УДК 538.915

ББК 22.314

ВОЛЬТ-АМПЕРНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ТУННЕЛЬНОГО КОНТАКТА НАНОТРУБКА — МЕТАЛЛ¹

Конобеева Наталья Николаевна

Кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры информационных систем и компьютерного моделирования
Волгоградского государственного университета
yana_nn@inbox.ru
Проспект Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Пак Анастасия Валерьевна

Кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры информационных систем и компьютерного моделирования
Волгоградского государственного университета
pak.anastasia@gmail.com
Проспект Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Аннотация. Рассмотрен процесс туннелирования электронов между углеродной нанотрубкой типа zig-zag и металлом. Получено выражение для туннельного тока методом функций Грина, которое было проанализировано численно. Построена вольт-амперная характеристика для данного туннельного контакта.

Ключевые слова: углеродная нанотрубка, туннельный контакт, функция Грина, вольт-амперная характеристика, потенциальный барьер.

Введение

Одночастичные и двухчастичные функции Грина представляют собой корреляционные функции операторов $\hat{\psi}$ и $\hat{\psi}^+$. Физические характеристики, такие как теплоемкость, проводимость и другие, в принципе всегда можно выразить через гриновские функции. Однако эта связь довольно часто оказывается весьма сложной и «односторонней», поскольку она не позволяет восстановить функции Грина по экспериментальным данным. Поэтому представляет интерес обсудить методы, позволяющие напрямую «измерять» функции Грина и получать информацию о свойствах систем взаимодействующих частиц, которую можно легко интерпретировать теоретически.

1. Туннелирование

Введем одночастичную функцию Грина как:

$$G(x, x') = -i\langle T\psi(x)\psi^+(x') \rangle. \quad (1)$$

Рассмотрим ситуацию, когда происходит перенос электронов из нанотрубки (которую мы будем называть «пробником») в металл (исследуемый образец). Если перенос заряда происходит мгновенно, то его можно описывать как уничтожение электрона в пробнике и рождение его в образце. Вероятность этого процесса оказывается связанной с функциями Грина исследуемого образца и пробника. Если свойства пробника известны и достаточно просты, то можно считать, что в таком эксперименте «измеряется» функция Грина электрона в образце.

Для того чтобы реализовать эту идею, нужно создать такую связь между пробником и образцом, чтобы переносимый электрон в каждый момент времени был или на пробнике, или на образце. Это означает, что связь пробника с образцом должна быть слабой, и поэтому обычный омический контакт не годится. Слабую связь можно получить, используя туннельный эффект. Рассмотрим так называемый туннельный контакт — нанотрубка и металл, разделенные потенциальным барьером, так что область между ними оказывается классически запрещенной. На практике в качестве потенциального барьера обычно используется тонкий слой диэлектрика, например, окисла, образующегося на поверхности металла. На рисунке 1 показано заполнение энергетических уровней по обе стороны контакта и распределение потенциала в случае, когда к контакту приложено постоянное напряжение V .

Рис. 1. Заполнение энергетических уровней контакта

Электроны могут туннелировать из нанотрубки в металл, причем прозрачность туннельного барьера, согласно формуле Вентцеля — Крамера — Бриллюэна, является экспоненциальной функцией:

$$W \approx e^{-A}, \quad A = \sqrt{2mU_0} \frac{d}{\hbar}, \quad (2)$$

где U_0 — высота потенциального барьера, а d — его толщина. Если прозрачность W

мала, то такой туннельный контакт обеспечивает слабую связь между двумя нанотрубками.

В равновесии вероятности перехода электронов справа налево и слева направо равны, и ток через контакт отсутствует. Однако если к туннельному контакту приложить разность потенциалов, выводящую систему из равновесия, через контакт потечет ток, измеряя который можно определить вероятность туннелирования и, как следствие, функцию Грина.

Поскольку вероятность прохождения через высокий барьер экспоненциально мала, то можно вначале рассмотреть задачу, пренебрегая туннельными эффектами, а затем учесть их по теории возмущений. Пусть $\psi_{a(b)}(r)$ — оператор рождения электрона соответственно на пробнике или на образце в отсутствие туннелирования. Рассматривая туннелирование как мгновенный перенос заряда, можно записать гамильтониан для туннелирования следующим образом:

$$\hat{H}_T = \int_{x < 0} \int_{x' > d} (T(r, r') \psi_a^\dagger(r') \psi_b(r) + h.c.) d^3 r' d^3 r. \quad (3)$$

Интегрирование по r в этой формуле производится по левому берегу, а интегрирование по r' — по правому.

Перейдем в представление собственных состояний, которые вдали от барьера представляют собой линейные комбинации двух плоских волн, падающей и отраженной, удовлетворяющие граничным условиям на поверхности барьера. Следует иметь в виду, что нередко отражением от барьера пренебрегают и заменяют истинные собственные состояния на плоские волны. Хотя такое приближение на первый взгляд кажется весьма грубым, но оно оказывается вполне достаточным для описания эффектов, в которых существенны только состояния с энергиями вблизи E_F . Более аккуратное рассмотрение приводит к более сложным выражениям, с которыми труднее работать. Согласие же с экспериментом, и без того обычно неплохое, при этом практически не улучшается.

Зависимость амплитуды туннелирования $T_{p,p'}$ от импульсов p, p' в общем случае может оказаться довольно сложной. Мы рассмотрим модель, соответствующую «шероховатому» барьеру. Поскольку вероятность туннелирования (2) экспоненциально зависит от толщины барьера, основной вклад в туннельный ток вносится тем местом, где барьер наиболее тонок и где поэтому вероятность туннелирования наибольшая. Обычно можно считать, что туннелирование происходит в какой-то определенной точке барьера. Амплитуда туннелирования $T_{p,p'}$ в этом случае есть константа, не зависящая от p, p' : $T_{p,p'} = T_0$ [4].

Теперь найдем оператор туннельного тока. Записывая скорость изменения заряда пробника, используя уравнения эволюции в представлении Гейзенберга, и определяя оператор тока $\hat{I}$ как скорость изменения заряда получаем:

$$\hat{I} = \hat{Q}_a = ie \sum_{p,p'} T_{p,p'} \hat{a}_p^\dagger \hat{b}_{p'} + h.c. \quad (4)$$

Чтобы найти средний по времени туннельный ток, нужно вычислить среднее от оператора (4) по состоянию, в котором химические потенциалы берегов различаются на $e \cdot V$, где V — приложенное к контакту напряжение. Это состояние — неравновесное, поэтому усреднение по нему нельзя выполнять с помощью обычной равновесной диаграммной техники. Можно, однако, воспользоваться полезным стандартным приемом, позволяющим перейти к эквивалентной задаче, в которой усреднение выполняется по равновесному состоянию. Для этого рассмотрим калибровочное преобразование:

$$\hat{a}_p \rightarrow \hat{a}_p e^{ieVt}, \hat{b}_{p'} \rightarrow \hat{b}_{p'} \quad (5)$$

Получаем зависящее от времени возмущение, действующее на равновесное состояние. Это означает, что с формальной точки зрения задача о вычислении туннельного тока сводится к вычислению отклика зависящего от времени оператора туннельного тока на «внешнее поле», пропорциональное туннельному оператору, причем разность потенциалов eV играет роль частоты «внешнего поля». Вычисление функции отклика приводит к такому выражению для туннельного тока [3]:

$$I(V) = 4e \sum_{p,p'} |T_{p,p'}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\pi} \text{Im} G_a^R(p, \varepsilon + eV) \text{Im} G_b^R(p', \varepsilon) [n_F(\varepsilon) - n_F(\varepsilon + eV)] d\varepsilon, \quad (6)$$

где $n_F(\varepsilon)$ — фермиевская функция распределения, а $G_{a(b)}^R(p, \varepsilon)$ — Фурье-образ запаздывающей функции Грина.

В модели шероховатого барьера, с учетом формулы Сохоцкого — Племяля, а также закона дисперсии для УНТ типа $(m, 0)$ и металла [2], получим следующее выражение для туннельного тока:

$$I(V) = \frac{8\pi e \alpha |T_0|^2}{a\gamma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_s \varepsilon \sqrt{\varepsilon + eV} \frac{\left(\frac{1}{e\varepsilon/kT + 1} - \frac{1}{e(\varepsilon + eV)/kT + 1} \right)}{\sqrt{8b_s^2 \left(\frac{\varepsilon^2}{\gamma^2} - 1 \right) - \left(\frac{\varepsilon^2}{\gamma^2} - 1 \right)^2}} d\varepsilon. \quad (7)$$

Здесь $b_s = \cos \frac{\pi s}{m}$, $\alpha = \sqrt{\frac{2m_0^3}{\pi^4}}$, $s = 1 \dots m$

2. Численное исследование уравнения

В результате численного решения [1] уравнения (7) построена вольт-амперная характеристика нанотрубка — металл, которая представлена на рисунке 2.

Полученные зависимости показывают, что при увеличении диаметра углеродной нанотрубки наблюдается увеличение туннельного тока контакта с металлом, характер зависимости при этом остается прежним. А именно, наблюдается омический участок на вольт-амперной характеристике. Следовательно, варьируя величину диаметра трубки, можно управлять туннельным током контакта.

Рис. 2. Вольт-амперная характеристика, определяемая уравнением (7): а) для нанотрубки (6, 0); б) для нанотрубки (7, 0); с) для нанотрубки (12, 0); d) для нанотрубки (14, 0)

ПРИМЕЧАНИЯ

¹ Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 12-02-31654).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бахвалов, Н. С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения) / Н. С. Бахвалов. — М. : Наука, 1975. — 632 с.
2. Белоненко, М. Б. Двумерные нелинейные электромагнитные волны в массиве углеродных нанотрубок / М. Б. Белоненко, С. Ю. Глазов, Н. Г. Лебедев // Физика твердого тела. — 2009. — Т. 51, № 8. — С. 1657–1662.
3. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика. Т. II. Теория поля / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М. : Наука, 1988. — 512 с.
4. Левитов, Л. С. Задачи по теоретической физике с решениями и методическими указаниями. Функции Грина. Диаграммная техника / Л. С. Левитов, А. В. Шитов. — М. : НН, 2000. — 360 с.

REFERENCES

1. Bakhvalov N.S. *Chislennyye metody (analiz, algebra, obyknovennyye differentsial'nyye uravneniya)* [Numerical methods (analysis, algebra, ordinary differential equations)]. Moscow, Nauka Publ., 1975. 632 p.
2. Belonenko M.B., Glazov S.Yu., Lebedev N.G. Dvumernyye nelineynyye elektromagnitnyye volny v massive uglerodnykh nanotrubok [Dimensional nonlinear electromagnetic waves in an array of carbon nanotubes]. *Fizika tverdogo tela* [Physics of Solids], 2009, vol. 51, no. 8, pp. 1657–1662.
3. Landau L.D., Lifshits E.M. *Teoreticheskaya fizika. T. II. Teoriya polya* [Theoretical physics. Vol. II. Field Theory]. Moscow, Nauka Publ., 1988. 512 p.
4. Levitov L.S., Shitov A.V. *Zadachi po teoreticheskoy fizike s resheniyami i metodicheskimi ukazaniyami. Funktsii Grina. Diagrammnaya tekhnika* [Problems in theoretical physics with decisions and guidelines. Green's functions. Diagram technique]. Moscow, NN Publ., 2000. 360 p.

CURRENT-VOLTAGE CHARACTERISTIC OF TUNNELING CONTACT CARBON NANOTUBE — METALL

Konobeeva Natal'ya Nikolaevna

Candidate of Physical and Mathematical Sciences,
Associate Professor, Department of Information Systems and Computer Simulations
Volgograd State University
yana_nn@inbox.ru
Prospekt Universitetskij, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Pak Anastasiya Valer'evna

Candidate of Physical and Mathematical Sciences,
Associate Professor, Department of Information Systems and Computer Simulations
Volgograd State University
pak.anastasia@gmail.com
Prospekt Universitetskij, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Abstract. Physical characteristics, such as heat, conductivity and others, in principle, one can always express by the Green's function. However, the relationship is often very complex and "one-sided" because it does not allow to recover the Green's function from experimental data. It is therefore of interest to discuss methods to directly "measure" of the Green function and obtain information about the properties of interacting particles system, which can be easily interpreted theoretically. In this paper we investigate the transfer of electrons from the carbon nanotube (CNT) (which we shall call the "probe") to metal (the sample). If the charge transfer is instantaneous, it can be described as the destruction of the electron in the probe and the birth of his in the sample. The probability of this process is related to the Green functions of the sample and the probe. If the properties of the probe are known and fairly simple, it can be assumed that in such an experiment to "measure" the Green's function of an electron in a sample. As a result, the expression for the tunneling current was obtained. And the current-voltage characteristic of the tunneling contact zig-zag carbon nanotube-metall was plotted. This dependence shows when the diameter of the carbon nanotubes increases, the tunneling current increases. However, the dependence for different type of CNT remains the same. Also ohmic portion of the current-voltage characteristic was observed. Therefore, by varying the tube diameter we can control value of the tunneling current contact.

Key words: carbon nanotubes, tunnel contact, Green's function, current-voltage characteristic, potential barrier.