

## Теплоемкость электронного газа на поверхности нанотрубки со сверхрешеткой в магнитном поле

А.М. Ермолаев, Г.И. Рашба, М.А. Соляник

*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 15 февраля 2011 г.

Рассматривается влияние модулирующего потенциала на поверхности нанотрубки в продольном магнитном поле на теплоемкость вырожденного и невырожденного электронного газа. Последняя содержит как монотонные, так и осциллирующие слагаемые. Теплоемкость вырожденного газа испытывает осцилляции, похожие на осцилляции де Гааза–ван Альфена, с изменением плотности электронов и осцилляции Ааронова–Бома с изменением магнитного потока через сечение трубки. В случае невырожденного газа остаются только осцилляции Ааронова–Бома. Изучение теплоемкости позволяет проследить за переходом от режима локализованных в ямах модулирующего потенциала состояний электронов к их свободному движению вдоль трубки. Рассмотрен предельный переход к двумерному электронному газу со сверхрешеткой.

Розглядається вплив модулюючого потенціалу на поверхні нанотрубки у повздовжньому магнітному полі на теплоємність виродженого і невиродженого електронного газу. Остання містить як монотонні, так і осцилюючі доданки. Теплоємність виродженого газу випробовує осциляції, схожі з осциляціями де Гааза–ван Альфена, зі зміною густини електронів і осциляції Ааронова–Бома зі зміною магнітного потоку через переріз трубки. У випадку невиродженого газу залишаються тільки осциляції Ааронова–Бома. Вивчення теплоємності газу дозволяє простежити за переходом від режиму локалізованих у ямах модулюючого потенціалу станів електронів до їх вільного руху вздовж трубки. Розглянуто граничний перехід до двовимірного електронного газу з надграткою.

PACS: **73.63.Fg** Нанотрубки;

**65.80.+n** Тепловые свойства малых частиц, нанокристаллов и нанотрубок;

**65.40.Ba** Теплоемкость;

**74.78.Fk** Многослойные структуры, сверхрешетки, гетероструктуры.

Ключевые слова: нанотрубка, сверхрешетка, вырожденный и невырожденный электронный газ, теплоемкость, магнитное поле.

### Введение

Полученное И.М. Лифшицем и его учениками [1–3] решение проблемы восстановления энергетического спектра металлов по экспериментальным данным оказалось полезным и при изучении других систем. К ним относятся низкоразмерные наносистемы, органические проводники, слоистые системы с металлическим характером проводимости. Теория явлений переноса в таких системах, основанная на концепции квазидвумерного электронного энергетического спектра, развита в работах В.Г. Песчанского и его учеников [4–6]. Целесообразно использовать эту концепцию при изу-

чении свойств электронного газа на поверхности нанотрубки со сверхрешеткой.

Интерес к системам со сверхрешетками обусловлен рядом причин. Они являются функциональными элементами многих приборов и устройств современной техники. Совершенствование метода молекулярно-лучевой эпитаксии позволяет создавать такие системы в лабораториях. Существование в теории систем со сверхрешетками дополнительных параметров — амплитуды и периода модулирующего потенциала — увеличивает число способов управлять их свойствами.

Логика развития физики твердого тела такова, что в настоящее время объектами исследования являются не

только трехмерные системы со сверхрешетками [7,8], но и низкоразмерные системы. К ним относятся системы с двумерным электронным газом [9]. Особый интерес вызывают свойства двумерных систем со сверхрешетками в магнитном поле. Число работ, посвященных этой тематике, неуклонно растет.

В работе [10] рассмотрено поглощение и рассеяние света в двумерном электронном газе с одномерной сверхрешеткой в магнитном поле, перпендикулярном плоскости движения электронов. Эта геометрия используется и в статьях [11–17]. Предполагая модулирующий потенциал слабым, авторы статьи [11] численно рассчитали для параметров GaAs зависимость энергии Ферми, теплоемкости, намагниченности, проводимости двумерного электронного газа от магнитного поля. К сожалению, аналитические выражения для термодинамических величин, кроме исходных, в этой статье не приведены. Электромагнитные и магнитопримесные волны в холловских сверхрешетках изучались в статье [12]. В работе [13] рассмотрены магнитоплазменные волны в двумерном электронном газе с учетом сверхрешетки и параболического потенциала конфайнмента. Энергетический спектр электронов, а также магнитные квантовые осцилляции термодинамических величин и проводимости двумерного электронного газа с одномерной сверхрешеткой в магнитном поле рассмотрены в статье [14]. В работе [15] учтено влияние магнитного пробоя на эти осцилляции. Осцилляциям де Гааза–ван Альфена и Вейсса в плоском слое графена с учетом слабого модулирующего потенциала посвящена статья [16]. Более сложный случай двумерного электронного газа со слабым модулирующим потенциалом в виде квадратной сверхрешетки в условиях квантового эффекта Холла изучен в работе [17]. Авторы этой работы рассмотрели магнитные квантовые осцилляции проводимости двумерных проводников с квадратной сверхрешеткой.

Метод молекулярно-лучевой эпитаксии позволяет создавать искусственную периодическую структуру не только в трехмерных системах и в двумерном электронном газе, но и на поверхности углеродной [18] и полупроводниковой [19] нанотрубки. Сверхрешетка на поверхности углеродной нанотрубки рассматривалась в статье [20]. Авторы этой статьи рассчитали орбитальную намагниченность электронного газа на поверхности трубки со сверхрешеткой в магнитном поле, параллельном оси трубки и сверхрешетки. Используя модель, предложенную авторами статьи [20], мы вычислили теплоемкость вырожденного и невырожденного электронного газа. Как и в статье [20], здесь предполагается, что затравочный спектр энергии электронов однозонный и параболический. Во втором разделе рассмотрена электронная плотность состояний, а в третьем и четвертом — теплоемкость вырожденного

и невырожденного электронного газа. В заключении суммируются результаты работы.

### Плотность состояний

Энергия электрона с эффективной массой  $m_*$  на поверхности цилиндрической нанотрубки со сверхрешеткой в магнитном поле, параллельном ее оси, равна [7,21]

$$\varepsilon_{mk\sigma} = \varepsilon_0 \left( m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + \Delta(1 - \cos kd) + \sigma \mu_B B, \quad (1)$$

где  $m = 0, \pm 1, \dots$  — азимутальное квантовое число,  $k$  — проекция волнового вектора электрона на ось трубки  $z$ ,  $\sigma = \pm 1$  — спиновое квантовое число,  $\varepsilon_0 = 1/2m_*a^2$  — вращательный квант,  $a$  — радиус трубки,  $\Phi = \pi a^2 B$  — поток магнитной индукции  $B$  через сечение трубки,  $\Phi_0 = 2\pi c/e$  — квант потока [21],  $\Delta$  и  $d$  — амплитуда и период одномерного модулирующего потенциала сверхрешетки [7],  $\mu_B$  — спиновый магнитный момент электрона. Квантовая постоянная здесь и ниже принята равной единице. Если  $kd \ll 1$ , энергия продольного движения электрона принимает простой вид  $k^2/2m_*$ , где  $m_* = 1/\Delta d^2$ . Предполагается, что в рассматриваемом случае эффективная масса электрона для движения вдоль и поперек трубки одинакова.

Плотность состояний электронов со спектром (1) вычисляется по формуле

$$v(\varepsilon) = \sum_{mk\sigma} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{mk\sigma}).$$

Она равна

$$v(\varepsilon) = \frac{L}{\pi d} \sum_{m\sigma} \frac{\theta(\varepsilon - \varepsilon_{m\sigma})\theta(\varepsilon_{m\sigma} + 2\Delta - \varepsilon)}{\sqrt{(\varepsilon - \varepsilon_{m\sigma})(\varepsilon_{m\sigma} + 2\Delta - \varepsilon)}}. \quad (2)$$

Здесь  $\varepsilon_{m\sigma} = \varepsilon_{m0\sigma}$ ,  $L$  — длина трубки,  $\theta$  — функция Хевисайда. В отсутствие сверхрешетки спектр (1) представляет собой систему одномерных подзон с корневыми особенностями плотности состояний на их границах  $\varepsilon_{m\sigma}$ . Модулирующий потенциал превращает этот спектр в минизоны шириной  $2\Delta$  с границами  $\varepsilon_{m\sigma}$ ,  $\varepsilon_{m\sigma} + 2\Delta$ .

Отношение потоков  $\eta = \Phi/\Phi_0$  входит в (2) в комбинации  $m + \eta$ . Это позволяет ограничиться промежутком  $0 \leq \eta \leq 1$ . Последовательность расположения минизон зависит от  $\eta$ . Если  $\eta < 1/2$ , имеем

$$\varepsilon_0 \eta^2 < \varepsilon_{-1} < \varepsilon_{+1} < \varepsilon_{-2} < \dots$$

Если же  $\eta > 1/2$ , то

$$\varepsilon_{-1} < \varepsilon_0 \eta^2 < \varepsilon_{-2} < \dots$$

Здесь и ниже пренебрегаем спиновым расщеплением уровней. При  $\eta < 1/2$  нижняя минizona расположена в промежутке  $[\varepsilon_0 \eta^2, \varepsilon_0 \eta^2 + 2\Delta]$ , а следующая — в

промежутке  $[\varepsilon_{-1}, \varepsilon_{-1} + 2\Delta]$ . Энергетическая щель между ними равна  $\varepsilon_0(1 - 2\eta) - 2\Delta$ . Ширина  $k$ -й щели между  $(k+1)$ -й и  $k$ -й минизонами ( $k = 1, 3, \dots$ ) равна  $\varepsilon_0 k(1 - 2\eta) - 2\Delta$ . Обычно в экспериментах с трубками радиуса  $a \sim (10^{-7} - 10^{-6})$  см  $\varepsilon_0 \gg \Delta$ , а отношение потоков в достижимых магнитных полях гораздо меньше единицы, поэтому минизоны не перекрываются. Однако с ростом радиуса трубки их перекрытие неизбежно.

На рис. 1 приведена безразмерная плотность состояний  $A = \nu d \varepsilon_0 / 2L$  (2) в двух нижних минизонах спектра (1) как функция  $\varepsilon/\varepsilon_0$  для параметров  $\eta = 0.1$ ,  $\Delta/\varepsilon_0 = 0.1$ , обычно используемых в экспериментах [11,20].

Когда  $\varepsilon \gg \varepsilon_0$ , входящую в (2) сумму по  $m$  можно заменить интегралом. В результате спектр нанотрубки становится сплошным, а плотность состояний оказывается равной

$$\nu(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{4L}{\pi d \sqrt{2\Delta\varepsilon_0}} K\left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{2\Delta}}\right), & \varepsilon < 2\Delta, \\ \frac{4L}{\pi d \sqrt{\varepsilon\varepsilon_0}} K\left(\sqrt{\frac{2\Delta}{\varepsilon}}\right), & \varepsilon > 2\Delta, \end{cases} \quad (3)$$

где  $K(k)$  — полный эллиптический интеграл 1-го рода с модулем  $k$  [22]. Учитывая приведенную выше связь  $m_*$  с  $\Delta$  и  $d$ , убеждаемся в том, что (3) представляет собой плотность состояний двумерного электронного газа с одномерной сверхрешеткой в отсутствие магнитного поля, занимающего полосу с площадью  $S = 2\pi aL$ . Энергия электрона в такой системе равна [4–7]

$$\varepsilon(k_x, k_y) = \frac{k_x^2}{2m_*} + \Delta(1 - \cos k_y d).$$

Эта система получается разрезанием трубки по образующей и разворачиванием ее на плоскость. При  $\varepsilon \ll 2\Delta$  из (3) получаем плотность состояний двумерного электронного газа в отсутствие сверхрешетки:

$$\begin{aligned} \nu_{\text{osc}}(\varepsilon) &= \frac{4L}{\pi d \varepsilon_0} \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}\right)^{3/4} \left(\frac{\varepsilon}{2\Delta}\right)^{1/2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{l}} \cos 2\pi l \frac{\Phi}{\Phi_0} \cos\left(2\pi l \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}} - \frac{\pi}{4}\right), & \varepsilon_0 \ll \varepsilon < 2\Delta, \\ \nu_{\text{osc}}(\varepsilon) &= \frac{4L}{\pi d \varepsilon_0} \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}\right)^{3/4} \left(\frac{\varepsilon}{2\Delta}\right)^{1/2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{l}} \cos 2\pi l \frac{\Phi}{\Phi_0} \left[ \cos\left(2\pi l \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}} - \frac{\pi}{4}\right) + \left(1 - \frac{2\Delta}{\varepsilon}\right)^{-1/4} \cos\left(2\pi l \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \left(1 - \frac{2\Delta}{\varepsilon}\right)} + \frac{\pi}{4}\right) \right], & \varepsilon \gg \varepsilon_0, \varepsilon > 2\Delta. \end{aligned} \quad (4)$$

Функция (4) осциллирует с изменением энергии электрона и магнитного потока  $\Phi$ . Амплитуда осцилляций убывает с ростом энергии пропорционально  $\varepsilon^{-1/4}$ .

### Вырожденный электронный газ

Используя плотность состояний (3), (4), вычислим число электронов  $N$ , их энергию  $E$ , химический потенциал  $\mu$  и теплоемкость  $C$  [24]. Сначала рассмот-

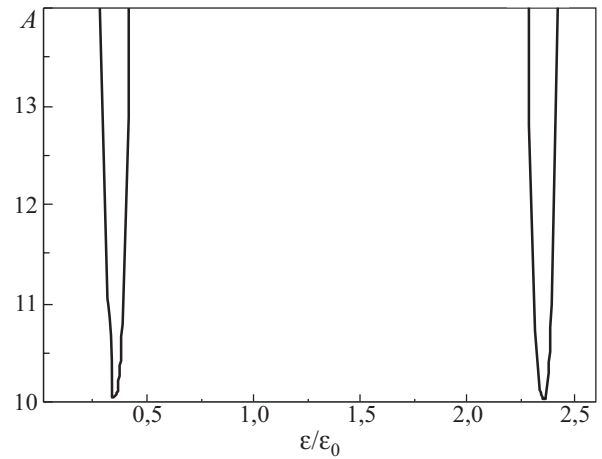


Рис. 1. Плотность состояний (2) в двух нижних минизонах спектра (1) для значений параметров, приведенных в тексте.

$\nu_0 = m_* S / \pi$ . В точке  $\varepsilon = 2\Delta$  функция (3) имеет логарифмическую особенность:

$$\nu(\varepsilon) = \frac{2L}{\pi d \sqrt{2\Delta\varepsilon_0}} \ln \frac{2\Delta}{|\varepsilon - 2\Delta|}.$$

С ростом энергии она убывает по закону

$$\nu(\varepsilon) = \frac{2L}{d \sqrt{\varepsilon\varepsilon_0}} \left(1 + \frac{\Delta}{2\varepsilon}\right), \quad \varepsilon \gg 2\Delta.$$

Для вычисления входящей в формулу (2) суммы по  $m$  при  $\varepsilon \gg \varepsilon_0$  используем формулу Пуассона. Тогда  $\nu = \nu_{\text{mon}} + \nu_{\text{osc}}$ , где  $\nu_{\text{mon}}$  — монотонная часть плотности состояний (3), а  $\nu_{\text{osc}}$  — осциллирующая часть. Последняя содержит интеграл Фурье с конечными пределами, в котором подынтегральная функция имеет корневые особенности на пределах интегрирования. Асимптотика далекой компоненты Фурье этого интеграла известна [23]. Из нее получаем

рим вырожденный электронный газ на поверхности трубки.

В актуальном для трубок малого радиуса случае, когда при нулевой температуре электроны частично заполняют лишь нижнюю минизону, получаем

$$N = \frac{4L}{\pi d} \arcsin \sqrt{\frac{\mu_0 - \varepsilon_-}{2\Delta}}, \quad (5)$$

$$E = \frac{4L}{\pi d} \Delta \times \left[ \left( 1 + \frac{\varepsilon_-}{\Delta} \right) \arcsin \sqrt{\frac{\mu_0 - \varepsilon_-}{2\Delta}} - \frac{1}{2\Delta} \sqrt{(\mu_0 - \varepsilon_-)(\varepsilon_- + 2\Delta - \mu_0)} \right].$$

Здесь  $\varepsilon_- = \varepsilon_0 \eta^2$  — нижняя граница спектра (1),  $\mu_0$  — энергия Ферми. Из (5) находим энергию Ферми

$$\mu_0 = \varepsilon_- + 2\Delta \sin^2 \frac{\pi dn}{4}$$

и энергию полностью заполненной минизоны

$$E = \frac{2L\Delta}{d} \left( 1 + \frac{\varepsilon_-}{\Delta} \right),$$

где  $n = N/L$  — линейная плотность электронов.

Для получения теплоемкости электронного газа необходимо выполнить зоммерфельдовское разложение функций  $N$  и  $E$  по степеням  $T/\mu$ , где  $T$  — температура (постоянная Больцмана принята равной единице). Это возможно, если химический потенциал расположен вдали от особенностей плотности состояний, т.е. выполняются неравенства

$$T \ll \mu - \varepsilon_-, T \ll \varepsilon_+ - \mu, \quad (6)$$

где  $\varepsilon_{\pm}$  — верхняя и нижняя границы последней частично заполненной минизоны. Поправки порядка  $T^2$  в разложении  $N$  и  $E$  равны

$$N_T = \frac{\pi L T^2}{3d} (\mu_0 - \varepsilon_- + \Delta) [(\mu_0 - \varepsilon_-)(\varepsilon_+ - \mu_0)]^{-3/2},$$

$$E_T = \frac{\pi L T^2}{3d} [\mu_0 \Delta - \varepsilon_- (\varepsilon_+ - \mu_0)] [(\mu_0 - \varepsilon_-)(\varepsilon_+ - \mu_0)]^{-3/2}.$$

Если  $T \ll \mu_0 - \varepsilon_- \ll 2\Delta$ , то температурные поправки к химическому потенциалу и энергии равны

$$\delta\mu = \frac{\pi^2 T^2}{12(\mu_0 - \varepsilon_-)}, \quad (7)$$

$$\delta E = \frac{\pi L \Delta T^2}{3d(2\Delta)^{3/2} \sqrt{\mu_0 - \varepsilon_-}}.$$

В  $\delta E$  учтено слагаемое, обусловленное зависимостью химпотенциала от температуры. Из (7) получаем монотонную часть теплоемкости нанотрубки:

$$C_{\text{mon}} = \frac{\pi L T}{3d \sqrt{2\Delta} \sqrt{\mu_0 - \varepsilon_-}}. \quad (8)$$

Используя (3), получаем теплоемкость двумерного электронного газа со сверхрешеткой в отсутствие магнитного поля при низких температурах. При  $\mu_0 < 2\Delta$  она равна

$$C = \frac{TS}{3d} \sqrt{\frac{m_*}{\Delta}} \left( 1 - \frac{\mu_0}{2\Delta} \right)^{-1} \left[ E \left( \sqrt{\frac{\mu_0}{2\Delta}} \right) + \left( 1 - \frac{\mu_0}{2\Delta} \right) K \left( \sqrt{\frac{\mu_0}{2\Delta}} \right) \right], \quad (9)$$

где  $E(k)$  — полный эллиптический интеграл 2-го рода [22]. Коэффициент при  $T$  в этой формуле вычислен

точно. Если  $\mu_0 \ll 2\Delta$ , из (9) получаем стандартное выражение для теплоемкости двумерного электронного газа без сверхрешетки

$$C = \frac{\pi m_* TS}{3},$$

в котором использована плотность состояний  $\nu_0$ . В соответствии с принципом Паули теплоемкость (8), (9) пропорциональна температуре, однако коэффициент пропорциональности является сложной функцией параметра  $\mu_0/\Delta$ .

Осциллирующие части  $N$  и  $E$  при условиях (6) и  $\varepsilon_0 \ll \mu_0 < 2\Delta$  равны

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} N_{\text{osc}} \\ E_{\text{osc}} \end{pmatrix} &= \frac{4(\varepsilon_0 \mu_0)^{1/4} L}{\pi^2 d \sqrt{2\Delta}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mu_0 \end{pmatrix} \times \\ &\times \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{3/2}} \cos 2\pi l \frac{\Phi}{\Phi_0} \sin \left( 2\pi l \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} - \frac{\pi}{4} \right) \frac{\lambda_l}{\text{sh } \lambda_l}, \quad (10) \end{aligned}$$

где  $\lambda_l = \pi^2 l T / (\varepsilon_0 \mu_0)^{1/2}$ . Функции (10) испытывают осцилляции, похожие на осцилляции де Гааза–ван Альфена, и осцилляции Ааронова–Бома с изменением величины  $\mu_0^{1/2}$ , связанной с плотностью электронов и магнитного потока  $\Phi$ . Первые обусловлены прохождением корневых особенностей плотности состояний (2) на границах минизон через энергию Ферми. Это сближает рассматриваемые осцилляции с обычными осцилляциями де Гааза–ван Альфена в квантующем магнитном поле [24]. Однако неэквидистантность уровней энергии поперечного движения электронов на трубке приводит к появлению  $(\mu_0/\varepsilon_0)^{1/2}$  в фазе осцилляций (10). Эти осцилляции существуют и в отсутствие магнитного поля. Их период равен  $\tau = 1/\sqrt{2m_* a}$ . Измерение периода позволяет получить эффективную массу электрона. Амплитуда осцилляций убывает с ростом температуры, как и в случае обычного эффекта де Гааза–ван Альфена в квантующем магнитном поле [24]. Предсказанные в работах [21,25] осцилляции Ааронова–Бома в многосвязных нормальных и сверхпроводящих системах проявляются во многих явлениях [26–28].

Из формулы (10) получаем осциллирующую часть теплоемкости нанотрубки:

$$\begin{aligned} C_{\text{osc}} &= \frac{4\mu_0 L}{d \sqrt{2\Delta} (\varepsilon_0 \mu_0)^{1/4}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{l}} \cos \left( 2\pi l \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \times \\ &\times \sin \left( 2\pi l \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} - \frac{\pi}{4} \right) \frac{1}{\text{sh } \lambda_l} (1 - \lambda_l \text{cth } \lambda_l). \quad (11) \end{aligned}$$

С ростом температуры монотонная часть теплоемкости (8) превышает осциллирующую часть (11), если  $T > \mu_0 (\mu_0/\varepsilon_0)^{1/4}$ .

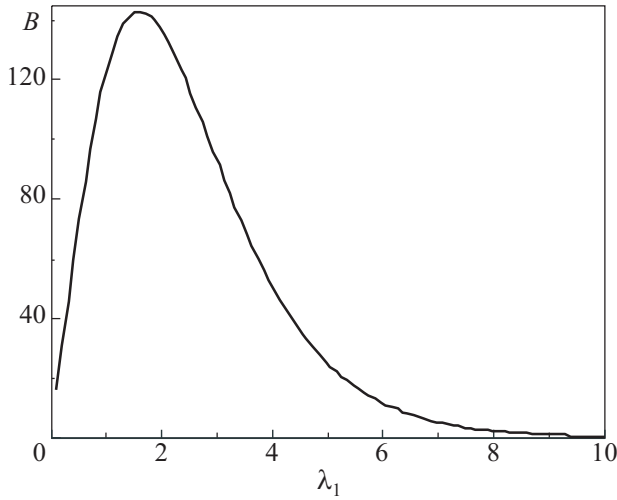


Рис. 2. Температурная зависимость амплитуды осциллирующей части теплоемкости (11) для значений параметров, приведенных в тексте.

На рис. 2 показана зависимость амплитуды основной гармоники осциллирующей части теплоемкости (11)

$$B = \frac{4}{\sqrt{2}} \frac{L}{d} \left( \frac{\epsilon_0}{\Delta} \right)^{1/2} \left( \frac{\mu_0}{\epsilon_0} \right)^{3/4} \frac{\lambda_1 \operatorname{cth} \lambda_1 - 1}{\operatorname{sh} \lambda_1}$$

от температуры при  $\Phi/\Phi_0 = 0,1$  для значений параметров GaAs, которые обычно используются в экспериментах [11]:  $m_* = 0,07m_0$  ( $m_0$  — масса свободного электрона),  $a = 10^{-6}$  см,  $\mu_0/\epsilon_0 = 10$ ,  $L = 10$  мкм,  $\Delta = 1$  мэВ,  $d = 3500$  Å. Амплитуда  $B$  достигает максимального значения при температуре  $T_m \propto (\epsilon_0\mu_0)^{1/2}$ .

### Невырожденный электронный газ

При заданном числе электронов химический потенциал невырожденного электронного газа определяется из уравнения

$$N = \sum_{mk\sigma} \exp[\beta(\mu - \epsilon_{mk\sigma})], \quad (12)$$

где  $\beta$  — обратная температура. Входящие в это уравнение суммы вычисляются точно. Для вычисления суммы по  $m$  используем формулу [29]

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp[-x(m+\nu)^2] = \sqrt{\frac{\pi}{x}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{\pi^2 l^2}{x}\right] \cos 2\pi l \nu, \quad x > 0.$$

Сумма по  $k$  сводится к модифицированной функции Бесселя 1-го рода [30]

$$I_0(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\phi \cdot e^{x \cos \phi}.$$

В результате решение уравнения (12) имеет вид

$$\mu = \frac{1}{\beta} \ln \left\{ \frac{Nd}{2L} \sqrt{\frac{\beta\epsilon_0}{\pi}} e^{\beta\Delta} \times \left[ \operatorname{ch} \beta\mu_B B I_0(\beta\Delta) \left( 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{\pi^2 l^2}{\beta\epsilon_0}\right) \cos 2\pi l \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \right]^{-1} \right\}. \quad (13)$$

Отсюда видно, что химический потенциал испытывает осцилляции Ааронова–Бома с изменением магнитного потока через сечение трубки. Осцилляции, похожие на осцилляции де Гааза–ван Альфена, в этом случае отсутствуют. В отсутствие сверхрешетки они рассматривались в статье [31].

Энергия электронного газа вычисляется по формуле

$$E = -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \sum_{mk\sigma} \exp(-\beta\epsilon_{mk\sigma}).$$

Она равна

$$E = \frac{N}{2\beta} \left\{ 2\beta\epsilon_0 \left\langle \left( m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 \right\rangle + 1 - 2\beta\Delta \left[ 1 - \frac{I'_0(\beta\Delta)}{I_0(\beta\Delta)} \right] - 2\beta\mu_B B \operatorname{th} \beta\mu_B B \right\}, \quad (14)$$

где

$$\langle P_m \rangle = \frac{\sum_m P_m \exp(-\beta\epsilon_m)}{\sum_m \exp(-\beta\epsilon_m)}, \quad \epsilon_m = \epsilon_0 \left( m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2.$$

Штрихом отмечена производная по аргументу функции Бесселя.

Теплоемкость электронного газа равна

$$C = \frac{N}{2} \left\{ 2(\beta\epsilon_0)^2 \left[ \left\langle \left( m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^4 \right\rangle - \left\langle \left( m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 \right\rangle^2 \right] + 1 + 2(\beta\Delta)^2 \times \left[ I_0''(\beta\Delta) I_0(\beta\Delta) - (I_0'(\beta\Delta))^2 \right] [I_0(\beta\Delta)]^{-2} + 2 \left( \frac{\beta\mu_B B}{\operatorname{ch} \beta\mu_B B} \right)^2 \right\}. \quad (15)$$

Отдельные слагаемые в формулах (14) и (15) соответствуют слагаемым в энергии (1). Первое слагаемое в правой части формулы (14) представляет собой среднюю энергию кругового движения электронов на поверхности нанотрубки, второе и третье слагаемые обусловлены продольным движением электронов вдоль трубки, а последнее слагаемое связано со спиновым расщеплением уровней энергии электрона в магнитном поле. Оно совпадает с энергией двухуровневой системы с расстоянием между уровнями  $2\mu_B B$ . Из формулы (15) видно, что магнитное поле не влияет на сла-

гаемое в теплоемкости, обусловленное продольным движением электронов. В свою очередь, модуляция не сказывается на теплоемкости, связанной с круговым движением электронов и спиновым расщеплением уровней.

Используя представление функции Бесселя в виде ряда и ее асимптотику, убеждаемся в том, что «продольная» часть теплоемкости (15) равна

$$C_{\parallel} = \frac{N}{2} \left\{ 1 + 2(\beta\Delta)^2 \left[ I_0''(\beta\Delta) I_0(\beta\Delta) - (I_0'(\beta\Delta))^2 \right] \left[ I_0(\beta\Delta) \right]^{-2} \right\} = \begin{cases} \frac{N}{2}, & \beta\Delta \ll 1, \\ N, & \beta\Delta \gg 1. \end{cases}$$

Этот результат согласуется с классической теоремой о равномерном распределении энергии по степеням свободы [24]. Его физический смысл очевиден. Если энергия теплового движения электронов  $\beta^{-1}$  мала по сравнению с амплитудой модулирующего потенциала, электроны совершают малые колебания в ямах модулирующего потенциала. Эти колебания дают вклад в теплоемкость, равный  $N$ . Если же  $\beta^{-1}$  превышает амплитуду  $\Delta$  модуляции, электроны совершают свободное движение вдоль трубки. Вклад этого движения в теплоемкость равен  $N/2$ . Таким образом, слагаемое  $C_{\parallel}$  с ростом температуры монотонно убывает от значения  $N$  к  $N/2$ . «Поперечная» часть теплоемкости зависит от магнитного потока. В слабых магнитных полях  $\Phi \ll \Phi_0$ , что позволяет пренебречь влиянием магнитного поля на «поперечную» часть теплоемкости  $C_{\perp}$ . Тогда из (15) получим для нее предельные выражения\*:

$$C_{\perp} = \begin{cases} N/2, & \beta\epsilon_0 \ll 1, \\ N(\beta\epsilon_0)^2 \exp(-\beta\epsilon_0), & \beta\epsilon_0 \gg 1. \end{cases}$$

Как и следовало ожидать, высокотемпературный предел  $C_{\perp}$  соответствует теореме о равномерном распределении энергии по степеням свободы.

### Заключение

Сверхрешетка на поверхности нанотрубки существенно влияет на ее свойства. Она может быть получена путем внедрения фуллеренов или других примесных центров в нанотрубку [32,33], а также в том случае, когда нанотрубка находится на подложке, с которой она обменивается зарядом [34]. В отсутствие сверхрешетки спектр трубки в продольном магнитном поле представляет собой набор одномерных соприкасающихся подзон, границы которых неэквидистантны. Периодический модулирующий потенциал, искусст-

венно созданный на поверхности трубки, превращает этот спектр в систему минизон, ширины которых определяются амплитудой модулирующего потенциала. В продольном магнитном поле его амплитуда и период не зависят от напряженности магнитного поля. Минизоны разделены энергетическими щелями, ширины которых определяются отношением ширины минизоны к величине вращательного кванта и зависят от напряженности магнитного поля. Плотность электронных состояний имеет корневые особенности на границах минизон. С ростом радиуса трубки минизоны перекрываются, ее спектр становится сплошным.

В работе рассчитаны плотность состояний, химический потенциал, энергия и теплоемкость вырожденного и невырожденного электронного газа на поверхности нанотрубки с металлическим характером проводимости в продольном магнитном поле. Показано, что упомянутые термодинамические величины содержат монотонные и осциллирующие части. В соответствии с принципом Паули монотонная часть теплоемкости вырожденного электронного газа пропорциональна температуре. Теплоемкость испытывает осцилляции, похожие на осцилляции де Гааза–ван Альфена, обусловленные прохождением особенностей плотности состояний через границу Ферми с изменением плотности электронов. Эти осцилляции сохраняются и в отсутствие магнитного поля. Теплоемкость испытывает также осцилляции Ааронова–Бома с изменением магнитного потока через сечение трубки. Изучение теплоемкости позволяет проследить за переходом от режима локализованных в ямах модулирующего потенциала состояний электронов к режиму их свободного движения вдоль трубки.

Авторы выражают благодарность В.М. Гвоздикову за обсуждение результатов работы.

1. И.М. Лифшиц, *Избранные труды. Электронная теория металлов. Полимеры и биополимеры*, Наука, Москва (1994).
2. И.М. Лифшиц, В.Г. Песчанский, *ЖЭТФ* **35**, 1251 (1958).
3. И.М. Лифшиц, В.Г. Песчанский, *ЖЭТФ* **38**, 188 (1960).
4. В.Г. Песчанский, *ФНТ* **23**, 47 (1997) [*Low Temp. Phys.* **23**, 35 (1997)].
5. О.В. Кириченко, И.В. Козлов, Д. Крстовска, В.Г. Песчанский, *ФНТ* **34**, 681 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 538 (2008)].
6. О. Галбова, О.В. Кириченко, В.Г. Песчанский, *ФНТ* **35**, 1034 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 810 (2009)].
7. Ф.Г. Басс, А.А. Булгаков, А.П. Тетервов, *Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками*, Наука, Москва (1989).
8. М. Херман, *Полупроводниковые сверхрешетки*, Мир, Москва (1989).

\* Пользуемся случаем отметить, что показатель степени 2 у  $\beta\epsilon_0$  в формуле (18) в статье [31] пропущен.

9. Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн, *Электронные свойства двумерных систем*, Мир, Москва (1985).
10. A.V. Chaplik, *Solid State Commun.* **53**, 539 (1985).
11. F.M. Peeters and P. Vasilopoulos, *Phys. Rev.* **B46**, 4667(1992).
12. V.M. Gvozdkov, A.M. Ermolaev, I.D. Vagner, and R. Vega-Monroy, *Physica* **B284-288**, 1734 (2000).
13. K. Sabeeh and M. Tahir, *Phys. Rev.* **B71**, 035325 (2005).
14. V.M. Gvozdkov, *Phys. Rev.* **B72**, 075135 (2005).
15. V.M. Gvozdkov, *Phys. Rev.* **B75**, 115106 (2007).
16. A. Matulis and F.M. Peeters, *Phys. Rev.* **B75**, 125429 (2007).
17. V.M. Gvozdkov and M. Taut, *New J. Phys.* **11**, 063005 (2009).
18. S. Iijima, *Nature (London)* **354**, 56 (1991).
19. Л.И. Магарилл, А.В. Чаплик, М.В. Энтин, *УФН* **175**, 995 (2005).
20. О.П. Волосникова, Д.В. Завьялов, С.В. Крючков, *Труды XVII международного совещания «Радиационная физика твердого тела»*, Севастополь (2007), с. 645.
21. И.О. Кулик, *Письма в ЖЭТФ* **11**, 407 (1970).
22. Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Лёш, *Специальные функции*, Наука, Москва (1977).
23. А. Эрдейи, *Асимптотические разложения*, ГИФМЛ, Москва (1962).
24. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1995).
25. И.О. Кулик, *ЖЭТФ* **58**, 2171 (1970).
26. А.А. Звягин, И.В. Криве, *ФНТ* **21**, 687 (1995) [*Low Temp. Phys.* **21**, 533 (1995)].
27. V.M. Gvozdkov, *Fiz. Nizk. Temp.* **26**, 648 (2000) [*Low Temp. Phys.* **26**, 471 (2000)].
28. I.O. Kulik, *Fiz. Nizk. Temp.* **36**, 1057 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 841 (2010)].
29. А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев, *Интегралы и ряды. Элементарные функции*, Наука, Москва (1981).
30. Г. Бейтмен и А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 2, Наука, Москва (1966).
31. A.M. Ermolaev, G.I. Rashba and M.A. Solyanik, *Eur. Phys. J.* **B73**, 383 (2010).
32. J. Lee, H. Kim, S.-J. Kahng, G. Kim, Y.-W. Son, J. Ihm, H. Kato, Z.W. Wang, T. Okazaki, H. Shinohara, and Y. Kuk, *Nature* **415**, 1005 (2002).
33. А.Н. Король, *Письма в ЖЭТФ* **59**, 659 (1994).
34. H.-J. Shin et al., *Nature Nanotech.* **4**, 567 (2009).

### Heat capacity of electron superlattice gas on the nanotube surface in magnetic field

A.M. Ermolaev, G.I. Rashba, and M.A. Solyanik

The effect of modulating potential of the nanotube surface on heat capacity of degenerate and nondegenerate electron gas in a longitudinal magnetic field is considered. This thermodynamic value is represented by oscillating and monotonic terms. The heat capacity of degenerate electron gas exhibits de Haase–van Alphen type oscillations dependent on density of electrons and Aharonov–Bohm type ones dependent on intensity of magnetic flux through the nanotube cross-section. As for nondegenerate electron gas there occur only Aharonov–Bohm type oscillations. Investigation into heat capacity makes it possible to follow the transition from the localized condition of electrons in modulating potential wells to their free motion along the tube. The limiting transition to a two-dimensional superlattice gas is considered.

PACS: **73.63.Fg** Nanotubes;  
**65.80.+n** Thermal properties of small particles, nanocrystals and nanotubes;  
**65.40.Ba** Heat capacity;  
**74.78.Fk** Multilayers, superlattices, heterostructures.

Keywords: nanotube, superlattice, degenerate and nondegenerate electron gas, heat capacity, magnetic field.