

Электрон-фононное взаимодействие в локальной области

© К.В. Рейх¹, Е.Д. Эйдельман^{1,2}

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

² Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Reich@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 1 февраля 2011 г.)

Показано, что в области с локальным электрон-фононным взаимодействием возможно образование связанного состояния. Как пример материала, в котором может реализоваться такой эффект, рассматриваются углеродные наноструктуры. На основе развитых представлений стало возможным объяснить аномально высокую полевую эмиссию в таких структурах не только феноменологически, но и на микроскопическом уровне.

Работа поддержана ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 гг. (ГК П182 от 20.04.2010).

1. Введение

В настоящее время во всем мире проводятся многочисленные исследования взаимодействия электронов с колебательными модами — фононами в наноразмерных областях [1]. К примеру, известно [2–4], что электрон-фононное взаимодействие сильно влияет на процессы туннелирования электрона из углеродных наноструктур.

До настоящего времени при анализе электрон-фононного взаимодействия рассматривались либо пространственно однородное, либо точечное электрон-фононное взаимодействие. Вычисления основывались на хорошо известном гамильтониане Холстейна [5]. Эффекты, связанные с конечным (порядка несколько нанометров) размером структуры, в которой реально и происходит электрон-фононное взаимодействие, не рассматривались. В настоящей работе мы развили результаты, полученные для точечного и пространственно однородного электрон-фононного взаимодействия, на взаимодействие в локальной области с малым, но конечным размером.

Из общих соображений ясно, что в системах с такими областями могут обнаруживаться новые, еще не исследованные явления, связанные с тем, что закон сохранения импульса в таких неоднородных системах не действует.

2. Гамильтониан локального электрон-фононного взаимодействия

Запишем гамильтониан H для системы с локальным электрон-фононным взаимодействием. Как обычно, выделим в нем гамильтониан невзаимодействующих электронов и фононов H_0 и гамильтониан взаимодействия V

$$H = H_0 + V. \quad (1)$$

Гамильтониан невзаимодействующих электронов (импульс p , энергия ε_p) и фононов (волновой вектор q , энергия ω_q) в представлении чисел заполнения с операторами рождения и уничтожения c_{p+}, c_p и a_{q+}, a_q соответственно имеет стандартный вид

$$H_0 = \sum_p \varepsilon_p c_p^+ c_p + \sum_q \omega_q a_q^+ a_q. \quad (2)$$

Здесь и далее для упрощения записи положено, что постоянная Планка $\hbar = 1$.

Для введения потенциала взаимодействия за отправную точку возьмем гамильтониан электрон-фононного взаимодействия Фрелиха [6], в который введена переменная k , связанная с неоднородностью. Запишем

$$H_{ep}(k) = \frac{1}{v^{1/2}} \sum_p \sum_q M_q(k) c_{p+q+k}^+ c_p (a_q + a_{-q}^+). \quad (3)$$

Когда взаимодействие электронов и фононов происходит пространственно однородным образом, во всем макроскопическом образце объемом v одинаково, функция $M_q(k)$ для фононов с заданными характеристиками есть величина постоянная; и тогда она называется „константой взаимодействия“ M_q . При локальном электрон-фононном взаимодействии именно функция $M_q(k)$ несет информацию о локальности.

Выделим из $M_q(k)$ функцию локализации, которую будем обозначать $\lambda(r)$. Функция локализации в координатном представлении $\lambda(r - R)$ показывает, что вокруг точки с координатой R в некоторой области, характеризующейся переменной r , электрон-фононное взаимодействие велико. В импульсном представлении получим, что $\lambda(r - R)$ переходит в

$$\frac{1}{v} \sum_k \lambda(k) e^{ikR}. \quad (4)$$

Тем самым величина k обретает смысл импульса электрона, вносимого локализацией; вносимого тем, что электрон и фонон взаимодействуют только в ограниченной области.

Введение функции локализации в гамильтониан проводится стандартным образом [6]. Имеем

$$H_{ep} = \int d^3r \rho(r) W(r). \quad (5)$$

Здесь $\rho(r)$ — оператор электронной плотности, $W(r)$ — оператор потенциала взаимодействия электрона с фононами.

Примем, что только в области локализации имеет место электрон-фононное взаимодействие между фононами, свободно распространяющимися в других областях образца, и электронами, взаимодействующими с фононами только в этой области. Тогда нужно ввести функцию локализации $\lambda(r)$ и сделать замену потенциала $W(r)$ на потенциал в локальной области $\lambda(r)W(r)$. Выразим гамильтониан (5) через Фурье-образцы входящих в него множителей. После интегрирования найдем

$$H_{ep} = \sum_k \lambda(k) \sum_q \rho(q+k) W(q). \quad (6)$$

Подставляя величину $\rho(q+k)W(q)$ в стандартном виде [6], получим, что гамильтониан электрон-фононного взаимодействия в локальной области запишется в виде

$$V = \frac{1}{v} \sum_k \lambda_R(k) e^{ikR} H_{ep}(k), \quad (7)$$

где потенциал Фрёлыха (3) задается формулой с характеристиками взаимодействия, не зависящими от того, в какой области это взаимодействие происходит. Имеем $M_q(k) = M_q(0) = M_q$. Таким образом, постоянные электрон-фононного взаимодействия теперь таковы, каковы они были бы, если бы взаимодействие происходило во всем образце одинаково, однородно, а не только в локальной, выделенной области. Отметим, что если локальная область не одна, то в (7) координата, задающая положение такой области R , заменяется R_i , где i — номер данной локальной области и проводится суммирование по всем областям. Далее будет рассматриваться одна область взаимодействия, помещенная в начало координат $R = 0$. Константы взаимодействия M_q зависят только от типа взаимодействия между электронами и фононами. При $k = 0$ гамильтониан $H_{ep}(k)$ переходит в стандартный гамильтониан электрон-фононного взаимодействия. Этот гамильтониан соответствует предельному случаю пространственно однородного ($\lambda(r) = 1$) по всему образцу взаимодействия. В то же время при точечном взаимодействии ($\lambda(r) = \delta(r - R)$) гамильтониан (7) переходит в гамильтониан Холстейна [5].

Вернемся к рассмотрению общего случая локального взаимодействия, которому соответствует гамильтониан в форме (1) с подставленными в него операторами (2)

и (7). Перейдем в этом гамильтониане от суммирования по немой переменной от k к $k-p-q$. Для выделения ключевого эффекта перейдем от операторов рождения и уничтожения фононов к „сдвинутым“ операторам. Сделаем каноническое преобразование от a_q к

$$a_q - \lambda(q) \frac{M_q}{\omega_q} \sum_k c_k^+ c_k. \quad (8)$$

Считая, что в системе находится один электрон, положим последнюю сумму равной 1. Прделав эти преобразования, получим, что гамильтониан можно записать в виде

$$\begin{aligned} H = & \sum_p \varepsilon_p c_p^+ c_p - 2 \sum_k \sum_p \sum_q \lambda(q) \lambda(k-q) \frac{M_q^2}{\omega_q} c_{k+p}^+ \\ & + \sum_q \hbar \omega_q a_q^+ a_q + \sum_q \lambda^2(q) \frac{M_q^2}{\omega_q} \\ & + \sum_{k \neq p} \lambda(k-p-q) M_q c_k^+ c_p (a_q + a_{-q}^+). \end{aligned} \quad (9)$$

Далее последнее слагаемое в (9) будет рассматриваться как возмущение. Основой для такого рассмотрения должно быть выполнение условия, что для всех q выполнено неравенство $M_q > \omega_q$. Четвертым членом выражения (9) в дальнейшем будем пренебрегать, поскольку он определяет сдвиг отсчета энергии. Первые два слагаемых представляют собой новый невозмущенный гамильтониан для электрона в области локального электрон-фононного взаимодействия. Проведя диагонализацию нового гамильтониана состояния электрона в локальной области, получим, что гамильтониан в этой области имеет вид

$$\begin{aligned} H_{0\lambda} = & \sum_p \varepsilon_p c_p^+ c_p - 2 \sum_p \sum_q \sum_k \lambda(q) \lambda(k-q) \frac{M_q^2}{\omega_q} c_{k+p}^+ c_p \\ = & \sum_k \varepsilon_{\lambda k} b_k^+ b_k. \end{aligned} \quad (10)$$

Возможность такой записи означает, что электрон в локальной области можно представить как особое состояние с энергией $\varepsilon_{\lambda k}$ и операторами рождения и уничтожения b_k^+ и b_k . Такой гамильтониан аналогичен гамильтониану для электрона, имеющего дополнительную энергию, Фурье-образ которой равен второму слагаемому в (10). Свойства основного состояния определяются конкретным видом функции локализации $\lambda(r)$. Единственное общее требование, которое следует из ограниченности области локализации, это $\lambda(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Предположим, что область локализации должна иметь характерный размер a . Типичным видом функции локализации может служить гауссова функция

$$\lambda(r) = \exp(-r^2/a^2). \quad (11)$$

Решая уравнение Шредингера с гамильтонианом $H_{0\lambda}$ с функцией локализации, заданной формулой (11), можно получить ключевой результат настоящей работы: в системе с локальным электрон-фононным взаимодействием может существовать связанное состояние. Подчеркнем, что в системах как с пространственно однородным, так и с точечным взаимодействием связанных состояний нет. В то же время связанное состояние должно появляться и при других видах функции локализации, отличных от (11). Существенным является только требование на характерный размер области локализации. Этот размер должен быть порядка критического размера a_* . Выражение для критического размера можно единственным образом составить из параметров, входящих во второе слагаемое формулы (10). Получим (в обычных единицах)

$$a_* = \frac{\hbar}{\left(2m \sum_q \frac{M_q^2}{\omega_q}\right)^{1/2}}. \quad (12)$$

Как было показано нами в [2], появление таких областей с локальным электрон-фононным взаимодействием наиболее вероятно в углеродных наноструктурах, состоящих из смеси sp^2/sp^3 гибридованных атомов углерода, поскольку sp^3 - и sp^2 -области существенно различны по своим электронным и фононным свойствам. Именно в такой наноструктуре была обнаружена аномально высокая полевая эмиссия с низкой эффективной работой выхода. В [3] впервые было показано, что полевая эмиссия из углеродных наноструктур, и в частности, из алмазоподобных пленок, происходит из малых областей — эмиссионных центров, образованных атомами углерода с sp^2 -гибридизацией электронных оболочек, которые окружены большими областями с атомами, имеющими sp^3 -гибридизацию. В настоящее время эти представления стали общепринятыми.

Эмиссионный центр — типичный пример области локализации.

Хотя существует много моделей подобного эффекта [7], общепринятой микроскопической теории эмиссии до настоящего времени нет. Известно [8,9], что если имеется уровень, через который происходит резонансное туннелирование, то аномально высокая полевая эмиссия с низкой эффективной работой выхода может быть легко объяснена. Нам представляется, что естественным объяснением такого туннелирования является туннелирование через уровень, образованный за счет локального электрон-фононного взаимодействия.

Авторы признательны А.Я. Вулю за стимулирующее внимание к работе и К.Ц. Цендину за доброжелательное обсуждение.

Список литературы

- [1] M. Galperin, M.A. Ratner, A. Nitzan. *J. Phys.: Cond. Matter* **19**, 103 201 (2007).
 [2] K.V. Reich, E.D. Eidelman. *EPL* **85**, 47 007 (2009).

- [3] A.T. Dideykin, E.D. Eidelman, A.Ya. Vul'. *Solid State Commun.* **126**, 494 (2003).
 [4] A. Vul, K. Reich, E. Eidelman, M.L. Terranova, A. Ciorba, S. Orlanducci, V. Sessa, M. Rossi. *Adv. Sci. Lett.* **3**, 110 (2010).
 [5] B. Dora, M. Gulacsi. *Phys. Rev. B* **78**, 165 111 (2008).
 [6] G.D. Mahan. *Many-particle physics*. Plenum Press, N.Y. (1993). 1045 p.
 [7] R.G. Forbs. *Ultramicroscopy* **95**, 1 (2003).
 [8] K.J. Jensen. *Ultramicroscopy* **95**, 29 (2003).
 [9] A.N. Obraztsov, A.P. Volkov, A.I.A. Zakhidov, Yu.V. Petrushenko, O.P. Satanovskaya. *Surf. Eng.* **19**, 429 (2003).