

PACS 73.20.-r, 73.25.+i, 73.50.-h, 73.61.r  
УДК 530.1

## Химический потенциал бальцмановского электронного газа на поверхности квантового «браслета» в магнитном поле

А.М. Ермолаев, С.В. Кофанов

*Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина,  
Украина, 61077, г. Харьков, пл. Свободы 4  
E-mail: Stanislav\_SS@mail.ru*

В приближении эффективной массы рассчитан химический потенциал бальцмановского электронного газа на поверхности полупроводникового «браслета» в магнитном поле. Численные расчеты выполнены для параметров арсенида галлия.

**Ключевые слова:** квантовый «браслет», электронный газ, химический потенциал, Ааронов – Бом.

У наближенні ефективної маси розрахований хімічний потенціал бальцманівського електронного газу на поверхні напівпровідникового «браслету» у магнітному полі. Числові розрахунки виконані для параметрів арсеніду галію.

**Ключові слова:** квантовий «браслет», електронний газ, хімічний потенціал, Ааронов – Бом.

The chemical potential of Boltzmann electron gas on the semiconductor “bracelet” surface in a magnetic field was calculated according to the electron effective mass approximation. The numeric calculations were made for the gallium arsenide parameters.

**Keywords:** quantum “bracelet”, electron gas, chemical potential, Aaronov – Bom.

### Введение

Интерес к таким электронным наносистемам на кривых поверхностях, как углеродные и полупроводниковые нанотрубки [1 – 3], квантовые «браслеты» [4,5], не ослабевает. Это связано с потребностями техники, с появившимися возможностями создавать такие системы в лабораториях, с появлением новых параметров в теории таких систем, позволяющих расширить спектр возможностей управлять их свойствами.

Квантовым «браслетом» называется нанотрубка, высота которой сравнима с длиной волны де Бройля фермиевского электрона [4,5]. Конечная длина «браслета» означает, что квантуется не только круговое движение электрона на поверхности «браслета», но и продольное движение. Особый интерес представляют свойства «браслета» в магнитном поле, когда становятся существенными эффекты гибридизации размерного и магнитного квантования движения электронов.

В работе [5] рассмотрен магнитный отклик вырожденного электронного газа на поверхности «браслета». Между тем, в случае полупроводникового «браслета», интерес представляют и свойства бальцмановского электронного газа на его поверхности. Здесь мы приводим результаты вычислений плотности состояний и химического потенциала невырожденного электронного газа на поверхности «браслета». Предполагаем, что «затравочный» спектр энергии электронов параболический, а магнитное поле  $\mathbf{H}$  направлено вдоль оси «браслета»  $z$ .

### Состояния и спектр энергии электрона на поверхности «браслета»

Волновая функция  $\Psi$  стационарного состояния электрона на поверхности «браслета» удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\hat{H}\Psi = \varepsilon\Psi, \quad (1)$$

где  $\hat{H}$  – гамильтониан электрона, а  $\varepsilon$  – его энергия. В магнитном поле с векторным потенциалом  $\mathbf{A}$  гамильтониан равен [6]

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_*} \left( -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2. \quad (2)$$

Здесь  $m_*$  и  $e$  – эффективная масса и заряд электрона,  $c$  – скорость света,  $\hbar$  – квантовая постоянная.

Векторный потенциал запишем в аксиальной калибровке [6]

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{H}\mathbf{r}].$$

Тогда гамильтониан (2) в цилиндрических координатах  $\rho = a$ ,  $\varphi$ ,  $z$  принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_*} \left( \frac{1}{a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - i \frac{\hbar \omega_c}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{8} m_* \omega_c^2 a^2. \quad (3)$$

Здесь  $a$  – радиус «браслета»,  $\omega_c = |e|H / m_*c$  – циклотронная частота электрона.

Волновая функция электрона  $\Psi(\varphi, z)$  должна удовлетворять граничным условиям:

$$\Psi(\varphi + 2\pi, z) = \Psi(\varphi, z), \quad \Psi\left(\varphi, \pm \frac{L}{2}\right) = 0, \quad (4)$$

где  $L$  – длина «браслета». Учитывая (3) и (4), получаем решение уравнения (1) в виде

$$\Psi_{mn}(\varphi, z) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi a}} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left[\frac{\pi n}{L}\left(z + \frac{L}{2}\right)\right]. \quad (5)$$

Здесь  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$  – азимутальное квантовое число электрона,  $n = 1, 2, \dots$  – номер стоячей волны на длине «браслета». Функция (5) нормирована условием

$$\int d^2r |\Psi_{mn}|^2 = 1,$$

где  $d^2r = ad\varphi dz$  – элемент площади поверхности «браслета».

Энергия электрона в состоянии  $|mn\rangle$  оказывается равной

$$\varepsilon_{mn\sigma} = \varepsilon_0 \left( m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + \varepsilon_1 n^2 + \sigma \mu_B H, \quad (6)$$

где  $\varepsilon_0 = \hbar^2 / 2m_*a^2$  – вращательный квант,

$\varepsilon_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2m_*L^2$ ,  $\Phi = \pi a^2 H$  – магнитный поток

через сечение «браслета»,  $\Phi_0 = 2\pi c \hbar / |e|$  – квант

потока,  $\sigma = \pm 1$  – спиновое квантовое число,  $\mu_B$  –

спиновый магнитный момент электрона. В (6) мы учли также энергию электронного спина в магнитном поле. Из формулы (6) видно, что энергия кругового движения электрона с изменением направления вектора  $\mathbf{H}$  не меняется, если одновременно изменяется знак  $m$ . Нижняя граница спектра (6) равна

$$\varepsilon_{min} = \varepsilon_1 - \mu_B H.$$

Она достигается при

$$m = -[\Phi / \Phi_0], \quad n = 1, \quad \sigma = -1.$$

Одноэлектронная плотность состояний равна (см., например, [7])

$$\nu(\varepsilon) = \sum_{mn\sigma} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{mn\sigma}). \quad (7)$$

Она представляет собой систему дельта-образных пиков на дискретных уровнях (6).

### Химический потенциал электронного газа

Предположим, что число  $N$  электронов проводимости на поверхности «браслета» фиксировано. Тогда химический потенциал  $\mu$  электронного газа может быть найден из уравнения [8]

$$N = \int_{\varepsilon_{min}}^{\infty} \nu(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (8)$$

где  $f(\varepsilon)$  – функция распределения электронов.

Подставляя сюда (7), получаем уравнение

$$N = \sum_{mn\sigma} f(\varepsilon_{mn\sigma}), \quad (9)$$

справедливое при любой температуре.

Предположим, что температура  $T$  электронного газа удовлетворяет условию  $k_B T \gg \varepsilon_F$ , где  $\varepsilon_F$  –

энергия Ферми,  $k_B$  – постоянная Больцмана. Тогда  $f$  в уравнении (9) можно заменить функцией распределения Максвелла – Больцмана:

$$f(\varepsilon) = \exp[\beta(\mu - \varepsilon)], \quad (10)$$

где  $\beta = 1 / k_B T$ . Подставляя (10) в (9), получаем

$$N = e^{\beta\mu} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_m} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_n} \sum_{\sigma=-1}^{+1} e^{-\beta\varepsilon_\sigma}. \quad (11)$$

Здесь мы записали энергию (6) в виде

$$\varepsilon_{mn\sigma} = \varepsilon_m + \varepsilon_n + \varepsilon_\sigma. \text{ Входящая в (11) сумма } \sum_{\sigma}$$

равна

$$\sum_{\sigma=-1}^{+1} e^{-\beta\sigma\mu_B H} = 2 \operatorname{ch}(\beta\mu_B H). \quad (12)$$

Сумму  $\sum_{mn}$  удобно преобразовать при помощи

формулы [9]:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-x(m+\nu)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{x}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 l^2}{x}} \cos(2\pi l\nu), \quad x > 0. \quad (13)$$

Входящая сюда сумма  $\sum_l$  при  $\nu = 0$  имеет

асимптотики:

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{-xl^2} = \begin{cases} \sqrt{\pi/x} (1 + 2e^{-\pi^2/x}), & x \rightarrow 0, \\ 1 + 2e^{-x}, & x \rightarrow \infty. \end{cases}$$

Учитывая (13), получаем:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_0(m+\Phi/\Phi_0)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\beta\varepsilon_0}} \left( 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 l^2}{\beta\varepsilon_0}} \cos\left(2\pi l \frac{\Phi}{\Phi_0}\right) \right), \quad (14)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_1 n^2} = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{\pi}{\beta\varepsilon_1}} \sum_{l'=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 l'^2}{\beta\varepsilon_1}} - 1 \right). \quad (15)$$

Подставляя (12), (14), (15) в уравнение (11), находим точное выражение для химического потенциала:

$$\mu = k_B T \ln \frac{\left(\frac{\varepsilon_0}{k_B T}\right) (an) \operatorname{ch}^{-1}\left(\frac{\mu_B H}{k_B T}\right)}{\left(1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} e^{-\pi^2 l^2 \frac{k_B T}{\varepsilon_0}} \cos 2\pi l \frac{\Phi}{\Phi_0}\right) \left(1 + 2 \sum_{l'=1}^{\infty} e^{-\pi^2 l'^2 \frac{k_B T}{\varepsilon_1}} - \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0}} \frac{\varepsilon_0}{\pi k_B T}\right)}, \quad (16)$$

где  $n = N/L$  – линейная плотность электронов на поверхности «браслета».

#### 4. Численные результаты для GaAs

Из формулы (16) видно, что отношение  $\mu/\varepsilon_0$ , как функция безразмерной температуры  $k_B T/\varepsilon_0$ , определяется параметрами  $an$ ,  $\mu_B H/\varepsilon_0$ ,  $\Phi/\Phi_0$ ,  $\varepsilon_0/\varepsilon_1$ . На рис.1 показана температурная зависимость химического потенциала (16) при значениях параметров  $an = 1$ ,  $\mu_B H/\varepsilon_0 = 10^{-2}$ ,  $\Phi/\Phi_0 = 1$ ,  $\varepsilon_0/\varepsilon_1 = 10$ , типичных для полупроводниковых структур типа GaAs в полях  $H \sim 10^4$  Э.

На рис.2 приведена зависимость химического потенциала от плотности электронов при указанных выше параметрах и  $k_B T/\varepsilon_0 = 2$ .

Из формулы (16) видно, что с изменением напряженности магнитного поля химический потенциал испытывает осцилляции Ааронова-Бома. Период первой гармоники  $l = 1$ , как функции магнитного потока  $\Phi$ , равен кванту потока  $\Phi_0$ ,

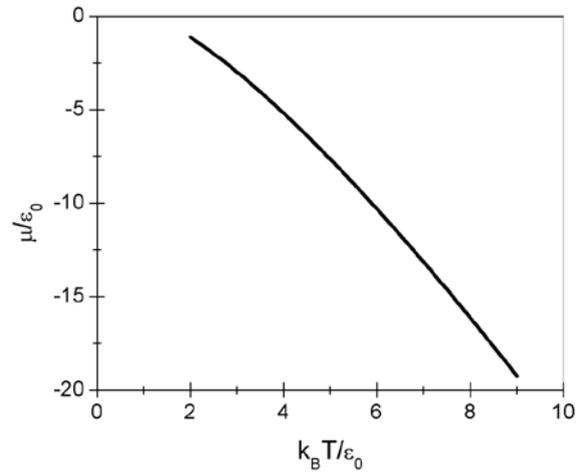


Рис. 1. Температурная зависимость химического потенциала при значениях параметров, указанных в тексте.

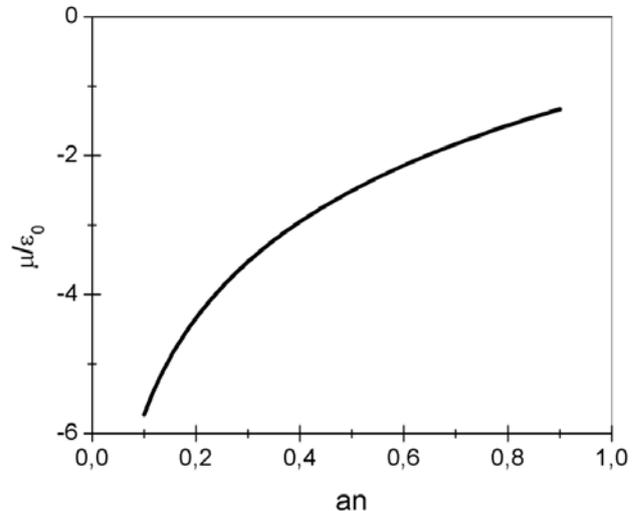


Рис. 2. Зависимость химического потенциала от плотности электронов.

Амплитуда этих осцилляций экспоненциально убывает с ростом температуры. В рассматриваемой здесь области температур при указанных выше значениях параметров эти осцилляции не видны. Химический потенциал монотонно зависит от магнитного поля за счет спинового множителя  $\operatorname{ch}(\beta\mu_B H)$ . Эта зависимость показана на рис.3 для приведенных выше значений параметров.

#### Заключение

Физика твердого тела постепенно превращается в нанofизика. Растет интерес к таким наносистемам, как двумерный электронный газ, углеродные и полупроводниковые нанотрубки, кольца и «браслеты». Квантовый «браслет» интересен потому, что энергетический спектр электронов на его поверхности дискретный. Квантование энергии обусловлено ограниченными размерами системы. Магнитное поле,

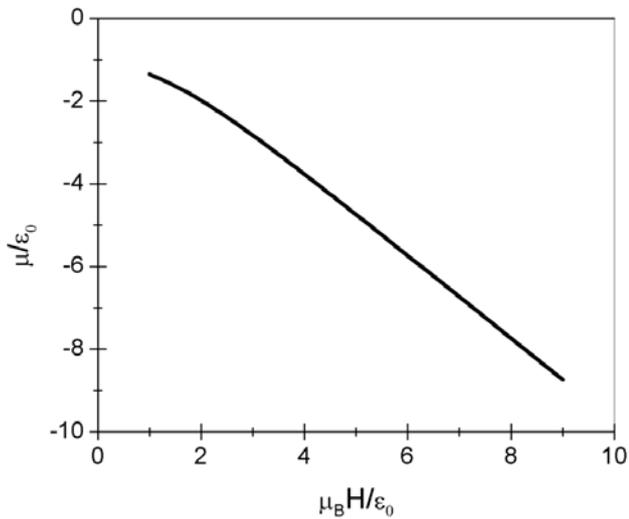


Рис. 3. Зависимость химического потенциала (16) от напряженности магнитного поля.

параллельное оси «браслета», приводит к дальнейшему ограничению свободы перемещения электронов. Число способов управлять свойствами электронного газа на поверхности «браслета» возрастает.

Среди термодинамических величин, характеризующих электронный газ, химический потенциал занимает особое место. Его роль важна не только в термодинамике, но и при изучении других свойств системы. Здесь рассчитан химический потенциал бальцмановского электронного газа на поверхности «браслета». В безразмерных единицах он зависит от пяти параметров. Приведены зависимости химпотенциала от тех значений параметров, которые характерны для полупроводникового соединения *GaAs*. Результаты могут быть использованы при изучении рассеяния электромагнитных волн и электронов квантовым «браслетом».

1. S. Iijima, Nature 354, 56 (1991).
2. R. Saito, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus, Physical Properties of Carbon Nanotubes, Imperial College Press, London (1998).
3. Л.И. Магарилл, А.В. Чаплик, М.В. Энтин, УФН 175, 995 (2005).
4. Yu.N. Ovchinnikov, W. Lehle, and A. Schmid, Ann. Phys. 6, 489 (1997).
5. В.А. Гейлер, В.А. Маргулис, А.В. Шорохов, ЖЭТФ 115, 1450 (1999).
6. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматлит, Москва (2004).
7. О.М. Ермолаев, Г.І. Рашба, Вступ до статистичної фізики і термодинаміки, ХНУ, Харків (2004).
8. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Статистическая физика, ч.1, Физматлит, Москва (2005).
9. А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев, Интегралы и ряды, Наука, Москва (1981).