

# Сбой фазы в бесщелевых углеродных нанотрубках и нанополосах и подавление интерференции в квантовом интерферометре на их основе

Д. С. Мисерев<sup>+\*1</sup>, М. В. Энтин<sup>+</sup>

<sup>+</sup>Институт физики полупроводников им. Ржанова СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

<sup>\*</sup>Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 11 марта 2014 г.

Изучается фононный сбой фазы электрона в углеродной нанотрубке и нанополосе конечной длины с бесщелевым спектром. Показано, что его основным механизмом является взаимодействие с мягкими фононами с частотами порядка фоновонного времени пролета через нанотрубку. Полученные формулы применяются для изучения подавления интерференции в интерферометре из двух нанотрубок или нанополос, соединяющих двумерные электронные моря. Рассмотрен сбой фазы за счет нулевых и тепловых колебаний.

DOI: 10.7868/S0370274X1407011X

В настоящее время существует огромное количество экспериментальных и теоретических работ в области низкоразмерных углеродных структур. Большой научный интерес к исследованиям в данной области вызван уникальными и многообещающими для нанoeлектроники свойствами графена, связанными с линейностью спектра электронов. Одним из наиболее значительных следствий линейного бесщелевого спектра в графене является запрет обратного рассеяния [1]. Это приводит к неограниченной проводимости бесконечной системы [2, 3] и баллистическому кондактансу конечного проводника [4, 5], в то время как проводимость обычных одномерных систем стремится к нулю.

Отсутствие обратного рассеяния и локализации состояний позволяет изучать проводимость гораздо более длинных нанотрубок, чем квантовые проволоки из традиционных полупроводников. Это стимулирует стремление использовать длинные нанотрубки/нанополосы в квантовом интерферометре. Простейшей реализацией такого интерферометра могут служить две углеродные нанополосы с бесщелевым линейным спектром для электронов, соединяющие два дираковских моря. Такой интерферометр потенциально является более чувствительным к внешним полям. В то же время нарушение фазовой когерентности из-за неупругих процессов в нанотрубках оказывается здесь более важным, чем в малых квантовых кольцах.

Нашей целью является исследование влияния фононов на фазовую когерентность в одномерной квантовой системе с линейным спектром на примере однослойной углеродной нанотрубки. Вначале рассмотрены состояния электронов с нулевой проекцией углового момента на ось нанотрубки в присутствии потенциала. Далее рассчитан кондактанс интерферометра из двух параллельных нанотрубок, соединяющих двумерные “моря”, как функция внешних полей. Затем мы исследуем подавление фазовой когерентности при взаимодействии электронов с нулевыми колебаниями нанотрубки и при конечных температурах.

**Состояния углеродной нанотрубки с нулевой проекцией момента в присутствии потенциала.** Будем рассматривать нанотрубку как полосу графена с циклическими граничными условиями. В приближении огибающей вблизи конической точки одноэлектронный гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = s\sigma\hat{\mathbf{p}} = s\sigma_x\hat{p}_x + s\sigma_y\hat{p}_\phi, \quad (1)$$

где  $s$  – скорость Ферми в графене,  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$  – матрицы Паули,  $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$ ,  $\hat{p}_\phi = -i\hbar\partial_\phi/r$ ,  $r$  – радиус нанотрубки, ось  $x$  совпадает с осью нанотрубки. Гамильтониан (1) имеет собственные функции

$$\psi_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} e^{-i\theta_{\mathbf{p}}/2} \\ e^{i\theta_{\mathbf{p}}/2} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}, \quad \xi_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} e^{-i\theta_{\mathbf{p}}/2} \\ -e^{i\theta_{\mathbf{p}}/2} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}, \quad (2)$$

где  $e^{i\theta_{\mathbf{p}}} = (p_x + i\hbar m r^{-1})/E$ ,  $E = s\sqrt{\hbar^2 m^2/r^2 + p_x^2}$ ,  $m$  – целое. Состояние  $\psi_{\mathbf{p}}$  соответствует энергии  $E$ , состояние  $\xi_{\mathbf{p}}$  – энергии  $-E$ . Спектр нанотрубки (рис. 1)

<sup>1</sup>)e-mail: miserev@student.unsw.edu.au

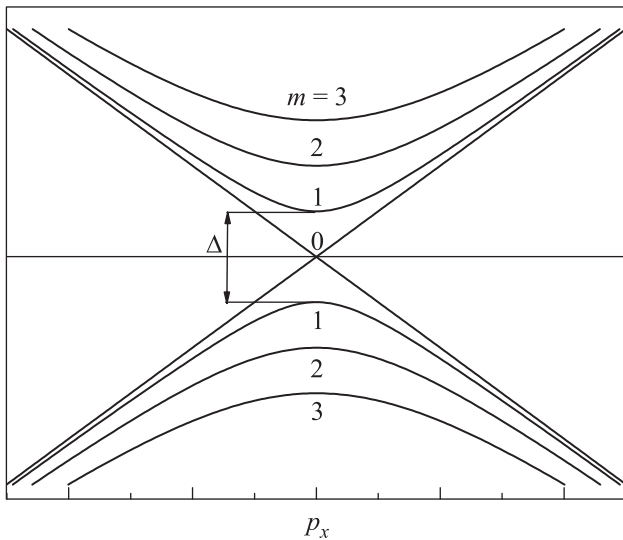


Рис. 1. Спектр нанотрубки. Внутри щели  $|E| < \Delta/2 = s\hbar/r$  имеется только линейная ветвь

вырожден по знаку импульса  $p_x$  и знаку проекции  $m$  момента на ось нанотрубки. Состояниям  $m = 0$  соответствует бесщелевая линейная ветвь в законе дисперсии. Именно эти состояния представляют для нас интерес в дальнейшем.

Рассмотрим возмущение к гамильтониану (1) вида  $V(x, t) = U(x, t) + A_x(t)\sigma_x$ , где  $U(x, t)$  и  $\mathbf{A}(t)$  – скалярный потенциал и вектор-потенциал соответственно. Оператор  $-i\partial_\phi$  проекции момента электрона на ось нанотрубки является интегралом движения, что позволяет отдельно рассмотреть состояния с нулевой проекцией  $m = 0$ . Гамильтониан такой задачи имеет вид

$$\hat{H}_0 = -i\hbar\sigma_x\partial_x + V(x, t). \quad (3)$$

Так как  $\hat{H}_0$  коммутирует с  $\sigma_x$ , разложим волновую функцию по собственным функциям  $\psi_\mu$  оператора  $\sigma_x$  (где  $\mu = \pm 1$  – собственные числа матрицы  $\sigma_x$ ). Решая уравнение Шредингера  $\partial_t\psi_\mu + \mu s\partial_x\psi_\mu = -\frac{i}{\hbar}V_\mu(x, t)\psi_\mu(x, t)$  методом характеристик, находим явный вид волновой функции:

$$\psi_\mu = \exp\left[-\frac{i\mu}{s\hbar}\int^x V_\mu(x', t - \mu x/s + \mu x'/s) dx'\right] \psi_0, \quad (4)$$

где  $V_\mu(x, t) = U(x, t) + A_x(t)\mu$ . Функция  $\psi_0(x - \mu t)$  в начальном состоянии представляет волну, бегущую в направлении, определяемом знаком  $\mu$ . Внешний потенциал  $U(x, t)$  и электромагнитное поле вызывают только модуляцию фазы волны.

Решение (4) определяет ряд важных последствий. Во-первых, любой потенциал, например примесный,

не вызывает обратного рассеяния электронов ( $p_x \rightarrow -p_x$ ). Отсутствие обратного рассеяния означает, что статический кондактанс нанотрубки с примесями совпадает с кондактансом идеальной нанотрубки  $4e^2/h$ . Во-вторых, электромагнитное поле с поляризацией вдоль оси нанотрубки не вызывает переходов между состояниями с  $m = 0$ . Поэтому поглощения света на состояниях с  $m = 0$  не возникает, в том числе и при учете примесного потенциала. Предполагается, что уровень Ферми  $E_F$  лежит в области линейного спектра,  $|E_F| < s\hbar/r$ , а частота света  $\omega$  находится в щели,  $\omega < 2s/r$ .

Функцию  $U(x, t)$  в формуле (4) можно считать случайным потенциалом, создаваемым фононами. В этом случае фононы приводят к сбою фазы электрона, не давая обратного рассеяния (см. ниже).

**Квантовый интерферометр на основе металлических углеродных нанотрубок.** Рассмотрим квантовую систему, состоящую из двух двумерных морей Дирака, соединенных двумя параллельными углеродными нанотрубками радиуса  $r$  или нанополосами ширины  $2\pi r$  с металлическим типом проводимости (рис. 2). Если энергия Ферми попадает

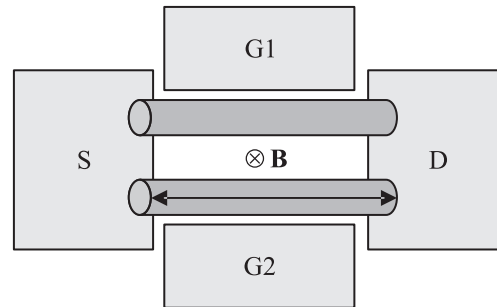


Рис. 2. Туннельный интерферометр из двух нанотрубок. Исток (S) и сток (D) расположены слева и справа, полевые электроды (G1 и G2) – сверху и снизу от нанотрубок

в энергетическую щель,  $|E_F| < s\hbar/r$ , в которой присутствуют только электронные состояния с  $m = 0$ , то кондактанс такой системы остается конечным при большой длине нанотрубок вне зависимости от степени легирования.

Рассмотрим задачу о баллистическом прохождении электрона через две нанотрубки. Волновая функция прошедшего электрона  $\Psi$  является суперпозицией прошедших вдоль каждой из нанотрубок волн, которые интерферируют вдали от концов нанотрубок по закону  $\Psi = (e^{i\phi_1} + e^{i\phi_2})t\Psi_0$ , где  $\Psi_0$  – падающая волна,  $t$  – амплитудный коэффициент прохождения,  $\phi_{1,2}$  – фазы, набираемые электроном при прохождении первой и второй нанотрубки. Таким об-

разом, коэффициент прохождения определяется разностью фаз, набираемой электроном при прохождении каждой из нанотрубок,  $T = 2T_0[1 + \cos(\phi_2 - \phi_1)]$ , где  $T_0 = |t|^2$  — коэффициент прохождения сквозь одну нанотрубку. Если фазы не согласованы и имеют случайный характер, то средний коэффициент прохождения будет в два раза больше, чем коэффициент прохождения сквозь одну нанотрубку, что согласуется с формулой Ландауэра.

Поместим над каждой из нанотрубок полевой электрод и приложим к ним внешний потенциал. Вклад в баллистическую проводимость дают только электроны с  $m = 0$ . Это позволяет воспользоваться явным выражением для волновой функции (4), чтобы определить разность фаз, связанную с внешним потенциалом:

$$\Delta\phi_U = \int_{l_2} U_2(x_2) \frac{dx_2}{s\hbar} - \int_{l_1} U_1(x_1) \frac{dx_1}{s\hbar}, \quad (5)$$

где интегрирование производится по соответствующим нанотрубкам. В частности, если над первой нанотрубкой создать постоянный потенциал  $U_1$ , а над второй — потенциал  $U_2$ , то разность фаз, связанная с приложенным потенциалом, имеет вид  $\Delta\phi_U = (U_2l_2 - U_1l_1)/s\hbar$ , где  $l_{1,2}$  — длины нанотрубок.

Если считать  $U_{1,2}(x)$  случайным потенциалом примесей, то формулу (5) можно трактовать как влияние этих примесей на разность фаз между нанотрубками. Отметим, что разность фаз, набираемая за счет  $U_1(x) - U_2(x)$ , не содержит зависимости от энергии электрона. Это существенно отличает нанотрубку от квантовой проволоки с квадратичным энергетическим спектром. В результате в интерферометре из нанотрубок отсутствует размытие интерферометрических осцилляций, обусловленное температурным разбросом энергий электронов.

Кондактанс рассматриваемой системы как функция внешнего поля имеет вид  $G = 4T_0G_0[1 + \cos(\Delta\phi_U + \phi_0)]$ , где  $\phi_0$  — разность фаз в отсутствие поля,  $G_0 = 2e^2/h$ . Таким образом, рассматриваемая система является квантовым интерферометром, чувствительным к потенциалу на полевом электроде.

Отметим, что разностью фаз можно управлять и при помощи магнитного поля:  $\Delta\phi_B = 2\pi\Phi/\Phi_0$ , где  $\Phi$  — магнитный поток сквозь щель интерферометра,  $\Phi_0$  — квант магнитного потока.

Кондактанс идеальной системы осциллирует между нулем и  $8G_0T_0$ . Сбой фазы за счет электрон-фононного взаимодействия подавляет осциллирующую интерференционную часть кондактанса.

**Вычисление сбоя фазы по теории возмущений.** Будем рассматривать влияние электрон-фононного взаимодействия на кондактанс интерферометра при низких температурах, когда существенно взаимодействие только с акустическими фононами, а междолинные переходы запрещены. Рассеяние электронов с  $m = 0$  на фононах в нанотрубке в пределах одной конической точки также оказывается невозможным: из-за линейности спектра электрон по закону сохранения энергии и импульса не может переходить между сонаправленными состояниями, в то время как обратное рассеяние оказывается запрещенным по симметричным соображениям. Вместе с тем, фононное случайное поле вызывает сбой фазы электрона, распространяющегося по нанотрубке. В такой ситуации при взаимодействии с фононами электрон остается в одном и том же квантовом состоянии.

Из дальнейшего будет видно, что баллистический электрон взаимодействует преимущественно с мягкими продольными фононами, а все виртуальные состояния баллистического электрона  $|\mathbf{p}_0\rangle$  лежат на той же ветви  $\varepsilon_{\mathbf{p}} = sp$ , что и исходное состояние  $|\mathbf{p}_0\rangle$ . Таким образом, мы можем рассмотреть данную задачу в одноэлектронном подходе, не прибегая к квантованию электронного поля.

Полный гамильтониан квантовой системы, состоящей из баллистического электрона с нулевой проекцией момента на ось нанотрубки и ансамбля продольных акустических фононов, имеет вид

$$\hat{H} = s\sigma_x \hat{p}_x + \sum_k \Lambda_k \left( a_k e^{-i\omega_k t} + a_{-k}^\dagger e^{i\omega_k t} \right) e^{ikx}, \quad (6)$$

где  $\Lambda_k = i\Lambda k R_k$ ,  $R_k^2 = \hbar/(2M\omega_k)$ ,  $M$  — масса нанотрубки,  $\Lambda$  — константа деформационного потенциала. В этом случае  $S$ -матрицу можно представить в виде экспоненты, упорядоченной по координате  $x$ :

$$\hat{S} = T \exp \left[ -i \int_{-\infty}^x \hat{H}_{ep} \left( x', t - \frac{x}{s} + \frac{x'}{s} \right) \frac{dx'}{\hbar s} \right]. \quad (7)$$

В отсутствие взаимодействия при конечной температуре волновая функция содержит один электрон с продольным импульсом  $p_0$  и некоторое число фононов  $n$ :  $\Psi_0 = |p_0\rangle|n\rangle$ .

Так как в графене скорость звука на два порядка меньше скорости Ферми электронов, задачу можно рассматривать в квазиупругом приближении. Это позволяет отбросить запаздывание в формуле (7).

В результате для диагонального элемента матрицы эволюции находим

$$S = \langle n | \langle p_0 | T \exp \left[ -i \int_{-L/2}^{L/2} \hat{H}_{\text{ep}}(x) \frac{dx}{\hbar s} \right] | p_0 \rangle | n \rangle, \quad (8)$$

где  $L$  – длина нанотрубки.

Первая ненулевая поправка по теории возмущений дает

$$S \approx 1 - \sum_k \frac{2|\Lambda_k|^2}{s^2 \hbar^2} \left( n_k + \frac{1}{2} \right) \times \\ \times \int_{-L/2}^{L/2} e^{ikx} \int_{-L/2}^x e^{-ikx'} dx dx'. \quad (9)$$

Таким образом, вероятность упругих процессов во втором порядке по взаимодействию определяется следующим выражением:

$$f = S^\dagger S \approx 1 - \sum_k \frac{4\Lambda^2(n_k + 1/2)}{Mc^2 s^2 \hbar |k|} \sin^2 \left( \frac{kL}{2} \right). \quad (10)$$

**Предел нулевой температуры.** В пределе нулевой температуры формула (10) демонстрирует логарифмическую расходимость поправки от длины нанотрубки:

$$f(T=0) \approx 1 - \frac{\Lambda^2}{2\pi^2 \rho r c s^2 \hbar} \ln \frac{L}{a}. \quad (11)$$

Причину возникновения такой поправки можно понять на основе модели нанотрубки, длина которой флуктуирует на величину  $u$ . Предположим, что электрон с импульсом  $p$  распространяется вдоль нанотрубки. Изменение фазы волны равно  $pu$ , а средний квадрат флуктуаций  $p^2 \langle u^2 \rangle = p^2 \sum_k R_k^2$ . Эта величина определяет фактор Дебая–Уоллера при нулевой температуре:

$$e^{-W} = e^{-p^2 \langle u^2 \rangle / \hbar^2} = \exp \left( -\frac{p^2}{4\pi^2 \rho r c \hbar} \ln \frac{L}{a} \right). \quad (12)$$

В отличие от (11) фактор Дебая–Уоллера содержит вместо  $\Lambda^2/s^2$  значительно меньший предлогарифмический множитель  $p^2$ . Этот множитель появляется за счет среднего квадрата флуктуаций импульса электрона, обусловленных флуктуациями потенциала, создаваемого деформациями. Действительно, под действием деформации возникает флуктуация импульса электрона  $\delta p = \Lambda \nabla u / s$ . Эта флуктуация порождает изменение фазы  $\phi(L) - \phi(0) = \Lambda[u(L) - u(0)]/s\hbar$ . Усредняя по фононам аналогично (12), получаем

$$f = e^{-2\langle \phi^2(L) \rangle} = \exp \left( -\frac{\Lambda^2}{2\pi^2 \rho r s^2 c \hbar} \ln \frac{L}{a} \right). \quad (13)$$

Полученное выражение справедливо только в том случае, когда мы можем пренебречь  $T$ -упорядоченностью в (8). Эта ситуация соответствует суммированию диаграмм, единственным неприводимым блоком которых является электрон-фононная петля.

Для численных оценок примем параметры, посчитанные для графена из первых принципов [6]:  $c = 2 \cdot 10^4$  м/с,  $s = 10^6$  м/с,  $\Lambda = 3$  эВ. Для нанотрубки радиуса  $r = 1$  нм и длины  $L = 10$  мкм поправка составляет  $10^{-4}$ . Однако согласие в экспериментальных значениях постоянной деформационного потенциала до сих пор не достигнуто. В частности, в работе [7] приведены значения константы электрон-фононного взаимодействия  $\Lambda \approx 20$  эВ, что дает подавление интерференции на 0.5 %.

**Случай конечной температуры.** В случае конечных температур ( $T \gg \hbar c/L$ ) мы можем разложить числа заполнения фононов,  $(n_k + 1/2) \rightarrow T/\hbar\omega_k + O(\hbar\omega_k/T)$ . Это приводит к сильной расходимости суммы при малых  $k$ :

$$f \approx 1 - \frac{4\Lambda^2 T}{Mc^2 s^2 \hbar^2} \sum_k \frac{1}{k^2} \sin^2 \frac{kL}{2}. \quad (14)$$

В отличие от предела нулевой температуры в случае конечных температур результат зависит от краевой задачи на концах нанотрубки, т.е. от квантования фононов. Однако это не влияет качественно на результат. Для определенности посчитаем сумму для нанотрубки со свободными либо закрепленными концами. Квантование для нее в этих случаях дает  $k_n L = \pi n$ , где  $n = 1, 2, \dots, N$ ,  $N = L/a$  – число состояний. В итоге получаем  $f(T) \approx 1 - L/L_\phi$ , где  $L_\phi = 4\pi \hbar^2 \rho r c^2 s^2 / \Lambda^2 T$ .

Величина  $L_\phi$  играет роль длины сбоя фазы. В этом можно убедиться из нижеследующего рассуждения. В классическом пределе фононы служат источником внешнего случайного поля, по которому следует усреднить кондактанс. В обычных ситуациях это соответствует случаю, когда числа заполнения фононов, взаимодействующих с электронами, велики. Последнее отвечает условию квазиупругости – малости частоты излучаемых (поглощаемых) фононов по сравнению с типичной энергией электронов. В графене и углеродных нанотрубках для невырожденного электронного газа данный критерий выполняется, так как при линейном спектре скорость электронов заведомо больше скорости звука независимо от их энергии. В вырожденном же газе критерий квазиупругости дает  $p_{\text{FC}} \ll T$ . В нашем случае основной вклад дает взаимодействие с мягкими фононами с частотой порядка обратного времени про-

лета фонона вдоль нанотрубки. Следовательно, что при  $T \gg \hbar c/L$  числа заполнений для длинноволновых акустических фононов велики. Это позволяет перейти к пределу классического флуктуирующего поля. При длине нанотрубки  $L = 10$  мкм ограничение на температуру дает  $T \gg 10$  мК. Пренебрегая  $T$ -упорядочением в формуле (8), проведем усреднение со статистическим оператором. В результате находим  $f_T = \exp(-L/L_\phi)$ .

Чтобы можно было не учитывать влияние щелевых фононов, температура должна быть значительно меньше величины  $c\hbar/r$ , которая при  $r = 1$  нм составляет  $\sim 100$  К. Длина фазовой когерентности  $L_\phi$  в нанотрубке радиуса  $r = 1$  нм при  $\Lambda = 20$  эВ,  $T = 10$  К равна 100 мкм, что дает значительную свободу для создания сверхчувствительных квантовых интерферометров.

**Заключение.** Итак, в настоящей работе рассмотрен квантовый интерферометр на основе углеродных нанотрубок с металлическим типом проводимости. Рассчитан его кондактанс. Учтено влияние неупругих электрон-фононных процессов. Линейный энергетический спектр в углеродных нанотрубках приводит к невозможности обратного рассеяния, т.е. к существованию безотражательных состояний, которые не локализуются при любой степени беспорядка в сколь угодно длинной нанотрубке. Это дает возможность создания интерферометра с большой площадью, имеющего повышенную чувствительность к внешнему потенциалу и магнитному полю. Включение неупругих электрон-фононных процессов приводит к флуктуациям фазы, разрушающим когерентность в достаточно длинной нанотрубке.

Как следует из наших результатов, основную роль в разрушении когерентности играют продольные низкочастотные колебания. В пределе низких температур за счет нулевых колебаний возникает степенное убывание средней экспоненты сбоя фазы в зависимости от длины образца. При низкой же, но

не нулевой температуре формируется длина фазовой когерентности и логарифм средней экспоненты сбоя фазы начинает линейно зависеть от длины системы. Мы показали, что разрушение фазовой когерентности может не мешать работе интерферометра с размерами в десятки микрон вплоть до температуры 10 К.

Отметим, что мы учитывали только когерентные процессы. Данный подход справедлив, лишь если типичная энергия излучаемых фононов меньше температуры, что определяется критерием  $LT \gg c\hbar$ . (При этом мы ограничились случаем достаточно низкой температуры, такой, чтобы излучение оптических фононных мод было невозможным.) В противном случае процесс прохождения по нанотрубке, как правило, сопровождается испусканием или поглощением конечного числа фононов. При этом когерентность процесса теряется. Вклад некогерентных процессов в кондактанс аддитивен. Однако для нас он неинтересен, так как он не приводит к изменению интерференционной части кондактанса.

Работа была поддержана грантами РФФИ # 11-02-00730-а и 12-02-31012 мол-а.

- 
1. T. Ando and T. Nakanishi, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 1704 (1998).
  2. T. Ando and H. Suzuura, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 2753 (2002).
  3. W. Clauss, D. J. Bergeron, M. Freitag, C. L. Kane, E. J. Mele, and A. T. Johnson, Europhys. Lett. **47**(5), 601 (1999).
  4. P. L. McEuen, M. Bockrath, D. H. Cobden, Y.-G. Yoon, and S. G. Louie, Phys. Rev. Lett. **83**, 5098 (1999).
  5. C. T. White and T. N. Todorov, Nature **393**, 240 (1998).
  6. K. Kaasbjerg, K. S. Thygesen, and K. W. Jacobsen, Phys. Rev. B **85**, 165440 (2012).
  7. R. S. Shishir and D. K. Ferry, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 232204 (2009).