

# Локальные и квазилокальные уровни энергии электронов на поверхности нанотрубки и в кольце в магнитном поле

А.М. Ермолаев, С.В. Кофанов, Г.И. Рашба

*Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина*

*пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61077, Украина*

E-mail: alexander.m.ermolaev@univer.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 10 ноября 2010 г.

Методом локальных возмущений И.М. Лифшица рассматриваются примесные состояния электронов на поверхности нанотрубки и в кольце в магнитном поле. Показано, что примесь на трубке в виде тонкого кольца способна образовать локальные и квазилокальные состояния электронов. Найдены положения примесных уровней и их ширины. Численные расчеты этих величин на трубках и кольцах выполнены для параметров полупроводниковых структур.

Методом локальних збурень І.М. Ліфшиця розглядаються домішкові стани електронів на поверхні нанотрубки і в кільці у магнітному полі. Показано, що домішка на трубці у вигляді тонкого кільця здатна утворити локальні і квазілокальні стани електронів. Знайдено положення домішкових рівнів та їх ширини. Чисельні розрахунки цих величин на трубках і кільцях виконано для параметрів напівпровідникових структур.

PACS: 73.63.Fg Нанотрубки;

61.72.-y Дефекты и примеси в кристаллах;

71.55.-i Примесные уровни и уровни дефектов.

Ключевые слова: нанотрубка, кольцо, примесный потенциал, локальные и квазилокальные уровни.

## 1. Введение

Теория локальных возмущений, разработанная И.М. Лифшицем [1,2] при изучении фононов в неидеальных кристаллах, была успешно использована в теории других квазичастиц в твердых телах — электронов [3,4], магнонов [5], возбуждений в двумерном электронном газе [6]. В связи с возрастающим интересом к системам на кривых поверхностях целесообразно применить эту теорию к изучению примесных состояний электронов на поверхности нанотрубки и в тонком кольце в магнитном поле.

Интерес к электронным наносистемам на кривых поверхностях в магнитном поле возник давно. В статье [7] рассмотрено, в частности, влияние магнитного потока через сечение цилиндра на фазовые переходы порядок-беспорядок в электронной системе на его поверхности. Показано, что параметр порядка испытывает осцилляции Ааронова–Бома с изменением потока. Эти осцилля-

ции сопровождаются периодическим чередованием упорядоченной и неупорядоченной фаз.

В статье [8] развита общая теория локализации электронов дельта-потенциалом притяжения на двумерных многообразиях с различной топологией. Рассмотрены кольцо, цилиндр, тороид, сфера, плоскость Лобачевского. Рассчитана энергия связи электронов на этих поверхностях. Изучена ее зависимость от топологических и геометрических характеристик структуры, от магнитного потока, пронизывающего систему. Обнаружены осцилляции Ааронова–Бома энергии связи электронов с изменением потока. Авторы статьи [8] предсказали эффект делокализации связанных состояний электронов с изменением кривизны структуры. Они нашли критическое значение кривизны, при котором локализация невозможна. В статье [8] рассмотрена также задача рассеяния электронов дельта-потенциалом на цилиндре. Вычислено сечение рассеяния.

Квазилокальные (резонансные) состояния электронов в металлических углеродных нанотрубках на примесных атомах азота обнаружены в работе [9]. Теория этих состояний в металлических и полупроводниковых нанотрубках на изолированных точечных примесях в отсутствие магнитного поля содержится в статье [10]. Используя модель сильной связи и одноузельную теорию рассеяния, автор статьи [10] нашел положения и ширины резонансов, их вклад в плотность электронных состояний. Он показал, как эта теория обобщается на случай многих примесных атомов. Связанные состояния электронов в искривленной наноструктуре изучались в статье [11]. Авторы этой статьи рассмотрели связанные состояния электронов на поверхности сферы и псевдосферы в рамках модели потенциала нулевого радиуса. Они нашли положения локальных уровней в потенциальной яме, условия их существования. Магнитное поле в статье [11] не учитывалось.

В настоящей статье приведены результаты расчета положений и ширин локальных и квазилокальных уровней энергии электронов в поле изолированных примесных атомов на поверхности цилиндрической нанотрубки и в тонком кольце при наличии магнитного поля. Используется метод локальных возмущений И.М. Лифшица. Затравочный спектр энергии электронов предполагается однозонным и параболическим. Во втором разделе приведено выражение для амплитуды рассеяния электронов примесью в виде кольца на поверхности трубки и точечной примесью в кольце. В третьем разделе этим методом рассчитаны характеристики примесных состояний на трубке, а в четвертом — в тонком кольце. Заключение содержит короткое резюме полученных результатов.

## 2. Амплитуда рассеяния электронов

Волновая функция  $\psi$  и энергия  $\epsilon$  электрона с эффективной массой  $m_*$  на поверхности цилиндрической нанотрубки и в тонком кольце в магнитном поле известны [12–15]:

$$\psi_{mk}(\varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} e^{im\varphi} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikz}, \quad (1)$$

$$\epsilon_{mk\sigma} = \epsilon_0 \left( m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + \frac{k^2}{2m_*} + \sigma\mu B;$$

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} e^{im\varphi}, \quad (2)$$

$$\epsilon_{m\sigma} = \epsilon_0 \left( m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + \sigma\mu B.$$

Здесь  $\varphi, z$  — цилиндрические координаты;  $m = 0, \pm 1, \dots$  — азимутальное квантовое число,  $k$  — проекция импульса электрона на ось трубки,  $\sigma = \pm 1$  — спиновое квантовое число;  $a$  — радиус трубки и кольца,  $L$  —

длина трубки;  $\epsilon_0 = 1/2m_*a^2$  — вращательный квант;  $\mu$  — спиновый магнитный момент электрона;  $\Phi = \pi a^2 B$  — поток магнитной индукции  $B$  через сечение трубки и через кольцо,  $\Phi_0 = 2\pi c/e$  — квант потока [12–15]. Вектор  $\mathbf{B}$  параллелен оси трубки и оси кольца. Квантовая постоянная принята равной единице.

Гамильтониан электронов на поверхности трубки и в кольце, взаимодействующих со статическими случайно распределенными примесными атомами, имеет обычный вид [16]

$$H = \sum_{v\sigma} \epsilon_{v\sigma} a_{v\sigma}^\dagger a_{v\sigma} + \frac{1}{S} \sum_{v'v\sigma} u_{v'} \rho_{v'} a_{(v+v')\sigma}^\dagger a_{v\sigma}, \quad (3)$$

где  $v = (m, k)$  для трубки и  $v = m$  для кольца,  $a_{v\sigma}$  и  $a_{v\sigma}^\dagger$  — операторы уничтожения и рождения электронов в состоянии  $|v\sigma\rangle$ , величины  $u_v, \rho_v$  и  $S$  равны

$$u_m(k) = \int dS u(\varphi, z) e^{-i(m\varphi + kz)},$$

$$\rho_m(k) = \sum_{j=1}^{N_i} e^{-i(m\varphi_j + kz_j)}, \quad S = 2\pi aL$$

для трубки и

$$u_m = \int_0^{2\pi} d\varphi a u(\varphi) e^{-im\varphi},$$

$$\rho_m = \sum_{j=1}^{N_i} e^{-im\varphi_j}, \quad S = 2\pi a$$

для кольца. Здесь  $u$  — потенциальная энергия электрона в поле примесного атома;  $N_i$  — число примесных атомов, находящихся в точках  $(\varphi_j, z_j)$ ;  $\int dS$  — интеграл по поверхности трубки.

Задача состоит в том, чтобы вычислить амплитуду рассеяния электронов примесными атомами и найти ее полюсы, соответствующие локальным и квазилокальным состояниям электронов [4]. Для этого введем температурную функцию Грина электронов [16–18]

$$G_{v'v}^\sigma(\epsilon) = -\langle T_\tau [a_{v\sigma}(\tau) \bar{a}_{v'\sigma}(0)] \rangle, \quad (4)$$

где  $a$  и  $\bar{a}$  — мацубаровские операторы вторичного квантования,  $0 \leq \tau \leq \beta$ ,  $\beta$  — обратная температура,  $T_\tau$  — символ хронологического упорядочения операторов, угловыми скобками обозначено гиббсовское усреднение и конфигурационное усреднение по положениям примесных атомов.

Метод расчета функции (4) хорошо известен [16–18]. Используя разработанную в [16] «крестовую» технику, получаем связь усредненной функции Грина (4) в  $(v, \sigma, s)$  — представлении с усредненным оператором рассеяния  $T$  [4]:

$$G_{v\sigma}(\xi_s) = G_{v\sigma}^0(\xi_s) + G_{v\sigma}^0(\xi_s) T_{v\sigma}(\xi_s) G_{v\sigma}^0(\xi_s),$$

где  $\xi_s = \pi(2s+1)/\beta$ ,  $G_{v\sigma}^0(\xi_s)$  — функция Грина свободных электронов. Аналитическое продолжение функции  $T(\xi_s)$  на комплексную плоскость энергии дает амплитуду рассеяния электронов примесными атомами. Ограничиваясь суммированием диаграмм с одним крестом для  $T$ , находим

$$T_{v\sigma}(\xi_s) = N_i \frac{u_0}{S} + \frac{N_i}{S^2} \sum_{v'} u_{v-v'} u_{v'-v} G_{v'\sigma}^0(\xi_s) + \dots \quad (5)$$

Этот ряд известен в теории многократного рассеяния электронов. Он используется при малой концентрации примесей. В случае короткодействующей примеси  $u_v = u_0$ , и ряд (5) превращается в геометрическую прогрессию. После аналитического продолжения ее сумма равна

$$T_{v\sigma}(\varepsilon) = N_i u_0 / S \left[ 1 - \frac{u_0}{S} \sum_v G_{v\sigma}^0(\varepsilon) \right]. \quad (6)$$

В случае трубки вещественная часть суммы, входящей в (6), при  $\varepsilon_{m\sigma} > \varepsilon$  равна

$$\text{Re} \sum_v G_{v\sigma}^0(\varepsilon) = -L \sqrt{\frac{m^*}{2}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (\varepsilon_{m\sigma} - \varepsilon)^{-1/2}. \quad (7)$$

Здесь  $\varepsilon_{m\sigma} = \varepsilon_{m0\sigma}$  — границы подзон спектра (1). Входящий в (7) ряд расходится. Это вынуждает «размазать» примесный потенциал. Один из способов избавиться от расходимости — использование нелокального сепарабельного примесного потенциала. Этот потенциал использовался в пионерских работах И.М. Лифшица [2] по теории неидеальных кристаллов. Он часто встречается в теории неупорядоченных систем [4] и в квантовой теории рассеяния [19,20]. Авторы статьи [8] использовали другой способ устранения этой расходимости. Они ввели обрезавший импульс и выразили его через энергию связи электрона на дельта-потенциале в двумерном электронном газе.

Предположим, что примесь на поверхности трубки представляет собой соосное с трубкой кольцо, являющееся потенциальной ямой или барьером для электронов. Такой потенциал аппроксимируем оператором  $U_0 |\eta\rangle\langle\eta|$ , а функцию  $\eta(z) = \langle z | \eta \rangle$  подберем так, чтобы  $\langle \eta | \eta \rangle = \int dS \eta^2(z) = 1$ . Этому условию удовлетворяет функция:

$$\eta(z) = \frac{1}{\sqrt{2ab\pi}^{3/4}} \exp\left(-\frac{z^2}{b^2}\right). \quad (8)$$

Константа  $U_0$  играет роль интенсивности примесного потенциала, а  $b$  — его протяженности вдоль оси трубки.

Выражение для амплитуды рассеяния электронов сепарабельным потенциалом известно [20]:

$$T_{v\sigma}(\varepsilon) = U_0 |\langle \eta | v \rangle|^2 \left[ 1 - U_0 \sum_{v'} |\langle \eta | v' \rangle|^2 G_{v'\sigma}^0 \right]^{-1}. \quad (9)$$

Предельный переход к дельта-потенциалу  $u(z) = u_0 \delta(z)$  осуществляется по правилу

$$v_0 = 2\sqrt{\pi} \lim_{\substack{U_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} (bU_0). \quad (10)$$

Константы  $u_0$  и  $U_0$  связаны соотношением

$$u_0 / 2\pi a = 2\sqrt{\pi} b U_0. \quad (11)$$

Полюсы амплитуды рассеяния (9) дают положения и ширины примесных уровней энергии электронов. Записывая входящий в (9) знаменатель в виде

$$1 - U_0 \sum_v |\langle \eta | v \rangle|^2 G_{v\sigma}^0(\varepsilon) = 1 - U_0 [F_{v\sigma}(\varepsilon) - i\pi g_{v\sigma}(\varepsilon)],$$

где

$$F_{v\sigma}(\varepsilon) = \sum_v P \frac{|\langle \eta | v \rangle|^2}{\varepsilon - \varepsilon_{v\sigma}}, \quad (12)$$

$$g_{v\sigma}(\varepsilon) = \sum_v |\langle \eta | v \rangle|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_{v\sigma}),$$

получаем уравнение И.М. Лифшица для локальных и квазилокальных уровней энергии электронов на трубке:

$$1 - U_0 F_{v\sigma}(\varepsilon) = 0. \quad (13)$$

В статье [8] это уравнение получено другим методом для упомянутых выше структур при произвольном значении топологической фазы. Ширина квазилокального уровня определяется соотношением

$$\Gamma_{v\sigma} = -\pi g_{v\sigma}(\varepsilon_r) / F'_{v\sigma}(\varepsilon_r), \quad (14)$$

где  $\varepsilon_r$  — его положение. Штрихом отмечена производная функции  $F_{v\sigma}(\varepsilon)$  в точке  $\varepsilon = \varepsilon_r$ . Вычет функции (9) в полюсе  $\varepsilon_r - i\Gamma$  равен  $r_{v\sigma} = -|\langle \eta | v \rangle|^2 / F'_{v\sigma}$ .

Амплитуда рассеяния электронов точечным потенциалом в кольце лишена расходимости и может быть вычислена точно.

### 3. Примесные уровни на трубке

Входящая в формулы (12) функция  $\langle \eta | v \rangle$  с учетом (8) равна

$$\langle \eta | mk \rangle = \int dS \eta(z) \psi_{mk}(\varphi, z) = \delta_{m0} \pi^{1/4} \sqrt{\frac{2b}{L}} \exp\left(-\frac{1}{2} k^2 b^2\right). \quad (15)$$

Символ Кронекера означает, что рассматриваемый здесь потенциал (8) рассеивает лишь электронные волны (1) с нулевой проекцией углового момента на ось трубки. Подставляя (15) в (12), получаем

$$g_{v\sigma}(\varepsilon) = \theta(\varepsilon - \varepsilon_{0\sigma}) \frac{2m^*b}{\sqrt{\pi}k_{\sigma}} \exp(-k_{\sigma}^2 b^2), \quad (16)$$

где  $k_\sigma = [2m_*(\epsilon - \epsilon_{0\sigma})]^{1/2}$ ,  $\epsilon_{0\sigma} = \epsilon_0(\Phi/\Phi_0)^2 + \sigma\mu B$  — граница подзоны ( $m=0, \sigma$ ) спектра (1),  $\theta$  — функция Хевисайда. При переходе к дельта-потенциалу произведение  $U_0 g_\sigma(\epsilon)$ , с учетом (10) и (11), переходит в  $u_0 v_{0\sigma} / S$ , где

$$v_{0\sigma}(\epsilon) = \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{m_*}{2}} (\epsilon - \epsilon_{0\sigma})^{-1/2}$$

— плотность состояний в подзоне ( $m=0, \sigma$ ).

После подстановки (15) в (12) находим

$$F_\sigma(\epsilon) = \frac{4m_*b}{\sqrt{\pi}} P \int_0^\infty dk \frac{\exp(-k^2 b^2)}{k_\sigma^2 - k^2}. \quad (17)$$

Этот интеграл сводится к табличному [21]. Если  $\epsilon < \epsilon_{0\sigma}$ , то из (17) получаем

$$F_\sigma(\epsilon) = -\frac{\sqrt{2\pi m_*} b}{\sqrt{\epsilon_{0\sigma} - \epsilon}} \exp\left[2m_*(\epsilon_{0\sigma} - \epsilon)b^2\right] \times \left[1 - \operatorname{erf}\left(\sqrt{2m_*(\epsilon_{0\sigma} - \epsilon)}b\right)\right], \quad (18)$$

где  $\operatorname{erf}(x)$  — интеграл вероятности [21]. Если же  $\epsilon > \epsilon_{0\sigma}$ , то

$$F_\sigma(\epsilon) = 4m_* b^2 {}_1F_1\left(1; \frac{1}{2}; -k_\sigma^2 b^2\right). \quad (19)$$

Здесь  ${}_1F_1$  — вырожденная гипергеометрическая функция [21].

Из уравнения (13) следует, что при  $U_0 < 0$  в области  $\epsilon < \epsilon_{0\sigma}$  существует локальный уровень  $\epsilon_\sigma^l$ . Если  $[2m_*(\epsilon_{0\sigma} - \epsilon)]^{1/2} b \ll 1$ , то расстояние от этого уровня до границы подзоны равно

$$\Delta = \epsilon_{0\sigma} - \epsilon_\sigma^l = 2\pi m_* b^2 U_0^2. \quad (20)$$

Отметим, что этот результат можно получить из (6), если в расходящейся сумме (7) оставить лишь одно слагаемое с минимальным знаменателем. По мере роста  $|U_0|$  расстояние  $\Delta$  стремится к  $|U_0|$ . Это сразу следует из дисперсионного соотношения

$$F_\sigma(\epsilon) = P \int_{-\infty}^\infty d\epsilon' \frac{g_\sigma(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon'},$$

поскольку функция  $g_\sigma(\epsilon)$  удовлетворяет условию

$$\int_0^\infty d\epsilon g_\sigma(\epsilon) = 1.$$

В случае примесного потенциала отталкивания ( $U_0 > 0$ ) в области  $\epsilon > \epsilon_{0\sigma}$  существует квазилокальный уровень. Его положение при  $k_\sigma b \ll 1$  легко получить аналитически. Оказывается, что он существует, если высота барьера  $U_0$  превышает критическое зна-

чение  $U_0^c = 1/4m_*b^2$ . Тогда из уравнения (13) получаем положение резонансного уровня:

$$\Delta = \epsilon_\sigma^r - \epsilon_{0\sigma} = U_0^c \left(1 - \frac{U_0^c}{U_0}\right). \quad (21)$$

Причиной существования этого уровня является уменьшение скорости электрона в области барьера. С ростом высоты барьера  $\Delta$  приближается к  $U_0$ .

Из формул (12) и (14) при  $k_\sigma b \ll 1$  находим ширину мелкого резонансного уровня:

$$\Gamma = \frac{1}{8m_*b^3} \sqrt{\frac{\pi}{2m_*\Delta}}. \quad (22)$$

Отношение этой ширины к отщеплению (21) равно

$$\frac{\Gamma}{\Delta} = \frac{1}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{1}{m_* b^2 \Delta}\right)^{3/2}. \quad (23)$$

С ростом  $\Delta$  это отношение убывает и при  $k_\sigma b \gg 1$  становится равным

$$\frac{\Gamma}{\Delta} = \sqrt{2\pi m_* U_0} b \exp(-2m_* U_0 b^2). \quad (24)$$

Для оценок  $\Gamma/\Delta$  (23) и (24) используем эффективную массу GaAs  $m_* = 0,07m_0$  ( $m_0$  — масса свободного электрона), а также  $b = 10^{-7}$  см,  $U_0 = 0,01$  эВ. В качестве  $U_0$  использовано типичное значение амплитуды модулирующего потенциала на поверхности нанотрубки со сверхрешеткой [22]. Рассматриваемый здесь примесный потенциал представляет собой один период сверхрешетки. Тогда  $U_0^c = 1,38 \cdot 10^{-13}$  эрг, отношения (23) и (24) равны 0,33 и 0,24 соответственно.

Таким образом, рассматриваемая примесь на поверхности нанотрубки может вызвать при низких температурах заметные локальные и квазилокальные уровни. Они существуют и в поле короткодействующего потенциала притяжения [8]. Расстояние  $\Delta$  между границей подзоны  $\epsilon_{m\sigma}$  и отщепленным «вниз» от нее примесным уровнем равно  $\Delta = m_* u_0^2 / 8\pi^2 a^2$ . Соответствующие состояния электронов аналогичны рассмотренным в статьях [23–27] магнитопримесным состояниям. Однако, в отличие от магнитопримесных состояний, рассмотренные здесь примесные состояния существуют и в отсутствие магнитного поля.

#### 4. Локальные уровни в кольце

Плотность состояний электронов в тонком кольце имеет дельтаобразные всплески на дискретных уровнях (2). Это означает, что изолированный примесный атом может вызывать локальные уровни, расположенные между уровнями (2). Их положения получим из уравнения (13), которое в случае точечной примеси с

потенциалом  $u(\varphi) = u_0 \delta(a\varphi)$  в точке  $\varphi = 0$  принимает вид [8]

$$1 - \frac{u_0}{2\pi a} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{m\sigma}} = 0. \quad (25)$$

Входящий сюда ряд суммируется точно [8,21]:

$$F_{\sigma}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi a} \sum_m \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{m\sigma}} =$$

$$= -\frac{1}{2a\varepsilon_0} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{|\varepsilon_{\sigma}|}} \left( \operatorname{ch} 2\pi \sqrt{\frac{|\varepsilon_{\sigma}|}{\varepsilon_0}} - \cos 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^{-1} \operatorname{sh} 2\pi \sqrt{\frac{|\varepsilon_{\sigma}|}{\varepsilon_0}}, \quad \varepsilon_{\sigma} < 0;$$

$$F_{\sigma}(\varepsilon) = -\frac{1}{2a\varepsilon_0} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_{\sigma}}} \left( \cos 2\pi \sqrt{\frac{\varepsilon_{\sigma}}{\varepsilon_0}} - \cos 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^{-1} \sin 2\pi \sqrt{\frac{\varepsilon_{\sigma}}{\varepsilon_0}}, \quad \varepsilon_{\sigma} > 0, \quad (26)$$

где  $\varepsilon_{\sigma} = \varepsilon - \sigma \mu B$ . В отсутствие магнитного поля из (26) получаем

$$F(\varepsilon) = \begin{cases} -\frac{1}{2a\varepsilon_0} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{|\varepsilon|}} \operatorname{cth} \pi \sqrt{\frac{|\varepsilon|}{\varepsilon_0}}, & \varepsilon < 0, \\ \frac{1}{2a\varepsilon_0} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}} \operatorname{ctg} \pi \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}}, & \varepsilon > 0. \end{cases} \quad (27)$$

Подставляя (27) в (25), убедимся в том, что в случае притяжения электрона к примесному атому ( $u_0 < 0$ ) в области  $\varepsilon < 0$  существует локальный уровень [8]. Он появляется при любой интенсивности примесного потенциала. Если  $|\varepsilon| \ll \varepsilon_0$ , он расположен в точке  $\varepsilon_l = -|u_0|/2\pi a$ . Если же  $|\varepsilon| \gg \varepsilon_0$ , то  $\varepsilon_l = -m^* u_0^2 / 2$ .

В области  $\varepsilon > 0$  существует система локальных уровней, перемежающихся с уровнями (2) невозмущенного спектра. Они удовлетворяют уравнению

$$\operatorname{tg} \pi \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}} = \frac{u_0}{2a\varepsilon_0} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}}. \quad (28)$$

Отталкивающий потенциал ( $u_0 > 0$ ) отщепляет «вверх» локальные уровни от уровней  $\varepsilon_m = \varepsilon_0 m^2$  с  $m = 0, \pm 1, \dots$ . При  $u_0 < 0$  отщепление происходит «вниз» от уровней  $\varepsilon_m$  с  $m = \pm 1, \pm 2, \dots$ . На рис. 1 показано графическое решение уравнения (28) при  $A = \pi|u_0|/2a\varepsilon_0 = 2,91$ . Для численных расчетов снова использована эффективная масса GaAs, а также  $a = 10^{-6}$  см,  $|u_0|/a = 0,01$  эВ. Абсциссы точек пересечения тангенсоиды с гиперболой дают положения локальных уровней.

Если  $u_0 > 0$  и  $\varepsilon \ll \varepsilon_0$ , из уравнения (28) получаем  $\varepsilon_l = u_0/2\pi a$ . В рассматриваемом случае  $u_0/2\pi a = 2,55 \cdot 10^{-15}$  эрг,  $m^* u_0^2 / 2 = 7,41 \cdot 10^{-15}$  эрг.

В магнитном поле из уравнения (25) с учетом (26) следует, что в спектре энергии электронов при  $u_0 < 0$  в области  $\varepsilon_{\sigma} < 0$  существует локальный уровень. Если  $|\varepsilon_{\sigma}| \ll \varepsilon_0$ , его положение равно

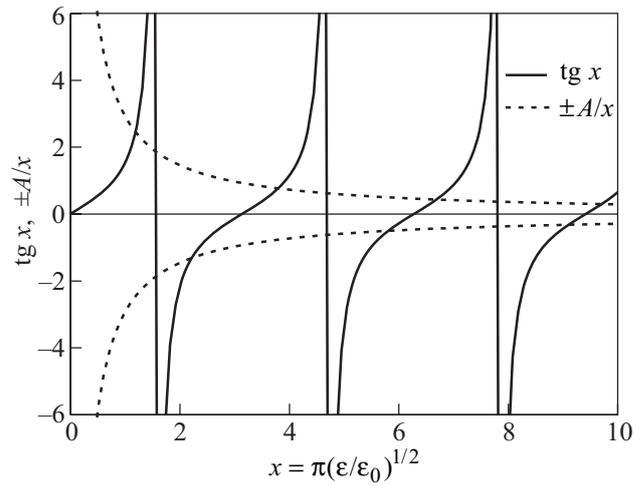


Рис. 1. Графическое решение уравнения (28). Сплошные линии — тангенсоиды, штриховые — гиперболы  $\pm A/x$ , где  $x = \pi(\varepsilon/\varepsilon_0)^{1/2}$ ,  $A = \pi|u_0|/2a\varepsilon_0$ .

$$|\varepsilon_l| = \frac{|u_0|}{2\pi a} \left( 1 - \frac{2a\varepsilon_0}{\pi|u_0|} \sin^2 \pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right). \quad (29)$$

В поле  $B = 10^4$  Гс при использованных выше значениях параметров эта величина равна  $|\varepsilon_l| = 2,4 \cdot 10^{-15}$  эрг. С изменением магнитного потока через кольцо положение локального уровня испытывает осцилляции Ааронова–Бома с периодом  $\Phi_0$  [8]. При некоторых значениях потока происходит предсказанная в работе [8] магнитная делокализация связанных состояний электронов. Из (29) следует, что при  $\pi|u_0|/2a\varepsilon_0 < 1$  мелкий локальный уровень существует в промежутках значений магнитного потока  $[0, y_0]$ ,  $[k\pi - y_0, k\pi + y_0]$  ( $k = 1, 2, \dots$ ), где

$$y_0 = \pi \frac{\Phi}{\Phi_0} = \arcsin \sqrt{\frac{\pi|u_0|}{2a\varepsilon_0}}.$$

В каждом из этих промежутков величина  $|\varepsilon_l|$  изменяется от нуля до  $|u_0|/2\pi a$ . Если же  $\pi|u_0|/2a\varepsilon_0 > 1$ , то ограничений на значения  $\Phi$ , при которых локальный уровень (29) существует, нет. С ростом  $\Phi$  его положение осциллирует между  $|u_0|/2\pi a - \varepsilon_0/\pi^2$  и  $|u_0|/2\pi a$  с амплитудой  $\varepsilon_0/\pi^2 = 8,75 \cdot 10^{-16}$  эрг.

В области  $\varepsilon_{\sigma} > 0$  рассмотрим положение локального уровня в поле потенциала отталкивания, слегка отщепленного от уровня  $m = 0$ . Из (25) и (26) следует, что в этом случае

$$\varepsilon_l = \frac{u_0}{2\pi a} \left( 1 + \frac{2a\varepsilon_0}{\pi u_0} \sin^2 \pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right).$$

Этот уровень существует при любом значении потока  $\Phi$ , а его положение осциллирует с изменением  $\Phi$  между  $u_0/2\pi a$  и  $u_0/2\pi a(1 + 2a\varepsilon_0/\pi u_0)$  с периодом  $\Phi_0$  и амплитудой  $\varepsilon_0/\pi^2$ .

### 5. Заключение

Общая теория локализации электронов на изолированных примесных атомах в металлах и полупроводниках [2–4], в двумерном электронном газе [6], в наноструктурах на кривых поверхностях [8] построена давно. Однако конкретизация основных положений этой теории, сопоставление различных подходов к проблеме продолжают до сих пор. Автор статьи [10] рассчитал характеристики примесных уровней энергии электронов на поверхности углеродной нанотрубки с учетом ее реального спектра. В статье [11] использован метод потенциала нулевого радиуса для расчета положений локальных уровней на сфере и псевдосфере. Для решения этой проблемы естественно использовать метод локальных возмущений, разработанный И.М. Лифшицем [2–4].

В настоящей статье методом локальных возмущений рассмотрены локальные и квазилокальные уровни энергии электронов на поверхности цилиндрической нанотрубки и в тонком кольце в магнитном поле. Затравочный спектр энергии электронов предполагается однозонным и параболическим. Это означает, что полученные здесь результаты применимы к нанотрубкам с металлическим режимом проводимости. В случае трубки примесный потенциал выбран в виде кольца, являющегося потенциальной ямой или барьером для электронов. Такая примесь аппроксимирована потенциалом специального вида, допускающего аналитическое решение задачи. Потенциал характеризуется двумя параметрами — интенсивностью и протяженностью. Тем самым рассматриваемая модель богаче модели с потенциалом нулевого радиуса, который характеризуется только длиной рассеяния. Показано, что при определенных условиях используемый потенциал индуцирует локальные и квазилокальные уровни. Найдены их характеристики. Локальные уровни на кольце рассмотрены в случае примесного потенциала отталкивания. Эти уровни могут быть обнаружены в экспериментах, в которых изучается оптическое поглощение света нанотрубками и кольцами. Активация электронов в кольце, заполняющих локальный уровень (29), на соседний уровень  $\epsilon_0$  при использованных выше значениях параметров происходит на частоте  $\omega = 10^{13} \text{ с}^{-1}$ . Должны они проявляться и в спектрах коллективных возбуждений в наноструктурах, поскольку резонансным переходам электронов с участием примесных уровней сопутствуют ветви возбуждений системы. Они могут быть обнаружены и при изучении персистентных токов в кольцах [28,29], так как персистентный ток и его флуктуации определяются амплитудой прохождения электронов через барьер, созданный в кольце примесным потенциалом отталкивания.

Авторы выражают благодарность И.В. Криве за полезное обсуждение результатов работы.

1. И.М. Лифшиц, *ДАН СССР* **48**, 83 (1945).
2. И.М. Лифшиц, *Избранные труды. Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987).
3. И.М. Лифшиц, *УФН* **83**, 617 (1964).
4. И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур, *Введение в теорию неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1982).
5. Ю.А. Изюмов, М.В. Медведев, *Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями*, Наука, Москва (1970).
6. S.A. Gredeskul, M. Zusman, Y. Avishai, and M.Ya. Azbel, *Phys. Rep.* **288**, 223 (1997).
7. I.V. Krive and S.A. Naftulin, *Nucl. Phys.* **B364**, 541 (1991).
8. I.V. Krive, S.A. Naftulin, and A.S. Roshavsky, *Ann. Phys.* **232**, 225 (1994).
9. T. Kostyrko, M. Bartkowiak, and G.D. Mahan, *Phys. Rev.* **B59**, 3241 (1999).
10. G.D. Mahan, *Phys. Rev.* **B69**, 125407 (2004).
11. С. Альбеверио, В.А. Гейлер, В.А. Маргулис, *Письма в ЖЭТФ* **26**, 18 (2000).
12. M.F. Lin and K.W.-K. Shung, *Phys. Rev.* **B47**, 6617 (1993).
13. O. Sato, Y. Tanaka, M. Kobayashi, and A. Hasegawa, *Phys. Rev.* **B48**, 1947 (1993).
14. M.F. Lin and K.W.-K. Shung, *Phys. Rev.* **B48**, 5567 (1993).
15. P. Longe and S.M. Bose, *Phys. Rev.* **B48**, 18239 (1993).
16. А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Гос. изд-во физ.мат.лит., Москва (1962).
17. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Статистическая физика*, ч. 2, Физматлит, Москва (2000).
18. G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Kluwer-Plenum, New York (2000).
19. А.Г. Ситенко, *Теория рассеяния*, Вища школа, Киев (1975).
20. Ю.Н. Демков, В.Н. Островский, *Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике*, ЛГУ, Ленинград (1975).
21. А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев, *Интегралы и ряды (Элементарные функции)*, Наука, Москва (1981).
22. О.П. Волосникова, Д.В. Завьялов, С.В. Крючков, *Труды XVII международного совещания «Радиационная физика твердого тела»*, Севастополь (2007), с. 645.
23. Ю.А. Бычков, *ЖЭТФ* **39**, 689 (1960).
24. А.М. Ермолаев, М.И. Каганов, *Письма в ЖЭТФ* **6**, 984 (1967).
25. А.М. Ермолаев, *ЖЭТФ* **54**, 1259 (1968).
26. Э.А. Канер, А.М. Ермолаев, *Письма в ЖЭТФ* **44**, 391 (1986).
27. Э.А. Канер, А.М. Ермолаев, *ЖЭТФ* **92**, 2245 (1987).
28. И.О. Кулик, *Письма в ЖЭТФ* **11**, 407 (1970).
29. А.А. Звягин, И.В. Криве, *ФНТ* **21**, 687 (1995) [*Low Temp. Phys.* **21**, 533 (1995)].

Local and quasi-local energy levels of electrons on the nanotube surface and in the quantum ring at magnetic field

A.M. Ermolaev, S.V. Kofanov, and G.I. Rashba

Impurity states of electrons in the quantum ring and on the nanotube surface were considered by means of the I.M. Lifshitz local perturbation method. Magnetic field was taken into account. It is shown, that a thin ring like impurity on the tube can form local and qua-

si-local electron states. The impurity levels widths and positions were found. Numerical analysis of these quantities on nanotubes and rings for semiconductor structure parameters is carried out.

PACS: 73.63.Fg Nanotubes;  
**61.72.-y** Defects and impurities in crystals;  
**71.55.-i** Impurity and defect levels.

Keywords: nanotube, quantum ring, impurity potential, local and quasi-local energy levels.