 1$ и введена тэта-функция Якоби $\Theta(\varphi, q)$ [12]. С учетом выражений (25) из формулы (23) получим

$$\begin{aligned} \Omega^{ex} &= A \sqrt{\frac{2\pi T}{\varepsilon}} \times \\ &\times \Theta\left(2\frac{\Phi}{\Phi_0}, \exp\left(-\frac{2\pi^2 T}{\varepsilon}\right)\right) I\left(\frac{\varepsilon}{T}\right), \end{aligned} \quad (26)$$

где

$$\begin{aligned} I\left(\frac{\varepsilon}{T}\right) &= \int_0^{2\pi} d\varphi \Theta\left(\frac{\varphi}{2\pi}, \exp\left(-\frac{\varepsilon}{2T}\right)\right) \times \\ &\times K_0\left(\frac{T}{\varepsilon} \sin^2 \frac{\varphi}{2}\right) \exp\left(\frac{T}{\varepsilon} \sin^2 \frac{\varphi}{2}\right). \end{aligned} \quad (27)$$

Зависимость обменной энергии бoльцмановского газа от напряженности магнитного поля, как это видно из формулы (26), содержится только в тэта-функции Якоби, которая является общим множителем. Это позволяет вклад обменного взаимодействия в намагниченность квантового цилиндра в случае бoльцмановского газа представить в виде

$$\begin{aligned} m_z &= -A \sqrt{\frac{2\pi T}{\varepsilon}} \frac{2\pi R^2}{\Phi_0} \times \\ &\times \left. \frac{\partial \Theta\left(x, \exp\left(-\frac{2\pi^2 T}{\varepsilon}\right)\right)}{\partial x} \right|_{x=\frac{2\Phi}{\Phi_0}} I(\beta). \end{aligned} \quad (28)$$

Полученные результаты (27), (28) зависят от двух характерных параметров,

$$\gamma = \frac{2\Phi}{\Phi_0}, \quad \beta = \frac{\varepsilon}{T}, \quad (29)$$

причем зависимости $\Omega^{ex} = \Omega^{ex}(\gamma)$ и $m_z = m_z(\gamma)$ найдены здесь в явном аналитическом виде для всех возможных значений параметра γ , равного удвоенному значению отношения магнитного потока через поперечное сечение цилиндра к кванту магнитного потока Φ_0 .

Вычислим асимптотику функции $I(\varepsilon/T)$ в наиболее интересном случае высоких температур, когда $\beta \ll 1$, т. е. при условии

$$T \gg \varepsilon. \quad (30)$$

Для этого формулу (27) представим в виде

$$\begin{aligned} I\left(\frac{\varepsilon}{T}\right) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} d\varphi K_0\left(\frac{T}{\varepsilon} \sin^2 \frac{\varphi}{2}\right) \times \\ &\times \exp\left(\frac{T}{\varepsilon} \sin^2 \frac{\varphi}{2}\right) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{2T} n^2 + in\varphi\right) \end{aligned} \quad (31)$$

и найдем асимптотику при $\beta \rightarrow 0$ функции

$$F(\beta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(-\beta n^2 + in\varphi). \quad (32)$$

Применяя к выражению (32) формулу суммирования Пуассона и вычисляя соответствующие интегралы, получаем

$$I\left(\frac{\varepsilon}{T}\right) \approx \frac{1}{2} \sqrt{8\pi^3 \frac{\varepsilon}{T}}. \quad (33)$$

В итоге для вклада обменного взаимодействия в намагниченность квантового цилиндра в случае бoльцмановского газа в высокотемпературном пределе получаем следующий результат:

$$\frac{m_z}{\mu_0} = \alpha n_e^2 \frac{m_0}{m} L \frac{\pi}{4T} \times \exp\left(-\frac{2\pi^2 T}{\varepsilon}\right) \sin\left(4\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}\right), \quad (34)$$

где $n_e = N/L$ — концентрация электронов, приходящаяся на единицу длины цилиндра.

Существенно, что полученный результат предсказывает осцилляции намагниченности квантового цилиндра и в высокотемпературном пределе.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. А. Гейлер, В. А. Маргулис, А. В. Шорохов, ЖЭТФ **115**, 1450 (1999).
2. Н. Г. Галкин, В. А. Маргулис, А. В. Шорохов, ФТТ **44**, 466 (2002).
3. Yu. N. Ovchinnikov, W. Lehle, and A. Schmid, Ann. Phys. **6**, 489 (1997).
4. *Тезисы докладов VII Российской конференции по физике полупроводников*, Москва, Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН (2005).
5. Л. И. Магарилл, А. В. Чаплик, Письма в ЖЭТФ **81**, 198 (2005).
6. Л. И. Магарилл, А. В. Чаплик, М. В. Энтин, ФТП **35**, 1128 (2001).
7. В. В. Белов, С. Ю. Доброхотов, В. П. Маслов и др., УФН **175**, 1004 (2005).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1976).
9. А. Кабо, А. Е. Шабад, Труды ФИАН **192**, 153 (1988).
10. В. Ч. Жуковский, П. А. Эминов, Т. Л. Шония, ЖЭТФ **107**, 299 (1995).
11. М. В. Федорюк, *Асимптотика: Интегралы и ряды*, Наука, Москва (1987).
12. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 1, Наука, Москва (1973).