

Экранирование электрон-электронного взаимодействия в полупроводниковых нанотрубках

P. З. Витлина, Л. И. Магарилл, А. В. Чаплик¹⁾

Институт физики полупроводников Сибирского отд. РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 30 мая 2007 г.

Найдены выражения для асимптотик экранированного кулоновского взаимодействия электронов на поверхности полого цилиндра (нанотрубка). Показано, что аксиально симметрическая часть потенциала испытывает логарифмически слабое экранирование, тогда как высшие гармоники экранируются по диэлектрическому типу.

PACS: 73.63.Fg

Многочастичные эффекты в квазидимерных системах привлекают в настоящее время значительное внимание. Среди объектов исследования в данной области наибольший интерес представляют нанотрубки – полые цилиндры, на поверхности которых реализуется двумерный газ подвижных носителей: углеродные нанотрубки или свернутые квантовые ямы соединений A_3B_6 , получаемые по технологии Принца [1].

Как всегда, наличие подвижных электронов приводит к перенормировке $e-e$ -взаимодействия, то есть экранированию, конкретный вид которого существенно определяется эффективной размерностью и энергетическим спектром электронного газа. Так, закон Юкавы в 3D системе заменяется при переходе к 2D на более сложную функцию со степенной асимптотикой на больших расстояниях $V_{ee} \sim e^2 a_B^2 / \rho^3$, где a_B – эффективный боровский радиус, ρ – расстояние между электронами в плоскости, $\rho \gg a_B$.

Приведенное соотношение соответствует нулевой температуре (томас-фермиевское экранирование), когда роль радиуса экранирования играет величина $a_B/2$ (см., например, [2]). Естественно ожидать, что в квазидимерном случае нанотрубки перенормировка еще слабее повлияет на кулоновское взаимодействие на больших расстояниях, так как независимо от эффективной размерности электронной системы электрическое поле всегда “трехмерно”.

Сразу оговоримся, что ультраквантовый предел (исключены виртуальные переходы между подзонами нанотрубки) для энергий вблизи уровня Ферми, когда справедлива линейная по импульсу аппроксимация одночастичной дисперсии, должен описываться моделью латтингеровской жидкости. Мы же

здесь рассматриваем квазидимерную систему, то есть учитываем наличие подзон $\varepsilon_{p,l}$ в одночастичном спектре.

Для полупроводниковой нанотрубки

$$\varepsilon_{p,l} = \frac{p^2}{2m} + Bl^2; \quad B \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2}, \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1)$$

Здесь p – импульс электрона вдоль оси нанотрубки, m – эффективная масса, a – радиус трубки. Как видно, данная задача отличается от аналогичной для плоской 2D системы лишь квантованием одной из компонент импульса: $p_y = \hbar l/a$. В такой (ферми-жидкостной) постановке вопрос об экранировании кулоновской примеси в нанотрубке исследовался в работе Лина и Чуу [3]. Приведя общее выражение для поляризуемости системы, авторы в дальнейшем пользовались только численными методами и представили все результаты в виде кривых. Вычисления проделаны лишь для нулевой цилиндрической гармоники перенормированного потенциала, причем авторы отмечают, что ограничиваются этим случаем, поскольку учет высших гармоник представляет большие вычислительные трудности.

Как мы покажем в настоящем сообщении, для любой гармоники экранированного $e-e$ -взаимодействия могут быть получены простые аналитические выражения, справедливые в асимптотической области $z \gg a$, (z – расстояние между частицами вдоль оси трубки), что и представляет наибольший интерес в проблеме экранирования. Поведение нулевой и всех остальных гармоник оказывается качественно различным (вопреки предположениям авторов [3]) и довольно нетривиальным.

Рассматриваемая система является бесконечной и однородной вдоль оси трубы (z -направление) иperiодической и однородной в азимутальном направлении φ , так что гриновская функция электрона

¹⁾ e-mail: chaplik@isp.nsc.ru

G зависит лишь от разностей $z - z'$, $\varphi - \varphi'$. В фурье-представлении G диагональна: $G(p, p'; l, l') = \delta_{pp'}\delta_{ll'}G(p, l)$. Поэтому цепочка Гелл-Манна-Бракнера [4] электронных петель, определяющая перенормированную электрон-электронную вершину $V(k, n)$, сводится к геометрической прогрессии:

$$V(k, n) = \frac{V^{(0)}(k, n)}{1 + V^{(0)}(k, n)\Pi(\omega; k, n)}, \quad (2)$$

где $V^{(0)}$ – затравочное кулоновское взаимодействие:

$$\begin{aligned} V^{(0)}(k, n) &= \tilde{e}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{e^{-ikz-in\varphi} dz d\varphi}{\sqrt{z^2 + 4a^2 \sin^2(\varphi/2)}} = \\ &= 4\pi\tilde{e}^2 I_n(|k|a) K_n(|k|a), \end{aligned} \quad (3)$$

где $\tilde{e}^2 = e^2/\chi$ – квадрат эффективного заряда, χ – фоновая диэлектрическая проницаемость, I_n, K_n – модифицированные функции Бесселя 1-го и 3-го родов. Поляризационный оператор (электронная петля в диаграммной технике) имеет вид (далее $\hbar = 1$)

$$\begin{aligned} \Pi(\omega; k, n) &= \frac{1}{2\pi^2} \times \\ &\times \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{f_{p-k,l-n} - f_{p,l}}{\varepsilon_{p,l} - \varepsilon_{p-k,l-n} - \omega - i\delta} \quad (4) \\ &(\delta = +0). \end{aligned}$$

Здесь $f_{p,l} \equiv f(\varepsilon_{p,l})$ – фермиевские числа заполнения. Нас интересует сейчас статическое экранирование, то есть полагаем $\omega = 0$. Обращая (2) в r -пространство, получим разложение экранированного кулоновского взаимодействия в нанотрубке по цилиндрическим гармоникам. Поскольку $V^{(0)}(k, n)$ и $\Pi(\omega; k, n)$ являются четными функциями n , то получается ряд

$$\begin{aligned} V(z, \varphi) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{(2\pi)^2} \exp(ikz)(V(k, 0) + \\ &+ 2 \sum_{n=1}^{\infty} V(k, n) \cos(n\varphi)). \end{aligned} \quad (5)$$

Каждая гармоника соответствует члену мультипольного разложения: $n = 1$ дает диполь-дипольный вклад, $n = 2$ – квадруполь-квадрупольный и т.д. Наименее быстро убывает с расстоянием нулевая гармоника, которая выражается интегралом

$$V_0(z) = \int_0^{\infty} \frac{dk}{\pi} \cos(kz) \frac{4\pi\tilde{e}^2 I_0(ka) K_0(ka)}{1 + 4\pi\tilde{e}^2 \Pi_0(k) I_0(ka) K_0(ka)}, \quad (6)$$

где

$$\Pi_0(k) \equiv \Pi(0; k, 0) = \frac{m}{\pi^2 k} \sum_{-L}^L \ln \left| \frac{k + 2p_l}{k - 2p_l} \right|, \quad (7)$$

L – номер последней заселенной подзоны при нулевой температуре, $p_l = \sqrt{2m(E_F - Bl^2)}$ – фермиевский импульс l -й подзоны.

Вычислим $V_0(z)$ в области $z \gg a$. Для этого в (6) пишем $\cos(kz) = \text{Re}(\exp(ikz))$ и поворачиваем контур интегрирования до совмещения его с положительной мнимой полуосью. При больших z существенно только $\Pi_0(k \rightarrow 0) = [1/p_0 + 2 \sum_{l=1}^L (1/p_l)]m/\pi^2 \equiv \kappa_0$ (это деленная на π сумма парциальных плотностей состояний по заполненным подзонам). В результате получаем разложение по обратным степеням $\Lambda \equiv \ln(2z/a) - C$ (C – постоянная Эйлера):

$$V_0(z) = \frac{\tilde{e}^2}{z} \left(\frac{ma_B}{4\pi\kappa_0\Lambda} \right)^2 \left(1 - \frac{ma_B/\pi\kappa_0 + 4C}{2\Lambda} \right). \quad (8)$$

Таким образом, кулоновское взаимодействие в нанотрубке ослабляется экранировкой лишь логарифмически, $V(z) \sim e^2/z \ln^2(z/a)$.

Качественно иные результаты получаются для не-нулевых гармоник. Все они испытывают экранирование диэлектрического типа, то есть функциональная зависимость V_n от расстояния z не меняется при учете экранирования. Действительно, из (3) для n -й гармоники затравочного взаимодействия находим

$$\begin{aligned} V_n^{(0)}(z) &= \frac{\tilde{e}^2}{\pi a} Q_{n-1/2}(1 + \frac{z^2}{2a^2}), \\ V_n^{(0)}(z \gg a) &\sim \frac{\Gamma(n + 1/2)}{\sqrt{\pi n!}} \frac{\tilde{e}^2}{z} \left(\frac{a}{z} \right)^{2n}, \end{aligned} \quad (9)$$

где Q_ν – шаровая функция второго рода. Экранированное взаимодействие при больших z определяется пределом величины $\Pi(\omega; k, n)$ при $\omega \rightarrow 0$, $k \rightarrow 0$ (именно в таком порядке), который обозначим через κ_n . В качестве промежуточного результата ($\omega = 0, k \neq 0$) из (4) получается

$$\begin{aligned} \text{Re}(\Pi(0; k, n)) &= \\ &= \frac{m}{2\pi^2 k} \sum_{-L}^L \ln \left| \frac{(k^2 + n^2 + 2kp_l)^2 - 4n^2 l^2}{(k^2 + n^2 - 2kp_l)^2 - 4n^2 l^2} \right|. \end{aligned} \quad (10)$$

Далее при $k \rightarrow 0$ имеем $\text{Im}(\Pi(0; k, n)) = 0$, а для величины $\kappa_n \equiv \Pi(0; 0, n)$ существуют две возможности. Если заполнение подзон при $T = 0$ заканчивается при $l = \pm L$ таком, что $n^2 > 4L^2$, то

$$\kappa_n = \frac{4ma^2}{\pi^2} \sum_{l=-L}^L \frac{p_l}{n^2 - 4l^2}. \quad (11)$$

Если же $n^2 \leq 4L^2$ и n четно, то n -я гармоника потенциала связывает вырожденные состояния с $l = n/2$ и $l = -n/2$. Тогда, раскрывая в (10) неопределенность при $n = 2l_0$, $k \rightarrow 0$, получим

$$\Pi_{n=2l_0} = \frac{2m}{\pi^2} \left(\frac{1}{p_{l_0}} + \frac{2p_{l_0}a^2}{n^2} \right). \quad (12)$$

Слагаемые с $l = \pm l_0$ в сумме (11) заменяются на $\Pi_{n=2l_0}$. Итак, для n -й гармоники экранированного взаимодействия при $z \gg a$ вычисляем интеграл в (5) указанным выше способом и получаем

$$V_n(z) = \frac{\Gamma(n+1/2)}{\sqrt{\pi}n!} \frac{\bar{e}^2}{z} \left(\frac{a}{z} \right)^{2n} \left(1 + \frac{\pi\kappa_n}{ma_B n} \right)^{-2}. \quad (13)$$

Роль диэлектрической постоянной n -й гармоники играет величина

$$\epsilon_n = \left(1 + \frac{\pi\kappa_n}{ma_B n} \right)^2, \quad (14)$$

стремящаяся к единице с ростом номера гармоники (мультиполя). Диэлектрический тип экранирования высших гармоник связан с тем, что в отклике системы на возмущение с $n \neq 0$ дают вклад виртуальные переходы с $\Delta l \neq 0$, для которых в спектре электронов существуют щели (расстояния между подзонами $\epsilon_{p,l}$ по вертикали, так как $k \rightarrow 0$), и система ведет себя как диэлектрик. В классических терминах то же самое можно объяснить тем, что поля всех мультиполей на поверхности нанотрубки при $z \gg a$ практически перпендикулярны оси, то есть вызывают лишь перемещения частиц по азимутальному углу φ , и поэтому z -зависимость $e-e$ -взаимодействия не меняется. Система просто поляризуется по диэлектрическому механизму, когда имеются лишь связанные заряды.

В заключение обсудим влияние магнитного поля. При ориентации поля вдоль оси трубы сниается вырождение по знаку l , и в одиночественном спектре (1) надо заменить l на $l + \phi$, где ϕ – число квантов магнитного потока сквозь трубку. Координатная зависимость экранированного взаимодействия остается прежней, но изменяются параметры κ_n . В поляризационном операторе (4) сумма по l идет по всем целым числам, поэтому имеют место равенства $\Pi(\phi) = \Pi(\phi + 1)$, $\Pi(\phi, n) = \Pi(-\phi, -n)$.

Таким образом, достаточно исследовать интервал магнитных потоков $0 \leq \phi < 1/2$. Пусть линейная концентрация электронов N_L ограничена неравенст-

вом $\pi N_L a/2 = N < 1$. Тогда при $\phi = 0$ заселена лишь подзона $l = 0$, а при конечном потоке заселяется не более двух подзон: $l = 0$ и $l = -1$. Начало заполнения подзоны $l = -1$ соответствует потоку $\phi_0 = (1 - N^2)/2$. Вычисления приводят к следующим результатам. Для нулевой гармоники при $\phi < \phi_0$ экранированное взаимодействие не зависит от потока. При $\phi_0 < \phi < 1/2$ в формуле (8) вместо κ_0 следует подставить $(m/\pi^2)[1/\tilde{p}_0 + 1/\tilde{p}_{-1}]$, где \tilde{p}_0 , \tilde{p}_{-1} – зависящие от потока граничные импульсы в подзонах: $\tilde{p}_0 = (1 - \phi - \phi_0)/Na$, $\tilde{p}_{-1} = (\phi - \phi_0)/Na$. Для нахождения гармоник потенциала с $n \neq 0$ следует в формуле (13) сделать замену:

$$\kappa_n \rightarrow (4ma^2/\pi^2)[\tilde{p}_0/(n^2 - 4\phi^2) + \tilde{p}_{-1}/(n^2 - 4(1 - \phi)^2)].$$

Как и следовало ожидать, при $\phi = \phi_0$, когда начинает заполняться подзона $l = -1$, сингулярность одномерной плотности состояний приводит формально к бесконечно сильному экранированию (взаимодействие обращается в нуль). Разумеется, учет примесей и конечной температуры размывает пики плотности состояний так же, как это происходит в 2D газе в перпендикулярном магнитном поле. Тем не менее, зависимость экранированного взаимодействия от магнитного потока остается осциллирующей. Соответственно будет осциллировать сечение рассеяния электронов на заряженных примесях, что может проявиться в периодической зависимости от ϕ ширины линии межподзонных оптических переходов. Аналогичный эффект в 2D газе в перпендикулярном магнитном поле наблюдался в работе [5].

Авторы благодарят М.В. Энтина за полезные обсуждения. Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований # 04-02-16398 и INTAS # 03-51-6453, грантом Президента РФ для научных школ # 4500.2006.2, а также Программами РАН.

-
1. V. Ya. Prinz et al., *Physica E* (Amsterdam) **6**, 828 (2000).
 2. T. Ando, A. Fowler, and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
 3. M. F. Lin and D. S. Chuu, *Phys. Rev. B* **56**, 4996 (1997).
 4. M. Gell-Mann and K. Brueckner, *Phys. Rev.* **106**, 364 (1957).
 5. I. V. Kukushkin and V. B. Timofeev, *Advances in Physics* **45**, 147 (1996).