

КОНФЕРЕНЦИИ И СИМПОЗИУМЫ

**Объединенная научная сессия
Отделения физических наук Российской академии наук
и Объединенного физического общества Российской Федерации
"Электроны в криволинейных структурах"**

(20 апреля 2005 г.)

20 апреля 2005 г. в конференц-зале Физического института им. П.Н. Лебедева РАН состоялась Объединенная научная сессия Отделения физических наук Российской академии наук и Объединенного физического общества Российской Федерации "Электроны в криволинейных структурах". На сессии были заслушаны доклады:

1. **Магарил Л.И., Чаплик А.В., Энтин М.В.** (Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск). *Спектр и кинетика электронов в криволинейныхnanoструктурах.*

2. **Романенко А.И., Окотруб А.В.** (Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск), **Кузнецов В.Л.** (Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск), **Котосонов А.С.** (Федеральное государственное унитарное предприятие "Научно-исследовательский институт конструкционных материалов на основе графита"— НИИграфит, Москва), **Образцов А.Н.** (Московский государственный университет, Москва). *Неоднородные электронные состояния в углеродных nanoструктурах различной размерности и кривизны образующих их графеновых слоев.*

3. **Белов В.В.** (Московский государственный институт электроники и математики, Москва), **Доброхотов С.Ю.,** **Маслов В.П.,** **Тудоровский Т.Я.** (Институт проблем механики РАН, Москва). *Обобщенный адиабатический принцип для описания динамики электрона в искривленных nanoструктурах.*

Краткое содержание докладов публикуется ниже.

PACS numbers: 73.20.-r, 73.25.+i, 73.50.-h, 73.61.-r

**Спектр и кинетика электронов
в криволинейных nanoструктурах**

Л.И. Магарилл, А.В. Чаплик, М.В. Энтин

1. Введение

В последнее время быстрый технологический прогресс позволил создать различные низкоразмерные системы сложной геометрической формы [1, 2], такие как свитки, кольца, спирали, гофрировки и т.д. Это обусловило

возобновление интереса к теоретическому исследованию искривленных низкоразмерных систем.

Выходу общего вида гамильтониана искривленных низкоразмерных систем посвящено большое количество работ. Электронные состояния в искривленных низкоразмерных системах изучались как теоретически [3–6], так и экспериментально [7, 8].

Понижение размерности системы за счет ограничения движения электрона по одной или нескольким координатам приводит к поперечному квантованию состояний электронов. Если система неоднородна, то поперечные уровни начинают зависеть от продольной координаты. Такое представление адекватно, если характерный размер неоднородности велик по сравнению с толщиной слоя или квантовой проволоки. Подобное адиабатическое квантование можно применить к искривленным низкоразмерным системам. Под таковыми мы понимаем системы, локально совпадающие с соответствующими плоскими двумерными или прямолинейными одномерными. Простой (но не единственно возможной!) является ситуация "равноширирного" квантования, когда система в каждом поперечном сечении описывается одинаковым удерживающим потенциалом.

Если бы движение электрона происходило строго по поверхности или кривой линии, то его можно было бы описать с помощью соответствующего преобразования к криволинейным координатам двумерного или одномерного уравнения Шрёдингера для свободной частицы. Учет конечности толщины поверхностного слоя или квантовой проволоки существенно усложняет эффективный гамильтониан. В первую очередь, квантование поперечных состояний приводит к большим, пропорциональным $1/d^2$ вкладам в энергию. Если устремить толщину d к нулю, то эти вклады будут возрастать, в то время как кинетическая энергия продольного движения может оставаться конечной. Однако при постоянстве поперечных характеристик удерживающего потенциала и состояний вдоль поверхности, эти вклады тоже постоянны и могут быть исключены сдвиговой энергией. Наличие искривления приводит к дополнительным вкладам в энергию, которые, оставаясь, с одной стороны, малыми по сравнению с энергией квантования, оказываются сравнимыми с продольной кинетической энергией.

гией. Наиболее известным вкладом является геометрический потенциал, не зависящий от характеристики поперечного потенциала и структуры поперечного состояния. Поскольку эта величина является локальной, то она определяется только локальными геометрическими характеристиками искривленной системы. По размерности геометрический потенциал должен быть пропорционален второй степени кривизны системы.

Если продольная кинетическая энергия электрона мала по сравнению с интервалами поперечного квантования, то геометрический потенциал является основным следствием кривизны системы. Если же кинетическая энергия электрона сравнима или превышает указанные интервалы, то может проявиться влияние другого фактора: центробежное смещение электрона к внешней стороне квантовой ямы дает вклад в энергию, пропорциональный кривизне, кинетической энергии и толщине слоя.

Отличие искривленных одномерных систем от двумерных состоит в необходимости учитывать их поперечную геометрию (форму поперечного сечения). Поскольку поперечное сечение может испытывать поворот вдоль проволоки, локальный одномерный гамильтониан системы должен определяться как локальной кривизной системы, так и закрученностью проволоки вдоль ее оси. Кручение и кривизна оказывают влияние также на спиновую степень свободы, приводя к дополнительным вкладам в спин-орбитальное (СО) взаимодействие в криволинейных низкоразмерных системах. Перечисленные вопросы и составляют содержание настоящего доклада.

2. Гамильтониан искривленной поверхности

Эффективный гамильтониан для электронов на искривленной поверхности в отсутствие СО-взаимодействия выводился в работах [3, 4]. Мы обобщим подход, использованный в этих работах на случай несимметричного конфайнмента поперек слоя, исходя из уравнения Шрёдингера для электрона с квадратичным невырожденным спектром:

$$\left(-\frac{1}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) \right) \Psi = E \Psi. \quad (1)$$

Здесь и далее полагаем $\hbar = 1$; m — эффективная масса.

Пусть $\mathbf{a}(q_1, q_2)$ определяет параметрически поверхность в 3D-пространстве. Параметры q_1 и q_2 могут рассматриваться как криволинейные координаты на поверхности. Любая точка в конечном слое, окружающем поверхность, задается следующим образом:

$$\mathbf{r}(q_1, q_2, q_3) = \mathbf{a}(q_1, q_2) + q_3 \mathbf{n}, \quad |q_3| \leq \delta, \quad (2)$$

где $\mathbf{n} = \partial_1 \mathbf{a} \times \partial_2 \mathbf{a} / |\partial_1 \mathbf{a} \times \partial_2 \mathbf{a}|$ — орт нормали к поверхности, $\partial_i \equiv \partial / \partial q_i$, толщина слоя δ предполагается малой по сравнению с радиусом кривизны. Триада $\{q_1, q_2, q_3\}$ образует систему координат в 3D-пространстве.

Задача заключается в выводе эффективного гамильтониана для движения электрона вдоль поверхности. Предполагается, что дно ямы $q_3 = 0$ образует эквипотенциальную поверхность и потенциал зависит только от q_3 . Мы считаем, что характерные геометрические длины поверхности $q_3 = 0$, в частности радиусы кривизны, превышают ширину поверхностной ямы. Такая потен-

циальная яма является локально плоской, поэтому для описания состояний электрона можно воспользоваться адиабатическим приближением. Согласно этому приближению волновая функция Ψ может быть представлена в виде разложения по функциям поперечного движения в яме $\phi_n(q_3)$:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{f}} \sum_n \psi_n(q_1, q_2) \phi_n(q_3), \\ \left(\frac{\mathbf{p}_3^2}{2m} + U \right) \phi_n = E_n \phi_n, \quad (3)$$

где E_n — энергия поперечного состояния, функция $f = \sqrt{\det(G_{ij}) / \det(g_{ij})}$ определяется отношением детерминантов трехмерного G_{ij} и поверхностного g_{ij} метрических тензоров. Применяя процедуру адиабатизации, находим для эффективного гамильтониана электронов в n -й подзоне:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m} \hat{D}_0 + V_g(q_1, q_2) + \hat{H}_c, \quad \hat{H}_c = -\frac{1}{2m} (q_3)_{nn} \hat{D}_1, \quad (4)$$

где

$$\hat{D}_0 = \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i,j=1}^2 \partial_i \sqrt{g} g_{ij} \partial_j; \quad (5)$$

$$\hat{D}_1 = -\{\hat{D}_0, \text{Sp}(\hat{\beta})\} - \\ - \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_i \sqrt{g} [2(\hat{h}^{-1})_{ij} \det(\hat{\beta}) + g^{ij} \text{Sp}(\hat{\beta})] \partial_j, \quad (6)$$

$(q_3)_{nn} = \langle \phi_n | q_3 | \phi_n \rangle$, $\hat{\beta} = -(\hat{h}\hat{g}^{-1})$, $h_{ij} = h_{ji} = -\partial_i \mathbf{a} \partial_j \mathbf{n}$ — коэффициенты второй фундаментальной формы; фигурные скобки обозначают симметризацию произведения операторов.

Оператор \hat{D}_0 представляет собой чисто поверхностную часть оператора Лапласа. Другими словами, $-\hat{D}_0/2m$ — продольная часть кинетической энергии. В классическом пределе по продольному движению этот гамильтониан приводит к движению частицы по геодезическим линиям.

Геометрический потенциал V_g может быть выражен через главные кривизны поверхности $\kappa_{1,2}$ [4]:

$$V_g(q_1, q_2) = -\frac{1}{8m} [(\text{Tr } \hat{\beta})^2 - 4 \det \hat{\beta}] \equiv -\frac{\hbar^2}{8m} (\kappa_1 - \kappa_2)^2. \quad (7)$$

Как видно из (7), V_g не зависит от структуры потенциала конфайнмента. Геометрический потенциал содержит постоянную Планка и в чисто классическом приближении обращается в нуль.

Величина \hat{H}_c связана с центробежной силой — электрон, движущийся вдоль криволинейной поверхности, смещается к внешней стороне потенциальной ямы; если потенциальная яма асимметрична, то его потенциальная энергия изменяется пропорционально центробежной силе. В простейших случаях сферы и круглого цилиндра получим:

$$\hat{H}_c = -\frac{(q_3)_{nn}}{mR^3} \hat{l}^2 \quad (\text{сфера}), \quad (8)$$

$$\hat{H}_c = -\frac{(q_3)_{nn}}{mR^3} \hat{l}_z^2 \quad (\text{цилиндр}), \quad (9)$$

где $\hat{\mathbf{l}}, \hat{l}_z$ — операторы углового момента и его проекции на ось цилиндра.

Таким образом, \hat{H}_c приводит к перенормировке эффективной массы относительного порядка δ/R , где δ — среднее значение поперечной координаты (эффективная толщина слоя); для цилиндра перенормируется, естественно, только азимутальная компонента массы.

3. Гамильтониан криволинейной квантовой проволоки

Рассмотрим движение электронов с квадратичным и изотропным спектром в изогнутой и(или) скрученной квантовой проволоке. В пренебрежении толщиной такая проволока задается уравнением

$$\mathbf{r} = \mathbf{a}(q_3). \quad (10)$$

В качестве q_3 выбрана длина дуги вдоль этой кривой. Однако для учета формы проволоки такого одномерного описания мало. Если учесть конечность толщины, то уравнение (10) определяет только некоторую среднюю линию внутри проволоки, проходящую вдоль нее.

Рассматриваемую систему можно представить как однородную исходно прямолинейную проволоку с поперечным сечением произвольной формы, которую закрутили вдоль оси и(или) изогнули, причем изгиб и кручение проволоки произвольным образом зависят от q_3 . Математически проволоку можно задать как геометрическое место точек, образованное плоской фигурой при ее движении вдоль кривой, причем:

- 1) плоскость фигуры остается нормальной к кривой в точках их пересечения;
- 2) кривая пересекает фигуру в одной и той же точке фигуры.

В общем случае будем ограничивать движение электронов поперек проволоки произвольным, не обязательно жестким потенциалом $U(\mathbf{r})$. Потенциал, отвечающий нашим предположениям, должен одинаково зависеть от поперечных по отношению к кривой локальных координат в любом сечении, с точностью до поворота системы координат вокруг касательной к кривой. Выберем такую систему координат (криволинейных), в которой потенциал не зависел бы от q_3 . Введем подвижный репер кривой из касательной $\mathbf{t}(q_3) = \partial_3 \mathbf{a}$, нормали $\mathbf{n}(q_3) = -\partial_3 \mathbf{t}/|\partial_3 \mathbf{t}|$ и бинормали $\mathbf{b}(q_3) = \mathbf{t} \times \mathbf{n}$, а также связанные с ним векторы

$$\mathbf{n}_1 = \mathbf{n} \cos \phi - \mathbf{b} \sin \phi, \quad \mathbf{n}_2 = \mathbf{n} \sin \phi + \mathbf{b} \cos \phi. \quad (11)$$

Здесь $\phi(q_3)$ — угол поворота поперечного сечения вокруг \mathbf{t} . Определим новые координаты соотношением

$$\mathbf{r}(\mathbf{q}) = \mathbf{a}(q_3) + q_1 \mathbf{n}_1 + q_2 \mathbf{n}_2. \quad (12)$$

В координатах q_i поперечный потенциал имеет вид $U = U(\mathbf{q}_\perp)$, где $\mathbf{q}_\perp = (q_1, q_2)$.

Мы будем считать толщину проволоки малой по сравнению с радиусом ее кривизны. Кроме того, будем полагать малым произведение внутреннего кручения проволоки $\omega = \partial_3 \phi$ на ее толщину. Эти параметры определяют адабатичность движения электрона по проволоке: при продольном движении электроны сохраняют номер подзоны поперечного квантования.

Проведем разложение волновой функции Φ :

$$\Phi(\mathbf{q}) = \frac{1}{(G)^{1/4}} \sum_n \phi_n(\mathbf{q}_\perp) \psi_n(q_3), \quad (13)$$

по поперечным состояниям в проволоке $\phi_n(\mathbf{q}_\perp)$, которые удовлетворяют уравнению

$$\left(\frac{\hat{p}_3^2}{2\mu} + U \right) \psi_n = E_n \psi_n, \quad (14)$$

где E_n — энергия поперечного состояния в проволоке.

Рассмотрим невырожденный спектр поперечных состояний. Будем искать состояния, формирующиеся из некоторого поперечного состояния n , считая все остальные $\psi_{n'}$ при $n' \neq n$ малыми по сравнению с ψ_n . В результате находим

$$\begin{aligned} \left[\frac{\hat{p}_3^2}{2m} - \frac{\varkappa^2(q)}{8m} + \frac{1}{2m} \beta_n \zeta^2(q) + \frac{1}{m} \{ \mathbf{z} \mathbf{l}, \hat{p}_3^2 \} (\mathbf{q}_\perp)_{nn} \right] \psi_n = \\ = (E - E_n) \psi_n. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь $\beta_n = (\hat{l}_z^2)_{nn}$, $\zeta = \tau + \omega$, τ — геометрическое кручение кривой.

Второе слагаемое в квадратных скобках в (15) представляет собой известный [3, 4] геометрический потенциал, обусловленный исключительно кривизной проволоки и не зависящий от ее внутренней структуры. Третье слагаемое в квадратных скобках определяется внутренним и геометрическим кручением проволоки. Через матричный элемент от $(\hat{l}_z^2)_{nn}$ это слагаемое зависит от вида поперечного потенциала и поперечных волновых функций. И наконец, четвертое слагаемое содержит диагональный матричный элемент от поперечной координаты $(\mathbf{q}_\perp)_{nn}$. Для потенциалов $U(\mathbf{q}_\perp)$, симметричных по отношению к поворотам (в том числе, аксиально-симметричных) относительно оси 3 на углы $2\pi/N$, $N = 2, 3, \dots$, матричные элементы $(\mathbf{q}_\perp)_{nn} = 0$ для всех n . В частности, такой симметрией обладают параболические потенциалы, а также квазиволновые проволоки прямоугольного сечения с жесткими стенками.

В более общем случае квазиволновой проволоки с несимметричным потенциалом четвертое слагаемое в левой части (15) остается. Оно имеет центробежное происхождение: электрон, передвигающийся по криволинейной проволоке, прижимается центробежной силой к внешней стороне изогнутой проволоки, тем самым изменяется и его потенциальная энергия в несимметричном потенциале ямы. Этот вклад, зависящий от продольного импульса электрона, является малой добавкой к кинетической энергии и соответствует перенормировке массы.

Для круглой спирали радиусом R , шагом D и центро-симметричным сечением без внутреннего кручения ($\omega = 0$) эффективный гамильтониан имеет вид (энергия отсчитывается от дна n -й подзоны):

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_3^2}{2m} - \frac{\varkappa^2}{8m} + \frac{\beta \tau^2}{2m}, \quad (16)$$

где $\varkappa = 4\pi^2 R/(4\pi^2 R^2 + D^2)$, $|\tau| = 2\pi D/(4\pi^2 R^2 + D^2)$; для нижней подзоны в проволоке квадратного сечения $\beta = \pi^2/6 - 1$.

4. Спин-орбитальное взаимодействие

4.1. Двумерный случай (искривленная квантовая яма). Исходный оператор СО-взаимодействия во введенных выше координатах $q_{1,2,3}$ записывается в виде:

$$\hat{H}_{\text{so}} = i\alpha \frac{1}{\sqrt{G}} (\partial_3 U) \epsilon^{ij} (\sigma(\partial_i \mathbf{r})) \partial_j, \quad (17)$$

где ϵ^{ij} — символ Леви-Чивита, $\epsilon^{11} = \epsilon^{22} = 0$, $\epsilon^{12} = -\epsilon^{21} = 1$, α — константа СО-взаимодействия в объемном материале.

Будем искать эффективный двумерный СО-гамильтониан, используя малость параметра δ/R . Результат довольно громоздких вычислений приводит к следующему выводу. Оператор СО-взаимодействия содержит два вклада, пропорциональные соответственно поперечной T_n и продольной L_n кинетическим энергиям частицы в данной подзоне. Первый вклад происходит от градиента (поперек слоя) тангенциальных к слою скоростей электронов, тогда как второй есть следствие центростремительной силы, заворачивающей частицу вдоль изогнутой поверхности (преобразованная к подвижной системе эта сила дает добавку к эффективному магнитному полю). При малой по сравнению с радиусом кривизны длине волны продольного движения поверхность можно считать локально плоской. В этом случае из (17) следует:

$$\hat{H}_{\text{so}} = -2\alpha [T_n(\sigma_x \hat{p}_y \chi_y - \sigma_y \hat{p}_x \chi_x) - \frac{1}{2m} (\chi_x \hat{p}_x^2 + \chi_y \hat{p}_y^2)(\sigma_x \hat{p}_y - \sigma_y \hat{p}_x)]. \quad (18)$$

В качестве примера приведем результат для электронного спектра на цилиндрической поверхности радиусом R :

$$\varepsilon_{np_z j_z} = \frac{1}{2mR^2} \left\{ k^2 + j_z^2 + \frac{1}{4} - \frac{\bar{\alpha}}{2} \left(\frac{1}{4} + 3j_z^2 - t_n \right) \pm \sqrt{j_z^2 \left[1 + \bar{\alpha}t_n - \bar{\alpha} \left(j_z^2 + \frac{3}{4} \right) \right]^2 + \bar{\alpha}^2 k^2 \left(j_z^2 + \frac{1}{4} \right)^2} \right\}. \quad (19)$$

Здесь $\bar{\alpha} = 2\alpha/R^2$, $t_n = 2mR^2 T_n$, $k = p_z R$; p_z и j_z — импульс вдоль и момент относительно оси цилиндра соответственно.

4.2. Одномерный случай

(квантовая проволока с изгибом и кручением)

В q -координатах (см. раздел 3) имеем

$$\mathcal{H}_{\text{so}} = \alpha \epsilon^{ijk} \frac{1}{G^{1/4}} \bar{\sigma}_j (\partial_k U) \hat{p}_i \frac{1}{G^{1/4}}, \quad \bar{\sigma}_j = (\partial_j r_i) \sigma_i. \quad (20)$$

Разлагаем это выражение по степеням $q_{1,2}$ и усредняем по функциям поперечного движения n -й подзоны. В общем случае усредненный СО-гамильтониан линеен по продольному импульсу и содержит вклады, пропорциональные как кривизне, так и кручению проволоки. Вклад кручения исчезает, если $U(\mathbf{q}_\perp)$ обладает центром симметрии. Так, для круглой спирали радиусом R с постоянным шагом D , образованной проволокой круглого сечения, получим закон дисперсии:

$$\varepsilon_n^\pm - \varepsilon_{\min}^{(n)} = \frac{1}{2m} \left[p^2 \pm |p| \sqrt{4(m \varkappa E_n)^2 + 4(m \varkappa E_n) \varkappa + \frac{\varkappa}{R}} \right], \quad (21)$$

где $\varepsilon_{\min}^{(n)}$ — постоянный сдвиг n -й подзоны, зависящий от кривизны и кручения спирали.

5. Возможные применения

Рассмотрим изогнутую квантовую проволоку (то же самое относится, очевидно, и к квантовой яме в форме цилиндрической поверхности). Пусть она имеет вид сопряжения двух прямых с дугой окружности ("открытая книга") (рис. 1). Геометрический потенциал такой структуры изображается прямоугольной ямой глубиной $1/8mR^2$ и шириной $R\theta$, где R — радиус окружности, θ — угол между прямыми ($\theta \leq \pi$). В такой яме имеется одно и только одно связанное состояние. При $m = 0,07m_0$ (GaAs), $R = 100 \text{ \AA}$, $\theta = \pi$ энергия связи W_0 составляет примерно 4 К; для $\theta = \pi/2$ $W_0 \approx 3$ К. Поскольку геометрический потенциал является ямой также и для дырок, можно ожидать конденсации экситонов в области изгиба проволоки. В данном случае мы имеем дело с бозе-частицами, спектр которых помимо континуальной части с положительной энергией содержит один отрицательный уровень. При превышении некоторого критического значения концентрации экситонов, зависящего от температуры, частицы начнут накапливаться в связанном состоянии. Для указанных выше параметров критическая концентрация составляет порядка 10^5 см^{-3} при $T = 1$ К.

Для проволоки в форме кривой с одной точкой максимальной кривизны $q_3 = q_0$ (парабола, гипербола) при условии $a^* \ll R$, где a^* — эффективный радиус экситона, потенциал можно считать квадратичным по малым отклонениям $(q_3 - q_0)^2$. Поскольку $V_g \propto 1/m$, внутреннее движение в экситоне и движение его центра тяжести разделяются при равных массах электрона и дырки $m_e = m_h$. В этом гипотетическом случае вероятность образования экситона P зависит от квантового числа N осциллятора, описывающего движение центра масс:

$$P_{2N} \propto \frac{(2N)!}{2^{2N}(N!)^2}, \quad P_{2N+1} \equiv 0, \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (22)$$

Таким образом, линия экситонного поглощения (и люминесценции) приобретает своеобразную тонкую структуру, масштаб которой порядка $1/mR^2$. При неравенстве масс $m_e \neq m_h$ разделение степеней свободы невозможно, и спектр усложняется, хотя его тонкая структура сохраняется (в случае прямой проволоки или плоской квантовой ямы присутствовала бы лишь оди-

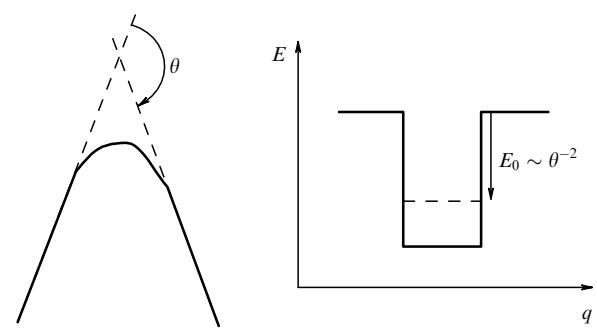


Рис. 1. Одиночная квантовая яма в изогнутой проволоке.

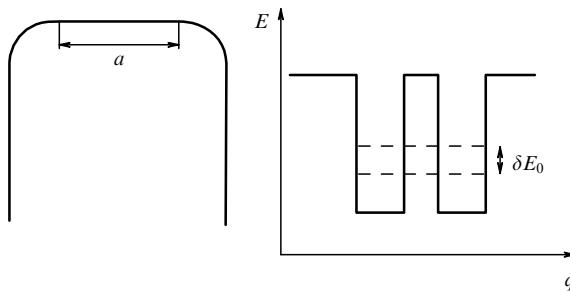


Рис. 2. Двухуровневая система в Π-элементе.

ночная линия, отвечающая нулевому полному импульсу экситона).

Далее рассмотрим так называемый Π-элемент (рис. 2). Ему отвечают две идентичные потенциальные ямы на расстоянии a друг от друга. Резонансное расщепление уровней дает двухуровневую систему, все характерные параметры которой регулируются в процессе ее изготовления (механический кубит). Цепочка Π-элементов типа меандра (рис. 3) является соединением кубитов, связь между которыми может осуществляться, например, через обмен фононами поверхностной акустической волны (ПАВ) подходящей частоты. Прикладывая механические усилия к подложке, на которой находится проволока, можно деформировать определенные звенья меандра, что приведет к сдвигу уровней в ямах и даст возможность подстраивать элементы цепи в резонанс с ПАВ или выводить их из резонанса. Очевидно, возможно также образование трехмерных структур механических кубитов.

Еще один вариант связи механических и электронных степеней свободы представлен на рис. 4. Это механический электронный интерферометр. Изгибая одно из его плеч, мы создаем в нем геометрический потенциал, который приводит к сдвигу фазы волновой функции электронов, проходящих через изогнутое плечно. Этот

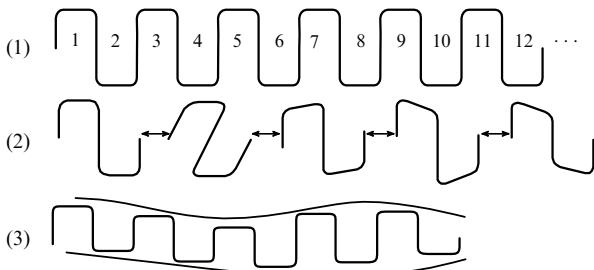


Рис. 3. Цепочка кубитов (меандр).

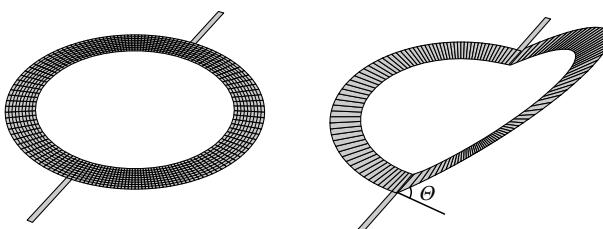


Рис. 4. Механический электронный интерферометр.

сдвиг $\Delta\Phi$ можно оценить при $k_F R \gg 1$ как $\Delta\Phi \sim \theta/8k_F R$, где θ — угол изгиба, k_F — фермиевское волновое число электрона. В противоположном пределе $k_F R \ll 1$ результат совсем прост: $\Delta\Phi = \theta/2$.

В заключение рассмотрим пример системы 2D-электронов на поверхности с двумя существенно различными главными кривизнами. Речь идет об изогнутой нанотрубке (НТ). Вводя в качестве координат длину дуги оси НТ s и азимутальный угол в плоскости ее сечения φ , получим гамильтониан в виде

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m} \left[\frac{1}{ah} \frac{\partial}{\partial\varphi} \left(\frac{h}{a} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) + \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial s} \right) \right] - \frac{1}{8m} \left[\frac{1}{a} - \frac{\cos\varphi}{R(s) + a\cos\varphi} \right]^2; \quad h = 1 + \frac{a\cos\varphi}{R(s)}. \quad (23)$$

Здесь a — радиус НТ, $R(s)$ — радиус кривизны ее оси в точке s .

Изгиб НТ снимает вырождение уровней энергии по знаку M — азимутального квантового числа. Ситуация аналогична Λ -удвоению в спектре двухатомных молекул: расщепление состояний $\pm M$ достигается в $2M$ -м порядке теории возмущений. Малым параметром служит отношение a/R . Апроксимируя изогнутую НТ дугой тора длиной L , получаем для $M = \pm 1$:

$$|E_{+1,n} - E_{-1,n}| = \frac{1}{2mR^2} \left(Q_k^4 a^4 + \frac{3}{4} Q_k^2 a^2 - \frac{3}{16} \right), \quad (24)$$

где $Q_k = k\pi/L$, $k = 1, 2, \dots$. Соответственно расщепляется линия межзонного или внутризонного оптического перехода, в котором участвует подзона $|M| = 1$.

Вторым следствием изгиба НТ является изменение ее баллистического кондактанса, так как область изгиба действует как рассеиватель электронов. Точнее, коэффициент прохождения в изогнутой НТ отличается от единицы даже в отсутствие примесей и дефектов. Будем считать НТ асимптотически прямолинейной, т.е. $R(s) \rightarrow \infty$ при $s \rightarrow \pm\infty$, и пусть, кроме того, $dR/ds \ll 1$, т.е. изгиб достаточно плавный. Это дает возможность применить адиабатическое приближение, в котором φ является быстрой переменной, а s — медленной. Волновая функция ищется в виде разложения $\sum c_i(s) \chi_i(\varphi, s)$, где χ_i — мгновенные собственные функции гамильтониана (23), в котором s рассматривается как параметр. Интересной особенностью этой задачи является зависимость коэффициента при медленной части гамильтониана НТ (с производными d/ds) от быстрой переменной: h зависит от φ . Поэтому даже в нулевом адиабатическом приближении ($\partial\chi_i/\partial s = \partial^2\chi_i/\partial s^2 = 0$) система уравнений для медленных амплитуд $c_i(s)$ не расщепляется, как это обычно имеет место в других адиабатических задачах. Фактически эффективная масса в данном случае становится матрицей (зависящей, разумеется, от s):

$$-\frac{1}{2} \sum_j \left\langle \frac{1}{m} \right\rangle_{ij} \frac{\partial^2 c_j}{\partial s^2} + \epsilon_i(s) c_i(s) = E c_i(s), \\ \left\langle \frac{1}{m} \right\rangle_{ij} = \frac{1}{m} \int \chi_i^* h^{-2}(\varphi, s) \chi_j d\varphi, \quad (25)$$

где $\epsilon_i(s)$ — мгновенные термы. Таким образом, изгиб вызывает не только отражение электронных волн, но и межподзонные переходы при сохраняющейся энергии.

В идеальной прямой НТ коэффициент прохождения при любом значении энергии, превышающем уровень дна подзоны, равен единице, и зависимость продольного кондактанса от уровня Ферми $G(E_F)$ дается известной ступенчатой функцией с разрывами в точках границ подзон $E = BM^2$, $B = 1/2ma^2$ — вращательный квант.

Анализ уравнений (25) приводит к следующим выводам. При $E_F < B$ (заселена только подзона $M = 0$) коэффициент прохождения $T(E) = E/(E + C)$, где C зависит от формы изгиба, но не от энергии частицы. Таким образом, проводимость $G(E_F)$ при малых E_F "включается" по линейному закону. Следующие ступеньки в $G(E_F)$ размываются по закону $\sqrt{E_F - BM^2}$, ($|M| = 1, 2, \dots$), что соответствует прохождению над потенциальной стенкой при малом превышении энергии (медленная частица в конечном состоянии). Этот вклад происходит от межподзонных переходов и является основным в пороговой области $0 < E_F - BM^2 \ll aB/R$.

Настоящий доклад основан на публикациях [9–13].

Работа была поддержана грантом РФФИ № 05-02-16939, Программой поддержки научных школ РФ НШ-593.2003.2, а также программами РАН и Министерства науки и технологий РФ.

Список литературы

1. Prinz V Ya et al. *Physica E* **6** 828 (2000); *Nanotechnology* **12** 399 (2001)
2. Schmidt O G, Eberl K *Nature* **410** 168 (2001)
3. Jensen H, Koppe H *Ann. Phys. (New York)* **63** 586 (1971)
4. da Costa R C T *Phys. Rev. A* **23** 1982 (1981)
5. Ogawa N, Fujii K, Kobushukin A *Prog. Theor. Phys.* **83** 894 (1990)
6. Магарилл Л И, Романов Д А, Чаплик А В *ЖЭТФ* **110** 669 (1996); **113** 1411 (1998); Магарилл Л И, Чаплик А В *ЖЭТФ* **115** 1478 (1999)
7. Leadbeater M L et al. *J. Phys.: Condens. Matter* **7** L307 (1995); *Phys. Rev. B* **52** R8629 (1995)
8. Быков А А и др. *Письма в ЖЭТФ* **74** 182 (2001)
9. Entin M V, Magarill L I *Phys. Rev. B* **64** 085330 (2001)
10. Entin M V, Magarill L I *Phys. Rev. B* **66** 205308 (2002)
11. Магарилл Л И, Энтин М В *ЖЭТФ* **123** 867 (2003)
12. Chaplik A V, Blick R H *New J. Phys.* **6** 33 (2004)
13. Chaplik A V *Письма в ЖЭТФ* **80** 140 (2004)

PACS numbers: 72.15.Gd, 72.15.Rn, 73.63.-b, 73.63.Bd, 73.63.Fg

Неоднородные электронные состояния в углеродныхnanoструктурах различной размерности и кривизны образующих их графеновых слоев

А.И. Романенко, А.В. Окотруб, В.Л. Кузнецов, А.С. Котосонов, А.Н. Образцов

1. Введение

Образование каркасных углеродных nanoструктур всегда сопровождается искривлением образующих их графеновых слоев. В результате возникают новые свойства, не характерные для графита, состоящего из плоских графеновых слоев. Наиболее яркое проявление искривления графеновых слоев — наличие сверхпроводящего состояния в пучках однослойных углеродных нанотрубок с диаметром 10 Å (радиус кривизны $r = 5$ Å) при температуре $T_c \sim 1$ K [1] и сверхпроводимость при $T_c = 16$ K в

нанотрубках диаметром 4 Å ($r = 2$ Å) [2], тогда как в графите сверхпроводящего перехода не наблюдается. Хотя в работах Ю. Копелевича с соавторами [3] утверждается, что в идеальном графите сверхпроводимость должна проявляться, а ее отсутствие в реальных образцах связано с дефектами, всегда присутствующими в графите. Мы полагаем, что сверхпроводящее состояние в углеродных каркасных nanoструктурах связано с кривизной образующих их графеновых слоев.

Кроме того, в кристаллической структуре нанокристаллитов (например в нанолуковицах) присутствуют не только криволинейные поверхности, но и одномерные нити различной длины и кривизны [4]. В результате такие структуры зачастую имеют пониженную размерность движения носителей тока.

Настоящий доклад посвящен экспериментальному определению константы электрон-электронного взаимодействия λ_c в углеродных nanoструктурах на основе криволинейных графеновых слоев, а также особенностям движения носителей тока в системах, состоящих из криволинейных поверхностей и одномерных нитей.

2. Методы исследования

В наших исследованиях константы электрон-электронного взаимодействия основным методом являлся совместный анализ квантовых поправок к электропроводности, магнетопроводности и магнитной восприимчивости изучаемых объектов. Для всех каркасных nanoструктур на основе графеновых слоев характерно наличие структурных дефектов, приводящих к диффузному движению носителей тока при низких температурах. В результате этого при достаточно низкой температуре в них наблюдаются квантовые поправки к электронным кинетическим и термодинамическим величинам, связанные с квантовой интерференцией. Для одночастичных процессов (эффекты локализации — ЭЛ [5, 6]) — это интерференция волновой функции электрона на замкнутых траекториях с противоположными направлениями обхода этих траекторий (для траекторий длиной l , меньшей длины сбоя фазы $L_\phi(T) = (D\tau_\phi)^{1/2}$, где D — коэффициент диффузии, τ_ϕ — время сбоя фазы). В результате полная проводимость системы уменьшается: $L_\phi(T)$ с понижением температуры увеличивается, что ведет к уменьшению полной проводимости с понижением температуры.

В магнитном поле появляются дополнительные набеги фазы разных знаков для различных направлений обхода замкнутой траектории. В результате интерференция подавляется при условии $L_B = (\hbar c/2eB)^{1/2} < L_\phi$, что приводит к отрицательному магнетосопротивлению (ОМС) — возрастанию проводимости в магнитном поле. Квантовые поправки возникают и при учете взаимодействия между электронами (эффекты взаимодействия — ЭВ [7]). В этом случае при повторной встрече и взаимодействии двух электронов на расстояниях, меньших длины интерференции $L_{\text{вз}} = (D\hbar/k_B T)^{1/2}$ ($L_{\text{вз}}$ — длина, при которой информация об изменении фаз электронов за счет предыдущего взаимодействия еще не потеряна), повторное взаимодействие будет зависеть от предыдущего. В результате эффективная плотность состояний на поверхности Ферми ν_F оказывается перенормированной. Эффекты взаимодействия дают вклад не только в электропроводность, но и в термодинамиче-