

Високочастотна провідність вуглецевих нанотрубок zigzag-конфігурації

А.В. Коротун^{1,*}, І.М. Тігов², Я.В. Карандась¹

¹ Запорізький національний технічний університет, вул. Гоголя, 64, 69063 Запоріжжя, Україна

² Таврійський державний агротехнологічний університет,
пр. Б. Хмельницького, 18, 72310 Мелітополь, Україна

(Одержано 25.03.2015; опубліковано online 10.06.2015)

В одноелектронному наближенні досліджено частотні залежності поверхневої провідності вуглецевих нанотрубок zigzag-конфігурації. Розрахунки проведено для нанотрубок із напівпровідниковим та металевим типами провідності. Проаналізовано вплив хіральності на поведінку повної провідності та її окремих складових.

Ключові слова: Вуглецева нанотрубка, Хіральність, Провідність, Міжзонні переходи, Частота, Осциляції.

PACS numbers: 73.22. - f, 73.25. + i, 73.63.Fg

1. ВСТУП

Розвиток сучасної наноелектроніки створює засади для нового кроку у вирішенні проблеми мініатюризації пристроїв передачі, прийому та обробки інформації. Одним із цих кроків є використання останніх досягнень молекулярної електроніки, яка маніпулює поодинокими атомами й молекулами. В її основі лежить використання нових наноматеріалів, таких як фулерени і вуглецеві нанотрубки [1-7], органічні полімери [8], структури на основі квантових ям, дрітків і квантових точок [9]. Подібні системи представляють собою нанорозмірні неоднорідності різної природи і конфігурації, які забезпечують просторове обмеження руху носіїв заряду в одному чи декількох напрямках.

Просторове квантування руху електронів призводить до дискретизації енергетичного спектра з енергетичними рівнями, що визначаються розміром і формою наноструктури. Цей ефект, зокрема, зумовлює унікальну властивість одностінних вуглецевих нанотрубок zigzag-конфігурації змінювати свою провідність на декілька порядків, від напівпровідникової до металевої, при зміні радіуса на декілька ангстремів [10].

Крім ефекту просторового обмеження руху носіїв заряду, характерна для наноструктур просторова неоднорідність створює в них наномасштабні неоднорідності електромагнітних полів. У багатьох випадках вони породжують значну просторову дисперсію, що відіграє істотну роль в оптиці матеріалів [11]. Однією з основних оптичних характеристик вуглецевих нанотрубок є високочастотна провідність.

Отже, метою даної роботи є дослідження поведін-

ки високочастотної провідності вуглецевих нанотрубок zigzag-конфігурації з різною хіральністю.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Розглянемо одношарову вуглецеву нанотрубку, вісь якої орієнтовано вдовж осі z декартової системи координат. Припустимо, що на нанотрубку падає плоска електромагнітна хвиля $\mathbf{E}(t) = \mathbf{e}_z \mathcal{E}_0 e^{-i\omega t}$, поляризована вдовж її осі, а хвильовий вектор \mathbf{k} (і, відповідно, напрям поширення хвилі) перпендикулярний осі вуглецевої нанотрубки. Електромагнітна хвиля збуджує у вуглецевій нанотрубці електричний струм густиною $\mathbf{j}(t) = \mathbf{e}_z j_0(\omega) e^{-i\omega t}$. Тут і надалі вважатимемо, що довжина хвилі $\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}|$ набагато більша за радіус вуглецевої нанотрубки, але набагато менша за її довжину L . В цьому випадку амплітуда густини індукованого у нанотрубці струму $j_0(\omega)$ та амплітуда плоскої хвилі \mathcal{E}_0 пов'язані співвідношенням:

$$j_0(\omega) = \sigma(\omega) \mathcal{E}_0, \quad (1)$$

де $\sigma(\omega)$ – поверхнева провідність вуглецевої нанотрубки, яка в одноелектронному наближенні може бути записана у вигляді [12]:

$$\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + \sigma_2(\omega), \quad (2)$$

де

$$\sigma_1(\omega) = \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar \left(i\omega - \frac{1}{\tau} \right) R} \sum_{s=1}^a \int \frac{\partial \varepsilon_c(p,s)}{\partial p} \frac{\partial}{\partial p} \left\{ f[\varepsilon_c(p,s)] - f[-\varepsilon_c(p,s)] \right\} dp, \quad (3)$$

$$\sigma_2(\omega) = \frac{i\omega e^2}{\pi^2 \hbar^2 R} \sum_{s=1}^a \int \frac{\omega_{cv}(p,s) \mathcal{R}_{cv}^2(p,s) \left\{ f[\varepsilon_c(p,s)] - f[-\varepsilon_c(p,s)] \right\}}{\omega_{cv}^2(p,s) - \left(\omega + \frac{i}{\tau} \right)} dp \quad (4)$$

* andko@zntu.edu.ua

частини поверхневої провідності, зумовлені внутрішньозонними та міжзонними переходами відповідно. В формулах (3), (4): τ – час релаксації; $R = \left(\sqrt{3b\sqrt{m^2 + mn + n^2}}\right) / 2\pi$ – радіус одношарової нанотрубки; m, n – індекси хіральності; $b = 0,142$ нм – міжатомна відстань у кристалічній ґратці графену; p – квазіімпульс електронів, що змінюється в межах $-a \leq p \leq a$;

$$f[\varepsilon_c(p, s)] = \left\{ \exp\left(\frac{\varepsilon_c(p, s)}{k_B T}\right) + 1 \right\}^{-1} \quad (5)$$

розподіл Фермі – Дірака; T – температура електронної підсистеми вуглецевої нанотрубки;

$$\varepsilon_c(p, s) = \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos \frac{3pb}{2h} \cos \frac{\pi s}{m} + 4 \cos^2 \frac{\pi s}{m}} \quad (6)$$

дисперсійний закон руху π -електронів у зоні провідності, $\gamma_0 = 2,7$ eV – інтеграл перекриття;

$$\omega_{cv}(p, s) = \frac{2\varepsilon_c(p, s)}{h} \quad (7)$$

частота міжзонних переходів;

$$\mathcal{I}_2 = \sum_{s=1}^m \int_{-a}^a \frac{\left(1 + \cos \frac{3pb}{2h} \cos \frac{\pi s}{m} - 2 \cos^2 \frac{\pi s}{m}\right) \operatorname{th}\left(\frac{\varepsilon_c(p, s)}{2k_B T}\right) dp}{\left[\left(\frac{4\varepsilon_c^2(p, s)}{h^2} - \omega^2 + \frac{1}{\tau^2}\right)^2 + \frac{4\omega^2}{\tau^2}\right] \varepsilon_c^3(p, s)} \quad (12)$$

$$\mathcal{I}_3 = \sum_{s=1}^m \int_{-a}^a \frac{\left[\frac{4\varepsilon_c^2(p, s)}{h^2} - \omega^2 + \frac{1}{\tau^2}\right] \left(1 + \cos \frac{3pb}{2h} \cos \frac{\pi s}{m} - 2 \cos^2 \frac{\pi s}{m}\right) \operatorname{th}\left(\frac{\varepsilon_c(p, s)}{2k_B T}\right) dp}{\left[\left(\frac{4\varepsilon_c^2(p, s)}{h^2} - \omega^2 + \frac{1}{\tau^2}\right)^2 + \frac{4\omega^2}{\tau^2}\right] \varepsilon_c^3(p, s)} \quad (13)$$

В подальшому скористаємось формулами (9) і (11) для розрахунків високочастотної поверхневої провідності нанотрубок різної хіральності.

3. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розрахунки було проведено для нанотрубок zig-zag-конфігурації за кімнатної температури у випадку, коли час релаксації $\tau = 3 \cdot 10^{-14}$ с.

На рис. 1 наведено залежності дійсної та уявної частин внутрішньозонної провідності від частоти для вуглецевих нанотрубок з хіральностями (14,0) та (15,0). Як видно з рисунку, поведінка дійсної частини провідності для цих нанотрубок якісно співпадає. Проте кількісно вони відрізняються приблизно на два порядки внаслідок більш високої заселеності зони провідності у випадку нанотрубки з металевим типом провідності. Аналогічна картина має місце і для уявної частини внутрішньозонної провідності. Відмінність поведінки $\operatorname{Im} \sigma_1$ від $\operatorname{Re} \sigma_1$ полягає лише

$$\mathcal{R}_{cv}(p, s) = -\frac{b\gamma_0^2}{2\varepsilon_c^2(p, s)} \left(1 + \cos \frac{3pb}{2h} \cos \frac{\pi s}{m} - 2 \cos^2 \frac{\pi s}{m}\right) \quad (8)$$

матричний елемент оператора дипольного моменту вуглецевої нанотрубки [13].

Обчислюючи похідні за імпульсом та підставляючи отримані результати в (3), після деяких математичних перетворень, матимемо

$$\sigma_1(\omega) = -\frac{e^2}{2\pi^2 h R} \left(\omega^2 + \frac{1}{\tau^2}\right) \left(\frac{1}{\tau} + i\omega\right) \mathcal{I}_1, \quad (9)$$

де введено позначення

$$\mathcal{I}_1 = -\frac{9\gamma_0^3 b^2}{h^2 k_B T} \sum_{s=1}^m \cos^2 \frac{\pi s}{m} \int_{-a}^a \frac{\sin^2 \frac{3pb}{2h}}{\varepsilon_c(p, s) \operatorname{ch}^2\left(\frac{\varepsilon_c(p, s)}{2k_B T}\right)} dp \quad (10)$$

Підставляючи формули (5) – (8) в (4) та розділяючи дійсну й уявну частини, отримуємо

$$\sigma_2(\omega) = \frac{e^2 \gamma_0^4 \omega}{\pi^2 h^3 R} \sum_{s=1}^m \left(\frac{\omega}{\tau} \mathcal{I}_2 + \frac{i}{2} \mathcal{I}_3\right), \quad (11)$$

де

в тому, що $\operatorname{Im} \sigma_1$ при відносно невеликих частотах зростає до максимуму, який має місце при $\omega \approx 5 \cdot 10^{13}$ с⁻¹, в той час як $\operatorname{Re} \sigma_1$ постійно спадає. Цей факт зумовлений збільшенням інтенсивності переходів за даної частоти.

Для міжзонної провідності (рис. 2) мають місце осциляції як дійсної, так і уявної частин. Причому для випадку металевих нанотрубок осциляції дійсної частини починаються вже при $\omega \approx 5 \cdot 10^{14}$ с⁻¹, а для напівпровідникових – при $\omega \sim 10^{15}$ с⁻¹. Осциляції виникають у випадку, коли частота електромагнітної хвилі співпадає з частотою міжзонних переходів електронів. Амплітуда осциляцій $\operatorname{Re} \sigma_2$ більша для нанотрубок з хіральністю (14,0). Осциляції $\operatorname{Im} \sigma_2$ нанотрубок (15,0) починаються при $\omega \approx 2,7 \cdot 10^{15}$ с⁻¹, а нанотрубок (14,0) – при $\omega \sim 10^{15}$ с⁻¹, що пояснюється більшим значенням величини $\varepsilon_c(p, s)$ для нанотрубок із металевим типом провідності за фіксованих p і s .

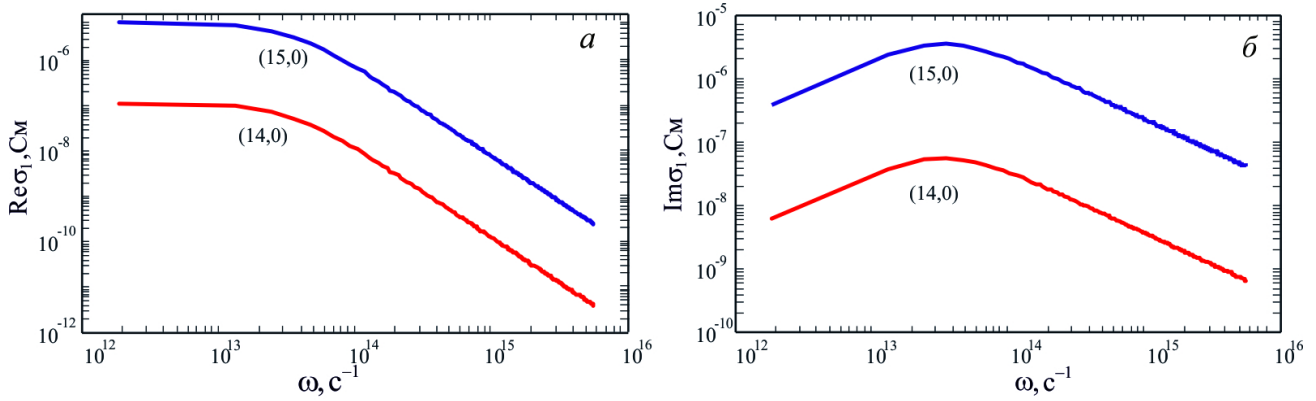


Рис. 1 – Частотні залежності дійсної (а) та уявної (б) частин внутрішньозонної провідності вуглецевих нанотрубок з хіральностями (14,0) і (15,0)

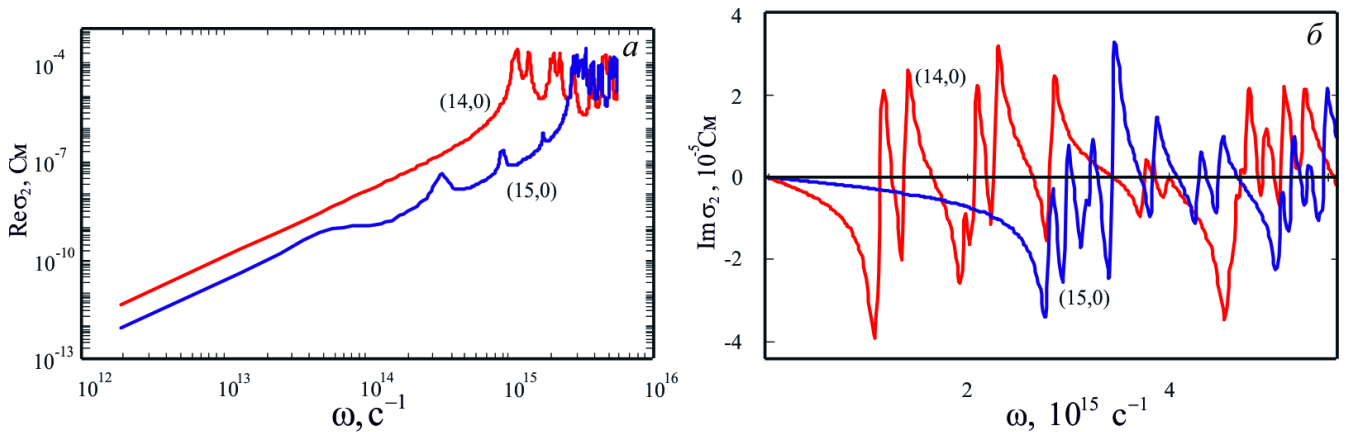


Рис. 2 – Частотні залежності дійсної (а) та уявної (б) частин міжзонної провідності вуглецевих нанотрубок з хіральностями (14,0) і (15,0)

На рис. 3 наведені частотні залежності „повної“ провідності для нанотрубок хіральністю (14,0) і (15,0). Амплітуди осциляцій уявної частини на порядок менші за амплітуди осциляцій дійсної частини. Крім того, осциляції $\text{Re } \sigma$ для нанотрубки з металевим типом провідності починаються за менших частот, ніж для нанотрубки з напівпровідниковим типом провідності і мають більший період і меншу амплітуду (рис. 3, а). В той час, як для $\text{Im } \sigma$ – навпаки – у випадку металевих нанотрубок осциляції проявляються за більших частот, ніж для напівпровідникових, а їх амплітуди і періоди практично однакові (рис. 3, б).

На відміну від високочастотного діапазону, в низькочастотному діапазоні ($\omega < 10^{15}$ c^{-1}) провідності напівпровідникових і металевих вуглецевих нанотрубок істотно відрізняються одна від одної. Так, дійсна частина провідності нанотрубок (15,0) зменшується зі зменшенням частоти поля, досягаючи мінімуму при $\omega \approx 6 \cdot 10^{14}$ c^{-1} , а потім зростає на два порядки. Для нанотрубок (14,0) $\text{Re } \sigma$ також зменшується зі зменшенням частоти, досягаючи мінімуму при $\omega \approx 10^{14}$ c^{-1} , а потім незначно зростає. Це зумовлено тим фактом, що внесок міжзонних рухів електронів у провідність зменшується зі зменшенням частоти. При цьому домінуючим стає внесок внутрішньозонних рухів електронів. У зв'язку з тим, що густина елек-

тронних станів в околі рівня Фермі металевих вуглецевих нанотрубок не дорівнює нулю, внесок внутрішньозонних рухів у провідність металевих нанотрубок великий, що призводить до більших значень провідності. У напівпровідникових же нанотрубках густина станів в околі рівня Фермі дорівнює нулю, що призводить до слабкої заселеності зони провідності даних типів нанотрубок за кімнатної температури і, відповідно, до дуже малого внеску внутрішньозонних рухів електронів у провідність. У зв'язку з тим, що в низькочастотному діапазоні внесок внутрішньозонних рухів електронів у провідність металевих нанотрубок домінує над внеском міжзонних переходів, для розрахунку провідності металеві нанотрубки в даному діапазоні другим доданком у виразі (2) можна знехтувати.

На рис. 4 зображено залежності $\text{Re } \sigma_1(\omega)$ та $\text{Im } \sigma_1(\omega)$ вуглецевих нанотрубок (2,0) і (3,0). Якісно поведінка дійсної частини провідності для нанотрубок із напівпровідниковими і металевими властивостями співпадає. Проте за величиною вони відрізняються приблизно на 20 порядків, що пояснюється слабкою заселеністю зони провідності цих нанотрубок. Якщо порівняти рис. 4 і 1, то бачимо, що реальна частина провідності металевих нанотрубок зі зменшенням індексів хіральності поводить себе наступним чином: при $\omega \sim 10^{12} \div 10^{13}$ c^{-1} вони практично не відрізняються, а за більших частот зменшення

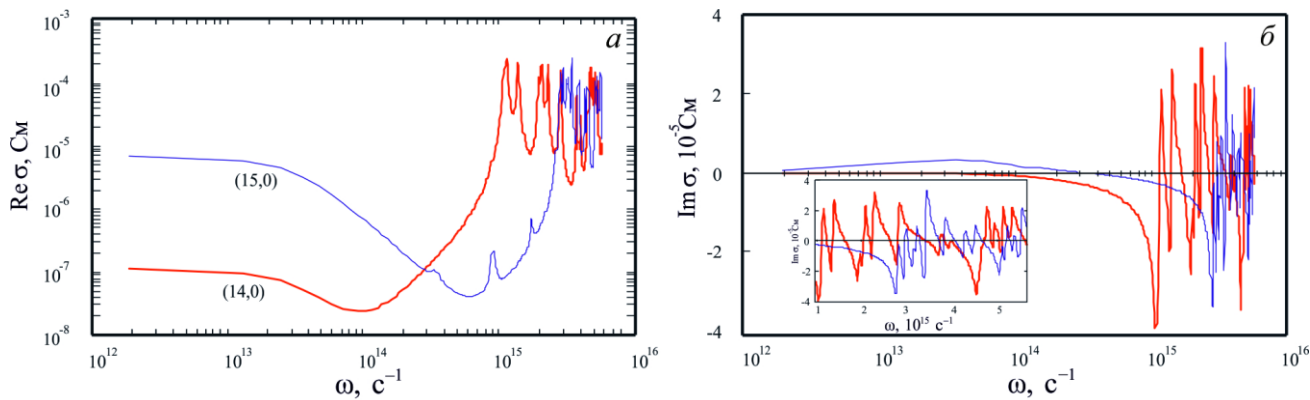


Рис. 3 – Частотні залежності дійсної (а) та уявної (б) частин „повної“ провідності вуглецевих нанотрубок з хіральностями (14,0) і (15,0)

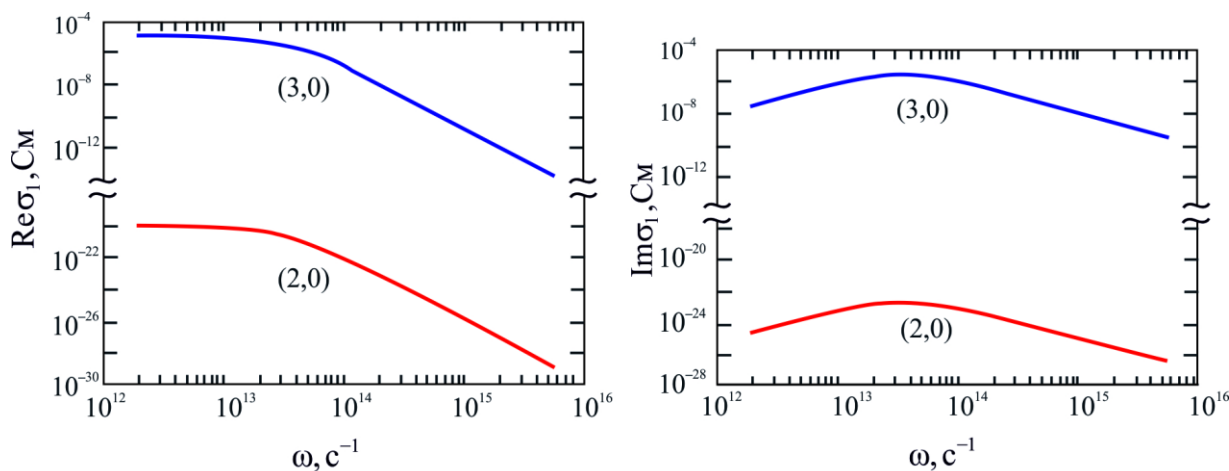


Рис. 4 – Частотні залежності дійсної (а) та уявної (б) частин внутрішньозонної провідності вуглецевих нанотрубок з хіральностями (2,0) і (3,0)

провідності для нанотрубок із більшим індексом хіральності більш істотно. Поведінка $Re \sigma_1$ для випадку нанотрубок із напівпровідниковим типом провідності з хіральностями (2,0) і (14,0) якісно подібна, а за величиною відрізняються на 18 порядків. Для уявної частини внутрішньозонної провідності залежності також подібні. Проте у випадку менших хіральностей максимум виражений слабкіше. Кількісно картина така ж сама, як і для дійсної частини: для металевих нанотрубок величина $Im \sigma_1$ близька, а для напівпровідникових нанотрубок – відрізняється на 18 порядків. Така значна відмінність у значеннях провідності для напівпровідникових нанотрубок зумовлена особливостями зонної структури.

Рис. 5 демонструє поведінку дійсної та уявної частин міжзонної провідності для нанотрубок (2,0) і (3,0). Дійсна частина провідності нанотрубок із напівпровідниковими властивостями з ростом частоти монотонно зростає, а уявна – монотонно спадає. На відміну від напівпровідникових нанотрубок, для металевих мають місце осциляції як дійсної (починаючи з $\omega \sim 10^{14} s^{-1}$), так і уявної частин. Причому зі зростанням частоти амплітуда осциляцій $Re \sigma_2$ збіль-

шується, а період – зменшується в той час, як для $Im \sigma_2$ з ростом частоти збільшується як період осциляцій, так і їх амплітуда. Пояснення цього факту аналогічне випадку міжзонної провідності нанотрубок (14,0) і (15,0).

Для повної провідності нанотрубок із хіральністю (3,0) (рис. 6, а) спостерігається спадання дійсної частини до $\omega \sim 10^{15} s^{-1}$, а потім зростання з осциляціями (зі збільшенням ω період зменшується, а амплітуда збільшується). У випадку напівпровідникових нанотрубок $Re \sigma$ весь час монотонно зростає, що пояснюється домінуючою роллю міжзонної провідності. Уявна частина повної провідності нанотрубок (2,0) залишається майже незмінною до $\omega \sim 10^{15} s^{-1}$, а потім різко зменшується. Для нанотрубок (3,0) уявна частина поводить наступним чином: спочатку зростає до максимуму при $\omega ; 3 \cdot 10^{13} s^{-1}$, потім спадає, а при $\omega ; 2 \cdot 10^{15} s^{-1}$ спостерігаються слабкі осциляції. Отже, за частот $\omega < 2 \cdot 10^{15} s^{-1}$ основний внесок у повну провідність нанотрубок (2,0) і (3,0) визначає внутрішньозонна провідність, а за більших частот – міжзонна.

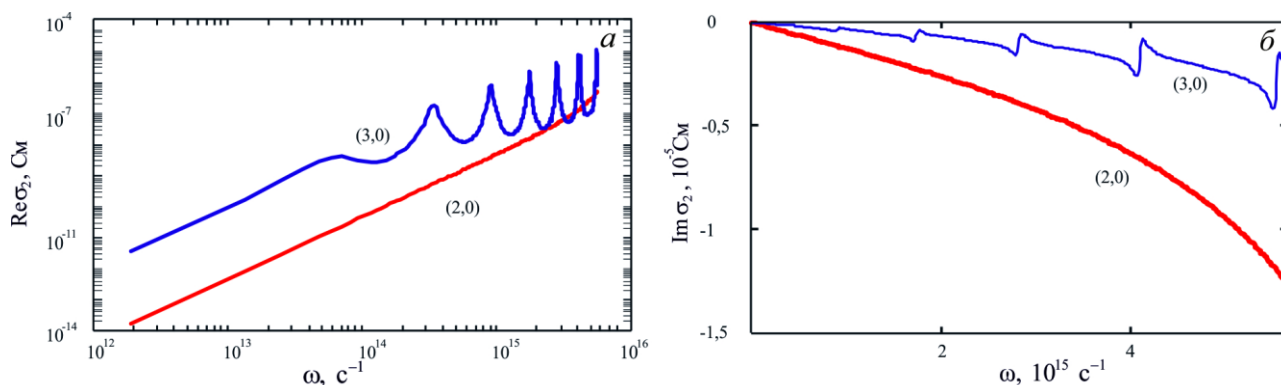


Рис. 5 – Частотні залежності дійсної (а) та уявної (б) частин міжзонної провідності вуглецевих нанотрубок з хіральностями (2,0) і (3,0)

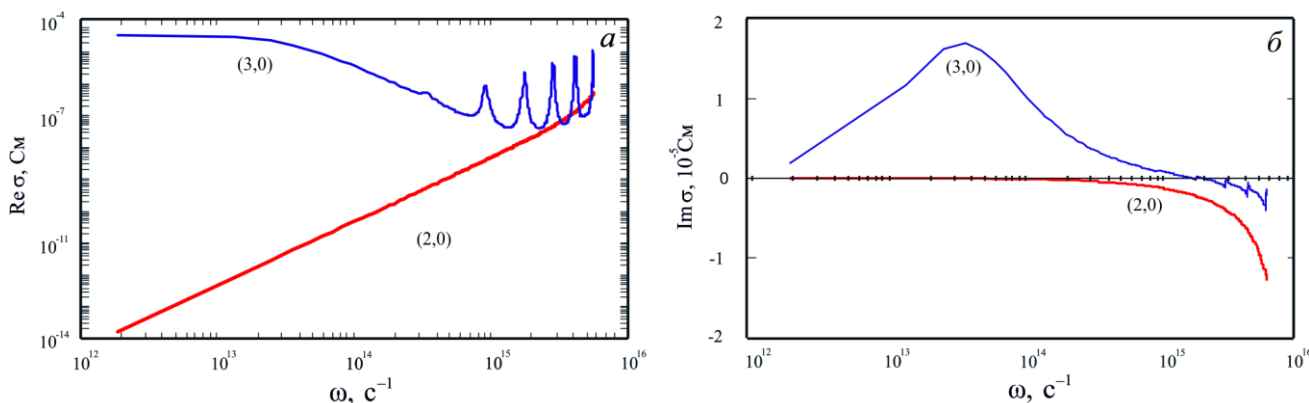


Рис. 6 – Частотні залежності дійсної (а) та уявної (б) частин „днової“ провідності вуглецевих нанотрубок з хіральностями (2,0) і (3,0)

4. ВИСНОВКИ

Показано, що поведінка дійсної та уявної частин внутрішньозонної провідності нанотрубок з різним типом провідності якісно співпадає. Проте кількісно вони істотно відрізняються внаслідок більш високої заселеності зони провідності.

Для міжзонної провідності нанотрубок з більшими хіральностями мають місце осциляції як дійсної, так і уявної частин, причиною яких є близькість частоти електромагнітної хвилі до частоти міжзонних переходів електронів. Причому для випадку металевих нанотрубок осциляції дійсної частини починаються за менших частот. Для нанотрубок з малими

хіральностями осциляції провідності мають місце лише для металевих нанотрубок.

Встановлено, що в низькочастотному діапазоні поведінка дійсної та уявної частин повної провідності для випадку металевих і напівпровідникових нанотрубок істотно відрізняються. Це зумовлено тим, що зі зменшенням частоти внесок міжзонних переходів у провідність зменшується і домінуючим стає внесок внутрішньозонних переходів. У високочастотному діапазоні для напівпровідникових нанотрубок, на відміну від металевих, осциляції дійсної та уявної частин повної провідності мають місце лише для випадку високих хіральностей.

Высокочастотная проводимость углеродных нанотрубок zigzag-конфигурации

А.В. Коротун¹, И.Н. Титов², Я.В. Карандась¹

¹ Запорозький національний технічний університет, ул. Гоголя, 64, 69063 Запорозьжє, Україна

² Таврицький державний аграрно-технологічний університет, пр. Б. Хмельницького, 18, 72310 Мелітополь, Україна

В одноелектронном приближении исследованы частотные зависимости поверхностной проводимости углеродных нанотрубок zigzag-конфигурации. Расчеты проведены для нанотрубок с полупроводниковым и металлическим типом проводимости. Проанализировано влияние хиральности на поведение полной проводимости и ее отдельных составляющих.

Ключевые слова: Углеродная нанотрубка, Хиральность, Проводимость, Межзонные переходы, Частота, Осциляции.

High-frequency Conductivity of Carbon Nanotubes of Zigzag-configuration

A.V. Korotun¹, I.M. Titov², Ya.V. Karandas¹

¹ Zaporizhzhya National Technical University, 64, Gogol Str., 69063 Zaporizhzhya, Ukraine

² Taurian State Agrotechnology University, 18, B. Khmelnytsky Pr., 72310 Melitopol, Ukraine

The frequency dependences of the surface conductivity of carbon nanotubes of zigzag-configuration have been investigated in the single-electron approximation. The calculations have been performed for nanotubes with semiconductor and metallic conductivity. The influence of chirality on the total conductivity and its individual components have been analyzed.

Keywords: Carbon nanotubes, Chirality, Conductivity, Interband transitions, Frequency, Oscillations.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C. Eklund, *Science of fullerenes and carbon nanotubes* (New York: Academic press: 1996).
2. M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, Ph. Avouris, *Carbon nanotubes* (Berlin Heidelberg: Springer-Verlag: 2001).
3. M.V. Shuba, G.Ya. Slepyan, S.A. Maksimenko, C. Thomson, A. Lakhtakia, *Phys. Rev. B* **79**, 155403 (2009).
4. М.В. Белоненко, С.Ю. Глазов, Н.Е. Мещеряков, *ФТП* **44**, 1248 (2010) (M.V. Belonenko, S.Yu. Glazov, N.E. Mescheryakova, *Semiconductors* **44**, 1211 (2010)).
5. K.G. Batrakov, O.V. Kibis, P.P. Kuzhir, M.R. da Costa, M.E. Portnoi, *J. Nanophoton.* **4**, 041665 (2010).
6. Qi. Zhang, E.H. Hároz, Z. Jin, L. Ren, X. Wang, R.S. Arvidson, A. Lüttge, Ju. Kono, *Nano Lett.* **13**, 5991 (2013).
7. Н.Р. Садыков, *ЖТФ* **84** № 8, 88 (2014) (N.R. Sadykov, *Tech. Phys.* **59**, 1191 (2014)).
8. *Printed organic and molecular electronics* (Eds. D.R. Gamota, P. Brazis, K. Kalyanasundaram, J. Zhang) (Massachusetts: Kluwer Academic Press: 2004).
9. M.J. Kelly, *Low-dimensional semiconductors: materials, physics, technology, devices* (New York: Clarendon Press: 1995).
10. П.Н. Дьячков, *Электронные свойства и применение нанотрубок* (Москва: Бинوم: 2011) (P.N. D'yachkov, *Elektronnyye svoystva i primeneniye nanotrubok* (Moskva: Binom: 2011)).
11. В.М. Агранович, В.Л. Гинзбург, *Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов* (Москва: Наука: 1979) (V.M. Agranovich, V.L. Ginzburg, *Kristaloptika s uchetom prostranstvennoy dispersii i teoriya eksitonov* (Moskva: Nauka: 1979)).
12. *Electrodynamic properties of carbon nanotubes. Electromagnetic Fields in Unconventional Structures and Materials* Ed. O.N. Singh, A. Lakhtakia (New York: John Wiley & Sons, Inc: 2000).
13. А.М. Немилентцев, Г.Я. Слепян, С.А. Максименко, *Вестник БГУ. Сер. 1*, №3, 18 (2008) (A.M. Nemilentsev, G.Ya. Slepyan, S.A. Maksimenko, *Vestnik BGU. Ser. 1*, No 3, 18 (2008)).