

## Моделювання наноакустоелектронного перетворювача на основі графенових нанотрубок

Р.М. Пелешчак\*, І.Р. Пелешчак, О.В. Кузик, О.О. Даньків

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,  
вул. Івана Франка, 24, 82100 Дрогобич, Україна

(Одержано 15.02.2016, у відредагованій формі – 12.06.2016, опубліковано online 21.06.2016)

У роботі побудовано модель наноакустоелектронного перетворювача на основі графенової нанотрубки та розраховано амплітудно-частотну характеристику. У межах даної моделі встановлено частотні залежності амплітуди деформації, поверхневої концентрації електронів та електростатичного потенціалу. Встановлено, що при збільшенні концентрації електронів та зменшенні радіуса нанотрубки чутливість наноперетворювача зростає.

**Ключові слова:** Графенова нанотрубка, Акустична хвиля, Акустоелектронна взаємодія, Деформація.

DOI: [10.21272/jnep.8\(2\).02015](https://doi.org/10.21272/jnep.8(2).02015)

PACS numbers: 68.65.Pq, 62.65.+k

### 1. ВСТУП

Унікальні електронні та механічні властивості одношарового графену, зокрема висока рухливість носіїв при кімнатній температурі ( $\sim 10^5$  см<sup>2</sup>/В·с), електрон-діркова симетрія та високі значення модуля Юнга ( $\sim 10^{12}$  Па), роблять цей матеріал дуже перспективним для наноелектроніки [1]. Зокрема, для створення швидкодіючих одноелектронних транзисторів, фотодетекторів, інфрачервоних світлодіодів та низькобар'єрних діодів Шоткі на основі графену [2]. Нанотрубки сформовані на основі графену мають високу резонансну частоту (більше 3 GHz), оскільки їх модуль Юнга становить  $\sim 1$  ТПа [3-5] і залежно від виду симетрії володіють металічними або напівпровідниковими властивостями [5].

Для того, щоб створити на основі графену деякий прилад, або здійснити експериментальне визначення властивостей самого графену, необхідно мати металічні контакти. Один із способів отримання графену полягає в тепловій дії на карбід кремнію (SiC), у результаті чого атоми кремнію покидають поверхневі шари SiC, а атоми карбону, що залишилися, формують гексагональну структуру, утворюючи епітаксійний графеновий шар [6]. Але при цьому моношар графену набуває від'ємного заряду, внаслідок чого рівень Фермі зміщується від свого початкового положення у діраківській точці вгору, що порушує електрон-діркову симетрію [1, 7]. Щоб уникнути цього, розривають ковалентні зв'язки в системі G – SiC шляхом інтеркалювання водню в простір між листом графену і SiC-підкладкою [8, 9].

Другий спосіб отримання епітаксійного графену – це каталітичний ріст графену на поверхні перехідних металів з газів, що містять карбон. Графенову нанотрубку можна представити як результат склеювання графенового листа в циліндричну поверхню. Електронні властивості нанотрубки, такі як концентрація і рухливість носіїв, ширина забороненої зони, провідність, визначаються її геометрією, основними параметрами якої є діаметр і хіральність, тобто кут орієнтації графітової поверхні відносно осі трубки [10].

Важливою властивістю нанотрубки є наявність в ній сильної взаємодії між її електронними характеристиками і механічною деформацією [11-14]. Внаслідок деформації змінюється ширина забороненої зони, концентрація носіїв, фононний спектр та ін. Це, в свою чергу, відображається на електропровідності нанотрубки. Отже, нанотрубка є дуже ефективним перетворювачем механічного коливання в електричний сигнал і навпаки, що робить її унікальним елементом наноелектромеханічних систем.

Серед головних характеристик, що визначають можливість практичного використання приладів на основі електромеханічних властивостей графенових нанотрубок (ГНТ), є частотна характеристика цього приладу. Чим більша частота електричного сигналу, на який адекватно реагує цей прилад, тим більша швидкість перетворення інформації і, в кінцевому випадку, зростає його ефективність [12].

У даній роботі досліджено акустоелектронні ефекти в графеновій нанотрубці та розраховано амплітудно-частотні характеристики наноелектромеханічного перетворювача на основі графенової нанотрубки.

### 2. МОДЕЛЬ

Розглянемо графенову нанотрубку висотою  $H$ , радіусом  $R_0$  та товщиною стінок  $d$  ( $d \ll R_0$ ), яка піддається впливу акустичної хвилі з частотою  $\omega$ . Будемо вважати, що хвиля поширюється вздовж осі  $Oz$ , яка співпадає з аксіальною віссю нанотрубки. Компоненти вектора зміщень  $i$ -го атома карбону  $\mathbf{u}_i(t, \mathbf{r})$  знаходимо з врахуванням того, що зміщення кожного атома карбону можна розкласти в ряд через зміщення атомів  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$  у континуальному наближенні [10]:

$$\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_0 \propto (\boldsymbol{\rho}_i \nabla) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

де  $\boldsymbol{\rho}_i$  – радіус-вектор найближчих сусідів;  $\mathbf{u}_0$  – вектор зміщення центрального атома;  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$  – поле зміщень атомів, яке визначається у циліндричній систе-

\*peleshchak@rambler.ru

мі координат на основі наступної системи рівнянь:

$$(\lambda + 2G) \frac{\partial \theta}{\partial r} = \rho \frac{\partial^2 u_r}{\partial t^2}, \quad (2)$$

$$(\lambda + 2G) \frac{\partial \theta}{\partial z} = \rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2}, \quad (3)$$

де  $\lambda$ ,  $G$  – коефіцієнти Ламе;  $\rho$  – густина графену;  
 $\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial(r u_r)}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z}$ .

Розв'язки системи рівнянь (2), (3) шукатимемо у вигляді:

$$u_r(r, z, t) = U(r) e^{i\omega t} \cos kz,$$

$$u_z(r, z, t) = W(r) e^{i\omega t} \sin kz,$$

де  $k = \omega/c_l$ ;  $c_l$  – позовжня швидкість акустичних коливань.

Просторово-неоднорідна деформація, створена акустичною хвилею, модулює поверхневу енергію  $\sigma$ , що призводить до виникнення латеральної механічної напруги  $\sigma_{rz} = \sigma_0 e^{i\omega t} \sin kz$ , яка компенсується напругою зсуву в середовищі. Гранична умова, що виражає баланс латеральних напружень має вигляд:

$$G \left( \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right)_{r=R_0} = \sigma_0 \sin kz. \quad (4)$$

Окрім цього, повинна виконуватись умова квантування акустичних фононних мод [15]:

$$\frac{1}{2Hd} \int_0^H \int_{R_0-d}^{R_0} (u_r^* u_r + u_z^* u_z) dz dr = \frac{\hbar}{2M\omega}, \quad (5)$$

$M$  – маса карбонової нанотрубки.

Тоді деформація  $\xi$  на поверхні графенової нанотрубки:

$$\xi = \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = \xi_0(R_0, \omega) \cos(\omega t - kz), \quad (6)$$

де  $\xi_0$  – амплітуда деформації, яка визначається із системи рівнянь (2) – (5).

Періодична поверхнева деформація призводить до модуляції дна зони провідності і, відповідно, перерозподілу поверхневої концентрації електронів провідності  $n(x)$  та електростатичного потенціалу  $\varphi(x)$ :

$$n(z) = n_0 + n_1(z) = n_0 + n_1(k) e^{i\omega t + \alpha} \cos kz, \quad (7)$$

$$\varphi(z) = \varphi(k) e^{i\omega t + \alpha} \cos kz, \quad (8)$$

де  $n_1(k)$ ,  $\varphi(k)$  – амплітуди відповідних періодичних збурень.

Запишемо рівняння Пуассона, яке з врахуванням (7) – (8) прийме вигляд:

$$-k^2 \varphi(k) = \frac{e}{\varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} d} n_1(k), \quad (9)$$

де  $\varepsilon_0$ ,  $\tilde{\varepsilon}$  – діелектрична стала та діелектрична проникність середовища, відповідно.

Густина електронного струму:

$$j = n \mu_n \frac{d\chi}{dz}, \quad (10)$$

де  $\mu_n$  – рухливість електронів; електростатичний потенціал  $\chi$  визначається співвідношенням [16, 17]

$$\chi(z) = k_B T \ln \frac{n(z)}{N_i} - e\varphi(z) + a_c \xi(z), \quad (11)$$

де  $N_i = 2 \left( \frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2}$  – ефективна густина станів;

$a_c$  – константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності. Рівняння неперервності з врахуванням (10), (11) можна записати у вигляді:

$$e \frac{\partial n}{\partial t} = k_B T \mu_n \frac{\partial}{\partial z} \left( n \frac{\partial}{\partial z} \ln \frac{n}{N_i} \right) - e \mu_n \frac{\partial}{\partial z} \left( n \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + a_c \mu_n \frac{\partial}{\partial z} \left( n \frac{\partial \xi}{\partial z} \right). \quad (12)$$

Підставивши (6) – (8) в (12), отримаємо:

$$i\omega e n_1(k) = \mu_n k^2 n_0 \left( e\varphi(k) - a_c \xi_0 - k_B T \frac{n_1(k)}{n_0} \right). \quad (13)$$

Розв'язавши систему рівнянь (9), (13), отримаємо:

$$\varphi(k) = \frac{\xi_0 a_c / e}{\sqrt{\left( 1 + \frac{k_B T k^2}{\Phi n_0} \right)^2 + \left( \frac{\omega e}{\Phi \mu_n n_0} \right)^2}}, \quad (14)$$

$$\alpha = -\arctg \frac{e\omega}{\Phi \mu_n n_0 + k_B T \mu_n k^2},$$

$$\text{де } \Phi = \frac{e^2}{\varepsilon_0 \tilde{\varepsilon} d}.$$

### 3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

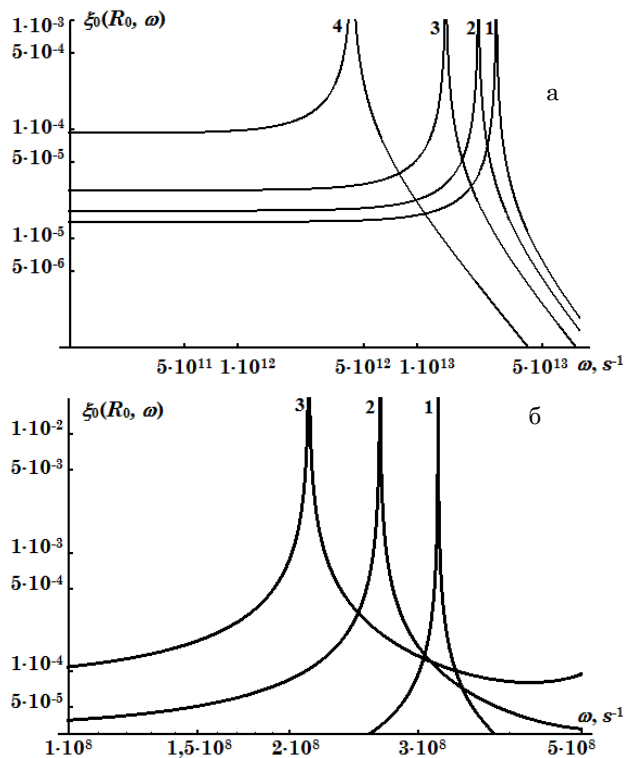
На рис. 1, 2 приведено залежність амплітуди механічної деформації та електростатичного потенціалу від частоти акустичної хвилі при різних значеннях радіуса та довжини карбонової нанотрубки. Розрахунки проводились при наступних значеннях параметрів:  $\sigma = 10^4$  Па,  $T = 300$  К,  $\mu_n = 10^5$  см<sup>2</sup>/В·с,  $a_c = 2,46$  еВ,  $d = 0,15$  нм. При розрахунках враховано розмірну залежність пружних сталей [18].

Як бачимо з рис. 1, у карбоновій нанотрубці спостерігається різке зростання амплітуди механічної деформації при частоті акустичної хвилі  $\omega \sim c_l/L$  (рис. 1, б) та  $\omega \sim c_l/R_0$  (рис. 1, а). Збільшення радіуса карбонової нанотрубки призводить до зменшення резонансних частот та збільшення амплітуди дефо-

рмації. Це пояснюється тим, що із зменшенням радіуса нанотрубки спостерігається монотонне збільшення пружних сталей [18].

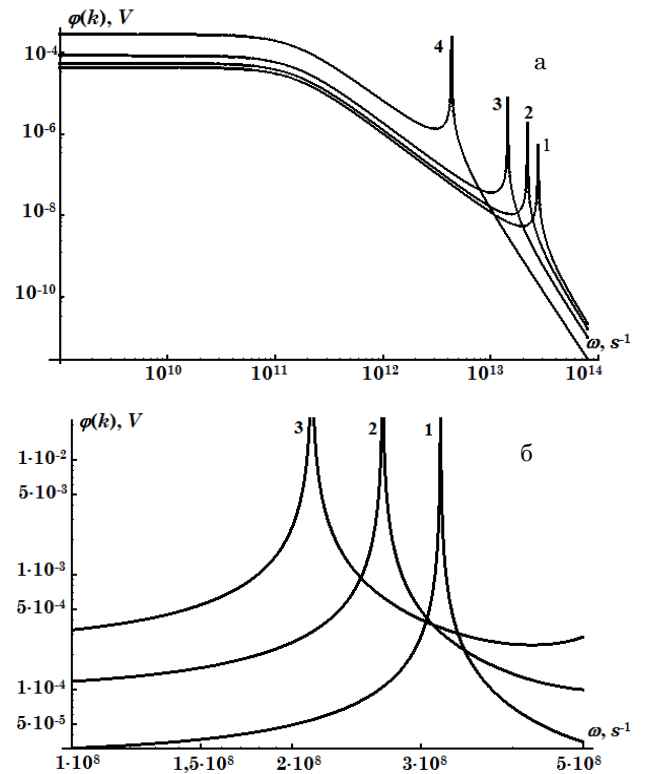
На рис. 2 приведено залежність амплітуди електростатичного потенціалу від частоти акустичної хвилі при різних значеннях радіуса графенової нанотрубки (рис. 2, а) та її довжини (рис. 2, б). Як бачимо з рис. 2, амплітуда електричного потенціалу, який індукується акустичною хвилею, суттєво залежить від частоти акустичної хвилі та геометричних розмірів нанотрубки. При зменшенні радіуса та довжини графенової нанотрубки відбувається монотонне зменшення амплітуди електростатичного потенціалу. Це пояснюється тим, що графенові нанотрубки менших розмірів є менш чутливими до деформації. Як бачимо з рис. 2, у діапазоні частот  $10^9 \text{ c}^{-1} < \omega < 10^{11} \text{ c}^{-1}$  амплітуда електричного потенціалу, який індукується акустичною хвилею, практично не залежить від частоти, але залежить від радіуса нанотрубки.

На рис. 3 приведено залежність амплітуди електростатичного потенціалу від частоти акустичної

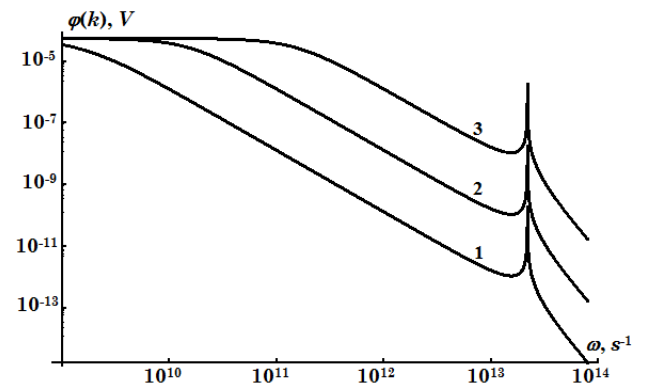


**Рис. 1** – Залежність амплітуди деформації від частоти акустичної хвилі при різних значеннях радіуса карбонової нанотрубки: 1 –  $R_0 = 0,5 \text{ нм}$ ; 2 –  $R_0 = 0,8 \text{ нм}$ ; 3 –  $R_0 = 1,5 \text{ нм}$ ; 4 –  $R_0 = 5 \text{ нм}$  (а) та її довжини: 1 –  $L = 100 \text{ мкм}$ ; 2 –  $L = 120 \text{ мкм}$ ; 3 –  $L = 150 \text{ мкм}$  (б)

хвилі при різних значеннях поверхневої концентрації електронів. Із збільшенням концентрації електронів спостерігається монотонне збільшення амплітуди електростатичного потенціалу. Причому збільшення концентрації електронів призводить до розширення частотного інтервалу, у якому електростатичний потенціал є незмінним. При перевищенні частотою акустичної хвилі деякого значення, яке залежить від концентрації електронів, амплітуда



**Рис. 2** – Залежність амплітуди електростатичного потенціалу від частоти акустичної хвилі при різних значеннях радіуса карбонової нанотрубки: 1 –  $R_0 = 0,5 \text{ нм}$ ; 2 –  $R_0 = 0,8 \text{ нм}$ ; 3 –  $R_0 = 1,5 \text{ нм}$ ; 4 –  $R_0 = 5 \text{ нм}$  (а) та її довжини: 1 –  $L = 100 \text{ мкм}$ ; 2 –  $L = 120 \text{ мкм}$ ; 3 –  $L = 150 \text{ мкм}$  (б)



**Рис. 3** – Залежність амплітуди електростатичного потенціалу від частоти акустичної хвилі при різних значеннях поверхневої концентрації електронів: 1 –  $n_0 = 10^4 \text{ см}^{-2}$ ; 2 –  $n_0 = 10^6 \text{ см}^{-2}$ ; 3 –  $n_0 = 10^8 \text{ см}^{-2}$

електростатичного потенціалу різко зменшується. Це пов'язано з тим, що локальне зміщення дна зони провідності за рахунок деформації компенсується електростатичним зміщенням. Як бачимо з рис. 3, при збільшенні поверхневої концентрації електронів спостерігається незначне зменшення резонансних частот електростатичного потенціалу.

Також слід відзначити, що амплітуда електростатичного потенціалу є пропорційною рухливості електронів у графеновій нанотрубці.

Чутливість акустоелектронного перетворювача визначається співвідношенням

$$\gamma_{\varphi} = \left. \frac{d\varphi}{d\sigma} \right|_{T=const}. \quad (15)$$

Підставивши (14) у (15), отримаємо вираз для чутливості акустоелектронного перетворювача, яка залежить від концентрації електронів, їх рухливості та геометричних розмірів графенової нанотрубки:

$$\gamma_{\varphi} = \frac{\alpha_c / e}{\lambda \sqrt{\left(1 + \frac{k_B T k^2}{\Phi n_0}\right)^2 + \left(\frac{\omega e}{\Phi \mu_n n_0}\right)^2}}. \quad (16)$$

Як бачимо з формули (16), із збільшенням концентрації електронів та їх рухливості чутливість акустоелектронного перетворювача збільшується. Також зменшення товщини графенової нанотрубки призводить до збільшення чутливості перетворювача. Чутливість акустоелектронного перетворювача на основі графенової нанотрубки радіусом 0,5 нм з поверхневою концентрацією електронів  $n_0 = 10^6 \text{ см}^{-2}$  становить  $\sim 10^{-4}$  мкВ/Па. Таким чином, змінюючи техно-

логічно геометричні розміри та концентрацію електронів, можна прогнозовано збільшувати чутливість перетворювача у заданому частотному діапазоні.

#### 4. ВИСНОВКИ

У даній роботі побудовано модель наноакустоелектронного перетворювача на основі графенової нанотрубки. Запропонована модель враховує розмірні залежності пружних сталей та швидкості звуку в графені.

У межах даної моделі встановлено частотні залежності амплітуди деформації, поверхневої концентрації електронів та електростатичного потенціалу.

Встановлено, що при збільшенні концентрації електронів, їх рухливості та зменшенні радіуса нанотрубки чутливість перетворювача зростає.

Показано, що при зменшенні радіуса графенової нанотрубки відбувається монотонне зменшення амплітуди електростатичного потенціалу. Це пояснюється тим, що графенові нанотрубки менших розмірів є менш чутливими до деформації.

### Modeling of the Nano-acoustic-electronic Converter on the Basis of Graphene Nanotubes

R.M. Peleshchak, I.R. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv

Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University, 24, Ivan Franko st., 82100 Drohobych, Ukraine

In paper the model of the nano-acoustic-electronic converter on the basis of graphene nanotube is constructed and the amplitude-frequency characteristic is calculated. Within this model the frequency dependences of amplitude of deformation, surface concentration of electrons and electrostatic potential are established. It is established that at increase in concentration of electrons and reduction of radius of nanotube the sensitivity of the nanoconverter increases.

**Keywords:** Graphene nanotube, Acoustic wave, Acoustic-electronic interaction, Deformation.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
2. F. Xia, T. Mueller, Y. Lin, A. Valdes-Garcia, P. Avouris, *Nat. Nanotechnol.* **4**, 839 (2009).
3. P. Zhang, Y. Huang, P.H. Geubelle, P.A. Klein, K.C. Hwang, *Int. J. Solids Struct.* **39**, 3893 (2002).
4. D. Garcia-Sanchez, A. San Paulo, M.J. Esplandiu, F. Perez-Murano, L. Forró, A. Aguasca, A. Bachtold, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 085501 (2007).
5. Я.С. Гринберг, Ю.А. Пашкин, Е.В. Ильичев, *УФН* **182**, 407 (2012).
6. Q. Zheng, Q. Jiang, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 045503 (2002).
7. S. Yu. Davydov, *Semiconductors* **45**, 618 (2011).
8. C. Riedel, C. Coletti, T. Iwasaki, A.A. Zakharov, U. Starke, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 246804 (2009).
9. S.Yu. Davydov, A.A. Lebedev, *Techn. Phys. Lett.* **36**, 856 (2010).
10. H. Suzura, T. Ando, *Phys. Rev. B* **65**, 235412 (2002).
11. M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. Avouris, *Carbon Nanotubes. Synthesis, Structure, Properties and Applications. Topics in Appl. Phys.* **80** (Berlin: Springer-Verlag, 2001).
12. P. Ponchral, Z.L. Wang, D. Ugarte, W.A. de Heer, *Science* **283**, 1513 (1999).
13. B. Reulet, A.Yu. Kasumov, M. Kociak, R. Deblock, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2829 (2000).
14. R.J. Grow, Q. Wang, J. Cao, D. Wang, H. Dai, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 093104 (2005).
15. M.A. Ruvinskii, B.M. Ruvinskii, *Phys. Chem. Sol. St.* **9**, 309 (2008).
16. R.M. Peleshchak, I.I. Lazurchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv, G.G. Zegrya, *Semiconductors* **50**, 314 (2016).
17. R.M. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv, *Condens. Mat. Phys.* **18**, 43801 (2015).
18. Y. Huang, J. Wu, K.C. Hwang, *Phys. Rev. B* **74**, 245413 (2006).