

Индукцированная взаимодействием щель в спектре электронов и киральные эффекты в металлических углеродных нанотрубках

А.Д. Шкоп¹, С.И. Кулинич¹, А.В. Парафило², И.В. Криве^{1,3}

¹Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Науки, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: krive@ilt.kharkov.ua

²The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, 11 Strada Costiera, I-34151 Trieste, Italy

³Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61000, Украина

Статья поступила в редакцию 8 сентября 2017 г., опубликована онлайн 25 октября 2017 г.

Изучено влияние электрон-фононного взаимодействия на спектр и транспортные характеристики дираковских электронов в металлических однослойных углеродных нанотрубках. Показано, что псевдомангнитная часть потенциала взаимодействия электронов с поперечными акустическими фононами индуцирует щель в спектре электронов. Рассмотрены два механизма образования щели: пайерлсовский фазовый переход и корреляционный механизм за счет виртуального обмена электронов поперечными фононами. Рассчитана вероятность рассеяния массивных дираковских фермионов на скалярном (электростатическом) потенциале конечного размера и найдены индуцированные электрон-электронными корреляциями перенормировки затравочной амплитуды рассеяния.

Вивчено вплив електрон-фононої взаємодії на спектр та транспортні характеристики діраківських електронів в одношарових вуглецевих нанотрубках. Показано, що псевдомагнітна частина потенціалу взаємодії електронів з поперечними фононами індукує щілину в спектрі електронів. Розглянуто два механізми утворення щілини: пайерлсовський фазовий перехід та кореляційний механізм за рахунок віртуального обміну електронів поперечними фононами. Розраховано вірогідність розсіювання масивних діраківських ферміонів на скалярному (електростатичному) потенціалі скінченного розміру та знайдено індуквані електрон-електронними кореляціями перенормування первинної амплітуди розсіювання.

PACS: **73.63.-b** Электронный транспорт в наноразмерных материалах и структурах;
73.63.Fg Нанотрубки;
73.40.Gk Туннелирование.

Ключевые слова: киральная нанотрубка, парадокс Клейна, пайерлсовский переход, электрон-электронные корреляции.

Введение

Однослойные углеродные нанотрубки (SWNT) являются перспективными материалами для наноэлектроники [1]. В зависимости от киральных индексов, характеризующих углеродную нанотрубку, SWNT могут быть металлическими и полупроводниковыми. Многочисленные эксперименты показывают, что электронный транспорт в металлических SWNT является баллистическим [2]. Это важное обстоятельство делает свободно вибрирующие углеродные нанотрубки (нанотрубки, подвешенные на токоподводящих клеммах) наноэлек-

тро-механическими системами (NEMS), позволяющими изучать квантовые эффекты как в электронной, так и в механической (фононной) подсистемах [3].

Транспортные свойства металлических нанотрубок характеризуются целым рядом необычных эффектов. Одномерный характер движения электронов в нанотрубках и сильное слабоэкранированное кулоновское взаимодействие в них носителей заряда во многих случаях позволяет рассматривать электроны в металлических SWNT как латтинджеровскую жидкость. Это обстоятельство приводит к нелинейной («неомической») зависимости тока от напряжения и контактного сопротивления от темпера-

туры, что является следствием эффекта Кейна–Фишера [4] — сильной перенормировки электрон-электронным $e-e$ взаимодействием затравочного локального потенциала, рассеивающего электроны назад ($k_F \rightarrow -k_F$).

Другим, во многом противоположным, эффектом, характеризующим транспортные свойства металлических нанотрубок, является парадокс Клейна [5,6] — отсутствие рассеяния назад на электростатических потенциалах одномерных ультра-релятивистских фермионов. Для металлических SWNT именно парадокс Клейна объясняет баллистический характер транспорта электронов в длинных нанотрубках [2]. Отсутствие рассеяния назад дираковских электронов на электростатическом (скалярном) потенциале формально объясняется сохранением спиральности электронов в металлических нанотрубках. Скалярный потенциал не может изменить псевдоспин электрона в SWNT, и рассеяние назад становится невозможным, так как при этом процессе спиральность должна менять знак. Однако электрон-фононное взаимодействие в SWNT приводит к появлению псевдомагнитного («векторного») потенциала, что позволяет рассеивать электроны, изменяя только скорость на противоположную, $v_F \rightarrow -v_F$. Это так называемое внутримолекулярное ($\Delta k \sim 0$) рассеяние электронов, которое чувствительно к углу киральности нанотрубки. Оно характеризуется необычной (осциллирующей) зависимостью амплитуды рассеяния от характеристик рассеивателя. В литературе такой вид прохождения электронов через внешний потенциал получил название «кирального туннелирования». Теория кирального туннелирования для невзаимодействующих электронов в металлических нанотрубках предложена в работах [7,8].

В настоящей работе изучено влияние электрон-электронных корреляций на киральное туннелирование. Предполагается, что электрон-электронное взаимодействие слабое и может быть учтено приближенными методами (теория возмущений, среднее поле, ренорм-групповые методы). Известно, что в латтинжеровской жидкости рассеяние электронов вперед не перенормируется $e-e$ взаимодействием [9]. На первый взгляд, этот результат делает бесперспективным поиск эффектов перенормировки взаимодействием кирального туннелирования. Действительно, для безмассовых (металлических) дираковских фермионов учет эффектов взаимодействия в приближении Хартри–Фока приводит к тривиальному выводу — коэффициент прохождения электронов через псевдомагнитный потенциал не перенормируется взаимодействием. Однако мы показываем, что псевдомагнитное взаимодействие, порождаемое взаимодействием электронов в SWNT с акустическими фононами, может приводить к появлению щели в спектре электронов.

Мы рассмотрели два подхода к расчету щели: 1) метод среднего поля и появление пайерлсовской щели в спектре электронов и 2) приближение Хартри–Фока.

Анализ пайерлсовского перехода и появление щели в спектре электронов на уровне Ферми, индуцированное псевдомагнитным потенциалом, показал, что внутримолекулярные переходы электронов ($\Delta k \sim 0$) действительно генерируют щель. Эта щель не зависит от угла киральности нанотрубки и имеет стандартную для теории пайерлсовского фазового перехода экспоненциальную зависимость от константы электрон-фононного взаимодействия. Для углеродных нанотрубок численные значения пайерлсовской щели оказались пренебрежимо малыми.

Более перспективным является сценарий, когда щель в спектре электронов появляется за счет электрон-электронных корреляций. Матричный характер потенциала электрон-электронного взаимодействия в SWNT дает принципиальную возможность появления такой щели. Мы показываем, что щель возникает только при допировании нанотрубки, зависит от кирального угла и ее величина пропорциональна произведению констант деформационного и псевдомагнитного потенциалов. Для свободно вибрирующих (“suspended”) SWNT корреляционная щель пропорциональна длине нанотрубки и растет с ростом температуры.

Появление щели в спектре электронов приводит к нетривиальным перенормировкам (латтинжеровского типа) коэффициента прохождения электронов через электростатический потенциал. Нами проведен расчет перенормированного взаимодействием затравочного коэффициента прохождения в рамках уравнения Хартри–Фока и метода ренорм-группы для суммирования сингулярных слагаемых в теории возмущений. Получена формула для перенормируемого коэффициента прохождения, аналогичная по форме выведенным ранее формулам в жидкости Латтинжера [10]. В частности, из этой формулы следует, что в отсутствие щели в спектре электронов ($\Delta = 0$) коэффициент прохождения не перенормируется, что, по существу, является демонстрацией парадокса Клейна.

Внутримолекулярное рассеяние электронов на акустических фононах и пайерлсовская щель

В однослойной углеродной нанотрубке динамика электронов является эффективно одномерной. Гамильтониан электронов имеет вид

$$\hat{H}_{\pm} = \pm \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & e^{\pm i\theta} \hat{k}_x \\ e^{\mp i\theta} \hat{k}_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

в котором знак « \pm » определяет тип долины (k_F и $-k_F$ соответственно), v_F — фермиевская скорость, θ — угол киральности нанотрубки ($0 < \theta < \pi/6$, где $\theta = 0$ характеризует SWNT типа “armchair”, $\theta = \pi/6$ — SWNT типа “zigzag”), $\hat{k}_x = -i\partial/\partial x$, ось x направлена вдоль оси нанотрубки (рис. 1) [11]. В настоящей работе рассмотрены процессы, которые не приводят к элек-

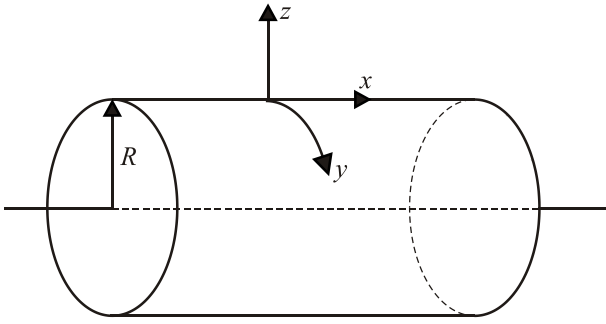


Рис. 1. Схематическое изображение однослойной углеродной нанотрубки радиуса R . Показана система координат, в которой определен тензор деформации u_{ij} нанотрубки.

тронным переходам между долинами и, следовательно, долины можно рассматривать независимо.

Вначале рассмотрим возможность появления щели в спектре дираковских электронов в металлической однослойной углеродной нанотрубке за счет пайерлсовского фазового перехода. Напомним, что в стандартной теории пайерлсовского фазового перехода [13] щель в спектре 1D электронов проводимости возникает за счет электрон-фононного взаимодействия, рассматриваемого в приближении среднего поля. Появление щели на уровне Ферми обязано фононам с импульсом $q = 2k_F$, которые рассеивают электроны назад, $k_F \rightarrow -k_F$. Такие фононы имеют высокие (оптические) частоты, и для углеродных нанотрубок они приводят к междолинному рассеянию электронов. Теория пайерлсовского фазового перехода с учетом электрон-электронных корреляций (в латтинжеровской жидкости) подробно рассмотрена в работе [14]. Для углеродных нанотрубок пайерлсовская щель исключительно мала [15] и ею можно пренебречь при изучении транспортных свойств нанотрубок при конечных температурах.

Нас будет интересовать внутримолекулярное рассеяние электронов ($\Delta k \sim 0$), индуцированное взаимодействием с акустическими фононами. Без учета дираковской (спинорной) структуры волновых функций электронов это взаимодействие не приводит к образованию щели, и для свободных электронов вклад акустических фононов сводится к незначительной, порядка $(v/v_F)^2 \ll 1$ (v — скорость звука), перенормировке фермиевской скорости [16]. Для углеродных нанотрубок электрон-фононное взаимодействие имеет матричный вид [12]:

$$H_{e-ph}^{(+)} = \begin{pmatrix} V_d & V_2 \\ V_2^* & V_d \end{pmatrix}, \quad H_{e-ph}^{(-)} = \begin{pmatrix} V_d & -V_2^* \\ -V_2 & V_d \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где индексы « \pm » обозначают электронные долины, соответствующие $\pm k_F$. Зависимость от угла киральности в гамильтониане (1) удобно перенести в недиагональные элементы матрицы электрон-фононного взаимодействия (2) с помощью унитарного преобразования

$$P = P^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & e^{\pm i\theta/2} \\ e^{\mp i\theta/2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

В дальнейшем будем предполагать, что недиагональный (псевдомангнитный) потенциал в выражении (2) выбран с учетом такого вращения, что приводит к зависимости матричных элементов псевдомангнитного потенциала от угла киральности θ .

Диагональный потенциал V_d в выражении (2) — обычный деформационный потенциал

$$V_d = g_1(u_{xx} + u_{yy}), \quad (4)$$

u_{jk} — компоненты тензора деформаций, $g_1 = \epsilon_F$. Недиагональный комплексный потенциал V_2 , как было уже отмечено, специфичен для углеродных нанотрубок (см. [12], с учетом переобозначения координат)

$$V_2 = g_2 e^{-i\xi} (u_{yy} - u_{xx} + 2iu_{xy}) \quad (5)$$

($\xi = 2\theta$ — эффективный киральный угол). Константа g_2 пропорциональна интегралу перекрытия между атомами углерода в двухподрешеточной модели гексагональной решетки и значительно меньше константы деформационного потенциала, $g_2 \ll g_1$ ($g_2 = 1,5$ эВ, согласно оценкам работы [12]).

Легко видеть, что для постоянных значений потенциала (2) в спектре электронов появляется щель [8]

$$\epsilon(k) = V_d \pm \sqrt{(\hbar v_F k + V_{pm}^{(\pm)})^2 + \Delta^2}, \quad (6)$$

где

$$V_{pm}^{(\pm)} = \pm \text{Re } V_2 = \pm g_2 [(u_{yy} - u_{xx}) \cos \xi - 2u_{xy} \sin \xi], \quad (7)$$

$$\Delta = \text{Im } V_2 = g_2 [(u_{yy} - u_{xx}) \sin \xi + 2u_{xy} \cos \xi].$$

Для нахождения равновесной пайерлсовской щели Δ_P при нулевой температуре необходимо минимизировать полную энергию системы, состоящую из энергий заполненных «ферми-подвалов» двух долин электронного спектра (рис. 2) и упругой энергии нанотрубки. Для постоянных значений компонент тензора деформаций плотность упругой энергии нанотрубки радиуса R имеет вид [12]

$$U_e = 2\pi R \left\{ \frac{B}{2} (u_{xx} + u_{yy})^2 + \frac{S}{2} [(u_{xx} - u_{yy})^2 + 4u_{xy}^2] \right\}, \quad (8)$$

где константы B и S (мы придерживаемся обозначений обзора [12]) определяют модуль всестороннего сжатия и модуль сдвига плоскости графита.

Опуская несущественную для нас постоянную сдвигу (V_d) энергий в (6) и суммируя по импульсам вплоть до максимальных значений $k_F = \epsilon_F / \hbar v_F$, для полной плотности энергии нанотрубки находим ($\hbar = v_F = 1$)

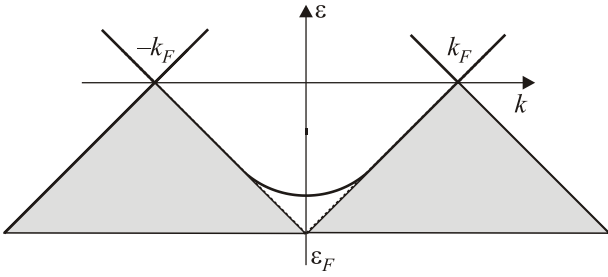


Рис. 2. Две долины ($\pm k_F$) спектра дираковских электронов в металлической нанотрубке. Затемнены фермиевские «подвалы» заполненных электронных состояний. При расчете вклада электронов в полную энергию упруго деформированной нанотрубки спектр электронов считался линейным вплоть до энергий $\varepsilon_F = \hbar v_F k_F$ порядка ширины зоны проводимости.

$$E_t = \sum_{j=\pm} E_f^{(j)} + U_e, \quad (9)$$

$$E_f^{(\pm)} = -2 \int_{\pm k_F - k_F}^{\pm k_F + k_F} \frac{dk}{2\pi} \sqrt{(k + V_{pm}^{(\pm)})^2 + \Delta^2}$$

(статистический множитель “2” учитывает спин электрона). Для слабых констант электрон-фононного взаимодействия псевдомагнитный потенциал V_{pm} и пайерлсовская щель Δ значительно меньше фермиевской энергии ε_F . В этом пределе система уравнений $\partial E_t / \partial u_{jk} = 0$ имеет простой вид:

$$\frac{g_2 \sin \xi}{\pi^2 R} F\{u_{ij}\} = B(u_{xx} + u_{yy}) + S(u_{xx} - u_{yy}),$$

$$-\frac{g_2 \sin \xi}{\pi^2 R} F\{u_{ij}\} = B(u_{xx} + u_{yy}) - S(u_{xx} - u_{yy}), \quad (10)$$

$$\frac{g_2 \cos \xi}{2\pi^2 R} F\{u_{ij}\} = S u_{xy},$$

где

$$F\{u_{jk}\} = \Delta \ln \frac{4\varepsilon_F}{|V_{pm}| + \sqrt{V_{pm}^2 + \Delta^2}}. \quad (11)$$

Из (10) следует, что

$$u_{xx} + u_{yy} = 0, \quad u_{xy} = \text{ctg } \xi u_{xx}, \quad (12)$$

и, как следствие, деформационный (4) и псевдомагнитный (7) потенциалы равны нулю, $V_d = V_{pm}^{(\pm)} = 0$. Вследствие (12) выражение для упругой энергии (8) имеет стандартный вид для пайерлсовского диэлектрика [17,18]:

$$U_e = \frac{\Delta^2}{2g_{\text{eff}}^2}, \quad g_{\text{eff}}^2 \equiv \frac{g_2^2}{\pi R S}. \quad (13)$$

Кроме того, система (10) позволяет определить равновесное выражение для щели в (13). В результате формула для пайерлсовской щели предсказывает обычную

для теории слабой связи экспоненциальную зависимость от константы электрон-фононного взаимодействия:

$$\Delta_P \approx \pm 4\varepsilon_F \exp\left(-\pi^2 \hbar v_F \frac{RS}{g_2^2}\right). \quad (14)$$

Модуль сдвига S легко выражается через экспериментально измеряемую скорость поперечных фононов в нанотрубке, $v_t = \sqrt{S/M}$ (здесь M — плотность массы углеродных атомов в графене). Пайерлсовская щель (14) при $R \rightarrow \infty$ исчезает (как и должно быть для графена). Экспоненциальная зависимость величины щели от слабой для углеродных нанотрубок константы g_2 приводит к аномально малой численной величине Δ_P , которой можно пренебречь в реальных экспериментах с углеродными нанотрубками. Тем не менее принципиальная возможность появления щели в спектре за счет рассеяния дираковских электронов на акустических фононах, на наш взгляд, представляет интерес.

Заметим, что угол киральности ξ не входит в равновесное значение Δ_P . Поэтому теория пайерлсовского перехода, индуцированного внутридолинным ($\Delta k \sim 0$) электрон-фононным рассеянием, полностью эквивалентна теории 1D пайерлсовского диэлектрика [17,18]. В частности, теория предсказывает существование топологических солитонов (антисолитонов) параметра порядка $\Delta(x) = \pm \Delta_P \text{th} \left[\Delta_P (x - x_0) / \sqrt{2} \hbar v_F \right]$ с локализованным на солитоне двукратно вырожденным по спину электронным уровнем с $\omega_f = 0$. Энергия такого солитона $E_s = 2\Delta_P / \pi < \Delta_P$, и поэтому при допировании электроны образуют солитон-антисолитонный вигнеровский кристалл (периодически расположенные солитоны и антисолитоны с локализованными на них электронными состояниями). Физически очевидно, что при температурах $T \geq \Delta_P$ пайерлсовская щель в спектре пропадает и в нашем случае (SWNT) описанная выше картина «солитонного транспорта» зарядов в пайерлсовском диэлектрике относится к области сверхнизких температур. Более реалистичным является сценарий, развиваемый в следующем параграфе, когда щель в спектре электронов возникает за счет электрон-электронных корреляций (вызванных виртуальным обменом акустическими фононами) при допировании металлической SWNT.

Индукцированная электрон-электронными корреляциями киральная щель

Для дираковских электронов в однослойных углеродных нанотрубках электрон-фононное взаимодействие имеет матричную структуру (см. формулы (2), (4), (5)). Как следствие, генерируемое во втором порядке теории возмущений по константе связи электрон-электронное взаимодействие (рис. 3) также имеет матричный вид. Для наших целей интерес представляет та часть этого взаимодействия (пропорциональная матрице σ_2, σ_i —

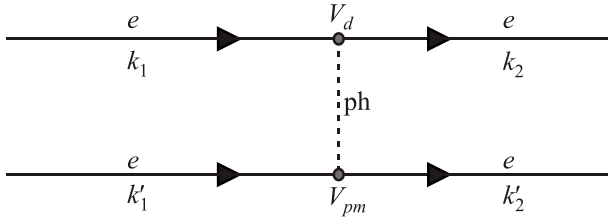


Рис. 3. Диаграмма электрон-электронного рассеяния вперед, $|k_2 - k_1| = |k_2' - k_1'| \equiv \Delta k \sim 0$, порождающая статический потенциал электрон-электронного взаимодействия, который в свою очередь индуцирует корреляционную щель в спектре электронов. V_d , V_{pm} — амплитуды деформационного и псевдомагнитного потенциалов соответственно.

матрицы Паули), которая индуцирует щель в спектре дираковских электронов:

$$\hat{H}_D = \hbar v_F \sigma_1 \hat{k} + \sigma_2 \Delta_{\text{eff}}. \quad (15)$$

Структура электрон-фононного потенциала (2) показывает, что искомое взаимодействие пропорционально произведению констант деформационного и псевдомагнитного потенциалов (4), (5), т.е. $W_2 \sim g_1 g_2$. Используя диаграмму, рис. 3, нетрудно оценить зависимость корреляционного потенциала от импульса и кирального угла. Для статического случая (пренебрегая эффектами запаздывания)

$$W_2 \sim -g_1 g_2 \frac{\langle \hat{u}_x^2 \rangle}{\hbar^2 v_t^2} \sin \xi \left(\frac{S}{B+S} \right)^2. \quad (16)$$

Здесь B , S — модули упругости, введенные в предыдущей главе, $\langle \hat{u}_x^2 \rangle$ — квадрат амплитуды нулевых колебаний нанотрубки. Отметим, что для изгибных колебаний подвешенной нанотрубки эта величина пропорциональна длине трубки L и может достигать значительных величин для реализуемых в эксперименте [3] вибрирующих нанотрубок ($L \sim 10^3$ нм). Отметим также, что при температурах много больших характерных энергий изгибных колебаний термически активированные колебания приводят к линейной зависимости корреляционного потенциала от температуры.

Согласно (16), W_2 не зависит от импульса, что приводит к локальному (δ -функциональному) потенциалу электрон-электронных корреляций, $W_2(x) \sim \hbar v_F \delta(x)$. Ниже будет показано, что в приближении Хартри–Фока корреляционная щель для этого случая обращается в нуль. Поэтому в дальнейшем будем моделировать потенциал электрон-электронных корреляций в виде «размазанной» на длине λ δ -функции, где λ — характерная длина релаксации в фононной подсистеме:

$$W_2(x) \sim \hbar v_F \frac{\lambda}{\lambda^2 + x^2} W_2. \quad (17)$$

В приближении Хартри–Фока уравнение, учитывающее электрон-электронное взаимодействие, имеет вид

$$\hat{H} |\Psi(x)\rangle + \int dy \hat{W}(x-y) |\Psi(x)\rangle \sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(y) | \Psi_{\kappa}(y) \rangle - \int dy \hat{W}(x-y) |\Psi(y)\rangle \sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(y) | \Psi_{\kappa}(x) \rangle = E |\Psi(x)\rangle, \quad (18)$$

где $\hat{W}(x, y)$ — потенциал парного электрон-электронного взаимодействия,

$$\hat{W}(x, y) = \hat{W}(|x-y|) = W_0 + W_1 \sigma_1 + W_2 \sigma_2. \quad (19)$$

Первое слагаемое в (18) соответствует хартриевскому, а второе — фокковскому (обменному) типам взаимодействия.

Невозмущенное уравнение (18) (уравнение с $\hat{W}(x, y) = 0$) представляет собой свободное безмассовое одномерное уравнение Дирака ($\hbar = v_F = 1$)

$$-i\sigma_1 \frac{\partial |\Psi(x)\rangle}{\partial x} = E |\Psi(x)\rangle, \quad (20)$$

с базисными решениями $|\Psi(x)\rangle = |\Psi_{\kappa}(x)\rangle$, $\kappa = k, i = 1, 2$ — индекс состояния,

$$|\Psi_1(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ikx}, \quad |\Psi_2(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-ikx}, \quad (21)$$

и законом дисперсии $E = k$ (удобно выбрать классификацию состояний, в которой одному и тому же волновому числу k соответствует одна и та же энергия E).

Предполагаем, что система допирована до энергии $E_0 = E(K) = K$. Тогда базисные решения (21) порождают ядро в интегральном уравнении (18) вида

$$\sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(y) | \Psi_{\kappa}(x) \rangle \approx \frac{2 \sin K(x-y)}{x-y} \equiv F(x-y). \quad (22)$$

Поскольку ядро (22) — разностное, интегральное уравнение (18) допускает точное решение. В результате для $|\Psi(x)\rangle = |c\rangle e^{\pm ikx}$ получаем

$$\pm k \sigma_1 |c\rangle + \hat{A}(k) |c\rangle = E |c\rangle, \quad (23)$$

$$\hat{A}(k) = \int dx [F(0) - F(x) \cos kx] \hat{W}(x).$$

Из уравнения (23) следует, что если $\hat{A}(k) \sim \hat{I}$ — перенормируется энергия электронов, если $\hat{A}(k) \sim \sigma_1$ — перенормируется волновое число, и в настоящей работе эти перенормировки нас не интересуют. Наиболее интересный случай, как уже отмечалось, соответствует $\hat{A}(k) \sim \sigma_2$. Тогда, как следует из уравнений (23), в спектре возбуждений появляется щель

$$E = \sqrt{k^2 + \Delta^2(k)}, \quad \Delta(k) = \int dx [F(0) - F(x) \cos kx] W_2(x), \quad (24)$$

где $W_2(x)$ определяется выражениями (16), (17). Отметим, что в случае дельта-функционального потенциала взаимодействия, $W_2(x) \sim \hbar v_F \delta(x)$, щель в спектре возбуждений обращается в нуль. Кроме того, величина щели зависит от энергии допирования K , в отсутствие допирования величина щели также обращается в нуль.

С учетом (23), (24) базисные решения (21) модифицируются в выражения

$$|\psi_1(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} k - i\Delta \\ E \\ 1 \end{pmatrix} e^{ikx}, \quad |\psi_2(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} k + i\Delta \\ E \\ -1 \end{pmatrix} e^{-ikx}. \quad (25)$$

Первое (второе) из решений (25) представляет волну, распространяющуюся в положительном (отрицательном) направлении оси x .

Отметим, что для электронов с бесщелевым спектром базисные решения (21) из-за спинорной структуры ортогональны друг другу. Для решений (25) $\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \neq 0$. Это свойство приводит к радикальному отличию при рассмотрении влияния электрон-электронных корреляций на матричный элемент рассеяния электронов на электростатическом и псевдомагнитном внешних потенциалах.

Коэффициент прохождения для δ -функционального барьера

Как уже отмечалось, наличие энергетической щели в спектре нарушает условия парадокса Клейна для энергий $E \leq \Delta$, и при рассеянии одномерных невзаимодействующих дираковских фермионов на скалярных (электростатических) потенциалах появляется рассеяние назад. В качестве иллюстрации рассчитаем амплитуду коэффициента отражения дираковского фермиона при рассеянии на прямоугольном потенциальном барьере, $V(x) = V = \text{const}$, $0 < x < a$. При этом будем предполагать, что величина щели не зависит от волнового числа k , $\Delta = \text{const}$.

Стандартная процедура расчета амплитуды коэффициента отражения r с помощью сшивки волновых функций приводит к следующему выражению ($\hbar = v_F = 1$):

$$r = \frac{A_1 \sin ap_1}{2p_1 p_2 E(E - V) \sin ap_1 - iA_2 \cos ap_1}, \quad (26)$$

где $p_1 = \sqrt{(E - V)^2 - \Delta^2}$, $p_2 = \sqrt{E^2 - \Delta^2}$ и

$$A_1(E) = (p_1^2 - p_2^2)E^2 - (p_2^2 - \Delta^2)V^2 + 2p_2^2 EV - 2ip_2 \Delta V(E - V), \\ A_2(E) = (p_1^2 + p_2^2)E^2 + (p_2^2 + \Delta^2)V^2 - 2p_2^2 EV. \quad (27)$$

Амплитуду отражения для δ -функционального барьера r_0 проще всего получить предельным переходом $V \rightarrow \infty$, $a \rightarrow 0$, $aV \rightarrow V_0$. Тогда коэффициенты отражения и прохождения имеют вид

$$|r_0|^2 = \frac{\Delta^2 \sin^2 V_0}{E^2 - \Delta^2 \sin^2 V_0}, \quad |\tau_0|^2 = \frac{E^2 - 2\Delta^2 \sin^2 V_0}{E^2 - \Delta^2 \sin^2 V_0}. \quad (28)$$

Как легко проверить, коэффициент отражения (26)–(28) обращается в нуль при $\Delta = 0$, что является проявлением парадокса Клейна для ультрарелятивистских 1D фермионов. Отметим, что отличительная особенность кирального туннелирования (по сравнению с туннелированием нерелятивистских электронов) — осциллирующая зависимость коэффициента отражения от эффективной величины барьера V_0 . В частности, для δ -функционального барьера при $V_0 = \pi n$ ($n = 0, 1, \dots$) коэффициент прохождения $|\tau_0|^2 = 1$ ($r_0 = 0$) (резонансное прохождение). При $V_0 = \pi(n + 1/2)$ коэффициент отражения достигает максимальной величины, $r_0^{\text{max}} = \Delta / p_2$. Далее изучим влияния электрон-электронных корреляций на затравочный коэффициент прохождения (26)–(28).

Перенормировка коэффициента прохождения через локальный электростатический потенциал

Рассмотрим рассеяние взаимодействующих электронов на плавном потенциале $\hat{V}(x)$, заданном на конечном интервале $\hat{V}(|x| > d) = 0$ (предполагаем, что потенциал $\hat{V}(x)$ имеет только диагональные компоненты, т.е. потенциал инвариантен относительно унитарного преобразования (3)). Уравнение (18) в этом случае модифицируется к виду

$$-i\sigma_1 \frac{\partial |\Psi(x)\rangle}{\partial x} + \hat{V}(x) |\Psi(x)\rangle + \int dy \hat{W}(x - y) |\Psi(x)\rangle \sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(y) | \Psi_{\kappa}(y) \rangle - \int dy \hat{W}(x - y) |\Psi(y)\rangle \sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(y) | \Psi_{\kappa}(x) \rangle = E |\Psi(x)\rangle. \quad (29)$$

Для уравнения (29) естественно определить решения $\{|G_i^{(0)}\rangle\}$ асимптотиками при $x \rightarrow \pm\infty$:

$$|G_1^{(0)}(x)\rangle = \begin{cases} |\psi_1(x)\rangle + R_l^{(0)} |\psi_2(x)\rangle, & x \rightarrow -\infty \\ T_l^{(0)} |\psi_1(x)\rangle, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad (30) \\ |G_2^{(0)}(x)\rangle = \begin{cases} |\psi_2(x)\rangle + R_r^{(0)} |\psi_1(x)\rangle, & x \rightarrow +\infty \\ T_r^{(0)} |\psi_2(x)\rangle, & x \rightarrow -\infty \end{cases},$$

при этом коэффициенты $R_{\kappa}^{(0)}$, $T_{\kappa}^{(0)}$ — элементы унитарной \hat{S} -матрицы рассеяния:

$$\hat{S}_0 = \begin{pmatrix} R_l^{(0)} & T_r^{(0)} \\ T_l^{(0)} & R_r^{(0)} \end{pmatrix} = e^{i\varphi_1^{(0)}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \tau_0^2} e^{i\varphi_2^{(0)}} & i\tau_0 e^{i\varphi_3^{(0)}} \\ i\tau_0 e^{-i\varphi_3^{(0)}} & \sqrt{1 - \tau_0^2} e^{-i\varphi_2^{(0)}} \end{pmatrix}, \\ \hat{S}_0 \hat{S}_0^\dagger = 1, \quad (31)$$

где матрица рассеяния (31) параметризована стандартным образом через затравочный коэффициент прохождения τ_0 и фазы $\phi_i^{(0)}$. Решения (30) помимо ядра $F(x-y)$ порождают ядро $Q(x, y)$, описывающее фриделевские осцилляции:

$$\sum_{\kappa} \langle \Psi_{\kappa}(y) | \Psi_{\kappa}(x) \rangle \approx F(x-y) + Q(x, y), \quad (32)$$

где

$$Q(x, y) = \begin{cases} -R_r^{(0)} \frac{\Delta_0}{K + i\Delta_0} \frac{e^{iK(x+y)}}{x+y} + \text{н.с.}, & x, y > 0 \\ -R_l^{(0)} \frac{\Delta_0}{K - i\Delta_0} \frac{e^{-iK(x+y)}}{x+y} + \text{н.с.}, & x, y < 0 \end{cases} \quad (33)$$

и $\Delta_0 = \Delta(K)$ (см. формулу (24)). Это ядро перенормирует затравочные элементы \hat{S} -матрицы рассеяния. Отметим, что ядро $Q(x, y)$ отлично от нуля в меру параметра Δ_0 — эффективной щели в спектре электронных возбуждений.

Для нахождения перенормировок \hat{S} -матрицы удобно поступить следующим образом. Пусть $|G_i(x)\rangle$, $i = 1, 2$ — решения уравнения (29) с ядром (32), т.е. решения, имеющие те же асимптотики (30), но с перенормированными элементами \hat{S} -матрицы (которые не будем отмечать индексом «0»). Тогда нетрудно убедиться в справедливости тождества

$$\begin{aligned} & \langle G_i^{(0)}(\infty) \sigma_1 G_j(\infty) \rangle - \langle G_i^{(0)}(-\infty) \sigma_1 G_j(-\infty) \rangle = \\ & = -i \int dx \langle G_i^{(0)}(x) \hat{L} \{ G_j^{(0)}(x) \} \rangle, \end{aligned} \quad (34)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{L} \{ \psi(x) \} = & \int dy Q(y, x) \hat{W}(x-y) | \psi(x) \rangle - \\ & - \int dy Q(x, y) \hat{W}(x-y) | \psi(y) \rangle. \end{aligned} \quad (35)$$

Полагая в уравнении (34) $i, j = 1, 2$, получаем систему линейных уравнений для элементов \hat{S} -матрицы рассеяния. Решая эту систему, для поправки первого порядка (по взаимодействию) к коэффициентам $R_{\kappa}^{(0)}, T_{\kappa}^{(0)}$ получаем следующие выражения:

$$\begin{aligned} T_l - T_l^{(0)} &= -R_r^{(0)} \left(\bar{R}_r^{(0)} T_l^{(0)} - R_l^{(0)} \bar{T}_r^{(0)} \right) \frac{\alpha(K)}{2} \ln \frac{1}{|2d(k-K)|}, \\ R_l - R_l^{(0)} &= -T_r^{(0)} \left(\bar{R}_r^{(0)} T_l^{(0)} - R_l^{(0)} \bar{T}_r^{(0)} \right) \frac{\alpha(K)}{2} \ln \frac{1}{|2d(k-K)|}, \\ T_r - T_r^{(0)} &= R_l^{(0)} \left(R_r^{(0)} \bar{T}_l^{(0)} - \bar{R}_l^{(0)} T_r^{(0)} \right) \frac{\alpha(K)}{2} \ln \frac{1}{|2d(k-K)|}, \\ R_r - R_r^{(0)} &= T_l^{(0)} \left(R_r^{(0)} \bar{T}_l^{(0)} - \bar{R}_l^{(0)} T_r^{(0)} \right) \frac{\alpha(K)}{2} \ln \frac{1}{|2d(k-K)|}, \end{aligned} \quad (36)$$

где d — пространственный размер потенциала рассеяния и $\alpha(K)$ определяется выражением ($E_0 = \hbar v_F K$)

$$\begin{aligned} \alpha(K) &= \frac{\Delta_0 K}{E_0^2} [\Phi(0) - \Phi(2K)], \\ \Phi(k) &= \frac{\Delta_0}{E_0} \int dx e^{ikx} W_0(x) + \int dx e^{ikx} W_2(x). \end{aligned} \quad (37)$$

Отметим, что безразмерный параметр $\alpha(K)$ имеет физический смысл эффективной константы e - e взаимодействия и обращается в нуль при $\Delta_0 = 0$. Далее для δ -функционального потенциала взаимодействия $\Phi(0) = \Phi(2K)$ и $\alpha = 0$. Поэтому только для нелокального потенциала e - e корреляций появляются как щель в спектре электронов, так и перенормировка коэффициента отражения. Потенциал $\Phi(K)$ определяется суммой вкладов диагонального потенциала $W_0(x)$ e - e взаимодействия и недиагонального $W_2(x)$. Справедливо условие $W_0(x) \gg W_2(x)$, но малый фактор $\Delta_0 / \hbar v_F K \ll 1$, с которым $W_0(x)$ входит в (37), позволяет оставить оба слагаемых в (37). Так как $\Delta_0 \sim \sin \xi$ и $W_2(x) \sim \sin \xi$, эффективная константа e - e взаимодействия $\alpha(K)$ зависит от кирального угла нанотрубки.

Уравнения (36) справедливы при выполнении условия $\alpha(K) \ln [1/|2d(k-K)|] \ll 1$. При $k \rightarrow K$ теория возмущений несправедлива и необходимо просуммировать все сингулярные слагаемые типа $\{\alpha(K) \ln [1/|2d(k-K)|]\}^n$ в каждом n -ом порядке теории возмущений. Это позволяет использовать метод ренорм-группы.

Для нахождения перенормировок элементов \hat{S} -матрицы рассеяния при произвольной энергии налетающих на барьер электронов воспользуемся методом ренорм-группы, предложенным в работе [10]. Уравнения (36) порождают следующие ренорм-групповые соотношения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_l}{\partial z} &= -\frac{\alpha R_r}{2} (\bar{R}_r T_l - R_l \bar{T}_r), \quad \frac{\partial R_l}{\partial z} = -\frac{\alpha T_r}{2} (\bar{R}_r T_l - R_l \bar{T}_r), \\ \frac{\partial T_r}{\partial z} &= \frac{\alpha R_l}{2} (R_r \bar{T}_l - \bar{R}_l T_r), \quad \frac{\partial R_r}{\partial z} = \frac{\alpha T_l}{2} (R_r \bar{T}_l - \bar{R}_l T_r), \end{aligned} \quad (38)$$

где $z = \ln(D_0/D)$, $D_0 = \hbar v_F / 2d$ — характерный энергетический масштаб потенциала рассеяния ($\Delta_0 \ll D_0 \ll \varepsilon_F$ для плавных потенциалов, не приводящих к междолинным электронным переходам) и $D(E)$ — энергия электрона, отсчитанная от энергии допирования. Перенормированные элементы \hat{S} -матрицы рассеяния соответствуют решению системы (38) при $D(E) \approx \Delta_0$, при этом естественно предполагать, что $\hat{S} = \hat{S}_0$ при $D = D_0$. Отметим, что условие унитарности \hat{S} -матрицы — инвариант системы (38).

Из уравнений ренорм-группы (38) следует, что фазы ϕ_i , входящие в определение \hat{S} -матрицы (31), не перенормируются, $\phi_i = \phi_i^{(0)}$. Для модуля амплитуды коэффициента прохождения τ перенормированное выражение аналогично приведенному в работе [10]:

$$\tau = \frac{\tau_0 (\Delta_0 / D_0)^\alpha}{\sqrt{1 - \tau_0^2 + \tau_0^2 (\Delta_0 / D_0)^{2\alpha}}}. \quad (39)$$

Тем не менее физический смысл и происхождение показателя степени α в (39) (формула (37)) кардинально отличается от [10]. В частности, для некиральных нанотрубок $\alpha(\theta = 0) = 0$.

Из выражения (39) следует, что в пределе малой величины энергетической щели $\Delta_0 \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow \tau_0$, т.е. перенормировка коэффициента прохождения не происходит, а затравочная амплитуда рассеяния вперед (28) стремится к единице, $\tau(\Delta_0 \rightarrow 0) \rightarrow 1$, что и является демонстрацией парадокса Клейна.

Заключение

Транспорт электронов в SWNT при низких температурах определяют два важных эффекта: 1) сильные электрон-электронные корреляции и 2) дираковский характер спектра носителей заряда. Для сильного электрон-электронного взаимодействия транспорт электронов в металлической SWNT описывается теорией жидкости Латтинжера [9], которая предсказывает степенные зависимости тока от напряжения и кондактанса от температуры (эффект Кейна–Фишера). В рамках данной теории междолинное рассеяние электронов сглаживает зависимость от угла киральности нанотрубки. Киральные эффекты в нанотрубке появляются при изучении внутридолинных электронных переходов (киральное туннелирование), вызванных рассеянием на плавных псевдомагнитных потенциалах (для упругодеформированных нанотрубок). Электростатический (скалярный) потенциал сам по себе не вызывает внутридолинных переходов для безмассовых дираковских электронов (парадокс Клейна).

Могут ли электрон-электронные корреляции перенормировать вероятность кирального туннелирования? Развитая нами теория позволяет утвердительно ответить на этот вопрос. Мы изучили влияние электрон-фононного взаимодействия в нанотрубках на характеристики электронного спектра и особенности рассеяния электронов на плавных электростатических потенциалах (не приводящих к междолинному рассеянию электронов). Показано, что псевдомагнитная часть матричного потенциала длинноволнового электрон-фононного взаимодействия индуцирует щель в спектре электронов в металлической SWNT. Изучены два различных механизма образования щели: 1) пайерлсовский переход за счет взаимодействия электронов с акустическими поперечными фононами и 2) корреляционный механизм, когда щель возникает за счет взаимного влияния деформационного и псевдомагнитного потенциалов, индуцирующих щель во втором порядке теории возмущений по константе электрон-фононного взаимодействия.

В работе показано, что пайерлсовская щель не зависит от угла киральности нанотрубки и экспоненциально зависит от характерной величины псевдомагнитного потенциала. Для параметров углеродных нанотрубок численное значение пайерлсовской щели пренебрежимо мало. Однако величина корреляционной щели (рассчитанная в разд. 3, см. формулу (24)) оказывается пропорциональной большой константе деформационного потенциала. Она зависит от угла киральности и для свободно подвешенных (вибрирующих) нанотрубок прямо пропорциональна длине нанотрубки. При этом для некиральных нанотрубок типа «armchair» полученные эффекты пропадают.

Появление щели в спектре дираковских электронов снимает запрет (сохранение спиральности) на внутридолинное рассеяние электронов на электростатическом потенциале, поэтому электрон-электронные корреляции перенормируют вероятность кирального туннелирования. Выражение для перенормируемой амплитуды внутридолинного рассеяния «назад» ($v_F \rightarrow -v_F$), полученное с помощью суммирования сингулярных диаграмм теории возмущений, предсказывает степенные перенормировки амплитуды рассеяния (39). Показатель степени пропорционален величине щели в спектре и зависит от угла киральности нанотрубки.

Авторы благодарят А.С. Ковалева за полезные обсуждения. С.И.К. и И.В.К. выражают благодарность НАН Украины за финансовую поддержку (научный проект НАН Украины №4.17-Н и научная программа 1.4.10.26/Ф-26–3). А.В.П. благодарит Международный Центр Теоретической Физики им. Абдуса Салама за финансовую поддержку и гостеприимство.

1. Zh. Yao, C. Dekker, and Ph. Avouris, *Electron Transport Through Single-Wall Carbon Nanotubes*, in: *Carbon Nanotubes: Synthesis, Structure, Properties and Applications*, M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and Ph. Avouris (eds.), Springer (2001).
2. P.L. McEuen, M. Bockrath, D.H. Cobden, Y.G. Yoon, and S.G. Louie, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 5098 (1999).
3. H.B. Meerwaldt, G.A. Steele, and H. van der Zant, *Carbon Nanotubes: Nonlinear High-Q Resonators with Strong Coupling to Single-Electron Tunneling*, arXiv:1205.4921 (2012).
4. C.L. Kane and M.P.A. Fisher, *Phys. Rev. B* **46**, 15233 (1992).
5. O. Klein, *Z. Phys.* **53**, 157 (1929).
6. A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, and A.K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
7. A.V. Parafilo, I.V. Krive, E.N. Bogachek, U. Landman, R.I. Shekhter, and M. Jonson, *Phys. Rev. B* **83**, 045427(2011).
8. A.V. Parafilo I.V. Krive, E.N. Bogachek, U. Landman, and M. Jonson, *Fiz. Nizk. Temp.* **36**, 1193 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 959 (2010)].
9. A.O. Gogolin, A.A. Nersisyan, and A.M. Tsvelik, *Bosonization and Strongly Correlated Systems*, Cambridge University Press (1998).

10. D. Yue, L.I. Glazman, and K.A. Matveev, *Phys. Rev. B* **49**, 1966 (1994).
11. C.L. Kane, E.J. Mele, A.T. Johnson, D.E. Luzzi, B.W. Smith, D.J. Hombaker, and A. Yazdani, *Phys. Rev. B* **66**, 235423 (2002).
12. T. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 777 (2005).
13. R.E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, Oxford University Press, New York (1995).
14. J. Voit and H.J. Schulz, *Phys. Rev. B* **36**, 968 (1987).
15. R. Saito, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, London (1998).
16. D. Loss and Th. Martin, *Phys. Rev. B* **50**, 12160 (1994).
17. И.В. Криве, А.С. Рожавский, И.О. Кулик, *ФНТ* **12**, 1123 (1986) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **12**, 635 (1986)].
18. И.В. Криве, А.С. Рожавский, *УФН* **152**, 33 (1987) [*Sov. Phys. Usp.* **30**, 370 (1987)].

Interaction-induced gap in the electron spectrum and chiral effects in metallic single-wall carbon nanotubes

A.D. Shkop, S.I. Kulinich, A.V. Parafilo,
and I.V. Krive

We study influence of electron-phonon interaction on electron spectrum and transport characteristics of Dirac electrons in metallic single-wall carbon nanotubes. It is shown that pseudomagnetic part of interaction potential with transversal acoustic phonons induces a gap in electron spectrum. Two mechanisms of a gap generation were considered: i) Peierls phase transition and ii) correlation mechanism due to electrons virtual exchange by transversal phonons. We calculate reflection probability of massive Dirac fermions on scalar (electrostatic) potential of finite size and evaluate the renormalization of bare probability induced by electron-electron correlations.

PACS: **73.63.-b** Electronic transport in nanoscale materials and structures;
73.63.Fg Nanotubes;
73.40.Gk Tunneling.

Keywords: chiral nanotube, Klein paradox, Peierls transition, electron-electron correlations.