

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ КОНДАКТАНС СКРЕЩЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

В. А. Маргулис, М. А. Пятаев*

*Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарева
430000, Саранск, Россия*

Теоретически исследуется низкотемпературный кондактанс скрещенных углеродных нанотрубок, имеющих точечный контакт. Путем точного решения уравнения Шредингера получены явные формулы для кондактанса устройства. Показано, что в кондактансе каждой из трубок появляются провалы, связанные с резонансным рассеянием электронов в точке контактов, а также с прохождением электронов во вторую трубку. Электронный транспорт между первой и второй трубками носит резонансный характер.

PACS: 73.63.Rt

Благодаря своим уникальным физическим свойствам углеродные нанотрубки считаются одним из перспективных материалов для электроники будущего. Очевидно, что создание интегральных схем на базе углеродных нанотрубок подразумевает использование большого числа контактов между ними. Недавние успехи в технологии сделали возможным экспериментальное исследование электронного транспорта через такие контакты [1, 2]. Для изучения физических свойств соединения нанотрубок друг с другом было предложено несколько теоретических моделей [3–5]. В частности, в работе [5] в модели сильной связи рассматривался электронный транспорт в системе, в которой две одностенные нанотрубки образуют единую крестообразную наноструктуру.

Однако необходимо отметить, что подход, основанный на методе сильной связи, предполагает использование громоздких компьютерных вычислений, что не всегда позволяет выяснить физическую сущность изучаемого явления. Кроме того, такой подход эффективен только для нанотрубок сравнительно малого радиуса, в то же время в работе [1] экспериментально исследовались нанотрубки диаметрами 25–30 нм. Поэтому существует необходимость в изучении контакта углеродных нанотрубок с помощью достаточно простой модели, допускающей явное аналитическое решение.

Целью настоящей работы является исследование кондактанса двух скрещенных полупроводниковых углеродных нанотрубок, имеющих точечный контакт. Схематическое изображение исследуемого устройства показано на вставке на рис. 1. Каждая нанотрубка моделируется проводящим цилиндром радиуса r_j ($j = 1, 2$). Гамильтониан H электрона в системе представляет собой прямую сумму гамильтонианов частей

$$H = H_1 \oplus H_2,$$

возмущенную потенциалами нулевого радиуса в точке контакта. Для каждой нанотрубки удобно ввести свою цилиндрическую систему координат. Тогда гамильтониан электрона в j -й нанотрубке может быть записан в виде

$$H_j = \frac{L_z^2}{2m^*r_j^2} + \frac{p_z^2}{2m^*}, \quad (1)$$

где m^* — эффективная электронная масса, p_z и L_z — операторы проекции импульса и момента импульса на ось нанотрубки. Спектр гамильтониана H_j состоит из энергии свободного движения вдоль оси z и дискретной составляющей

$$E_m^{(j)} = \varepsilon_j m^2,$$

где

$$\varepsilon_j = \frac{\hbar^2}{2m^*r_j^2}.$$

В работе исследовано влияние контакта на продольный кондактанс G_{11} одной из трубок, а так-

*E-mail: theorphysics@mrsu.ru

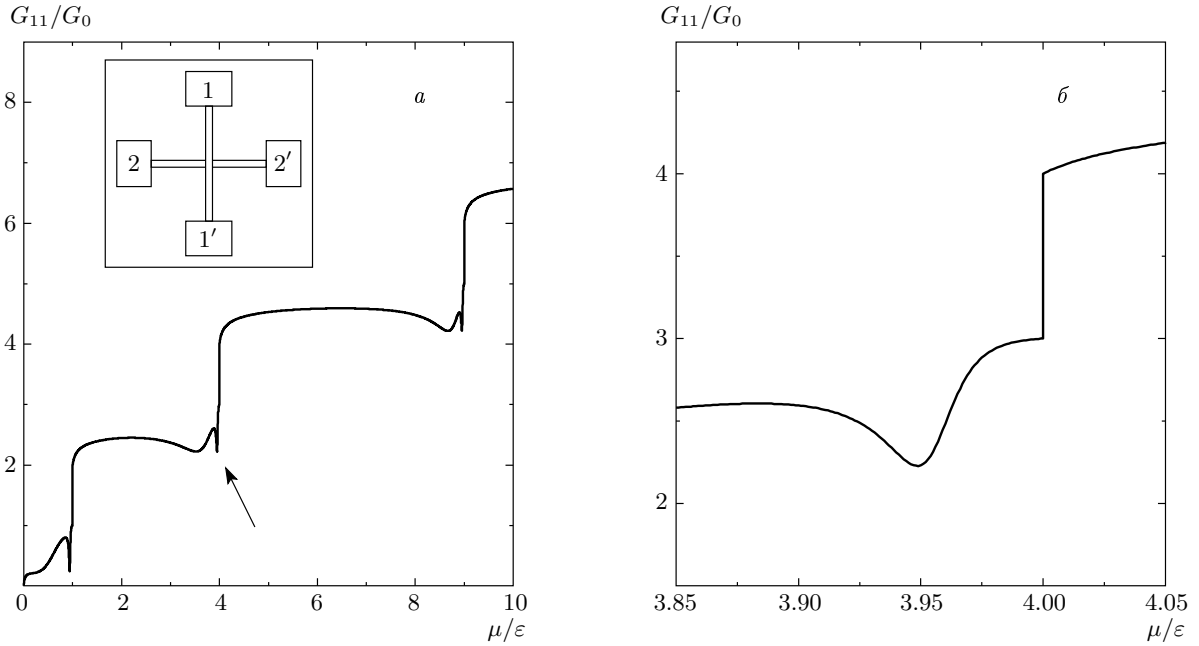


Рис. 1. *a* — Зависимость кондактанса G_{11} от химического потенциала μ при $r_1 = r_2$, $\lambda_1 = \lambda_2 = 5r_1$, $a = 10$. *б* — Фрагмент той же зависимости в окрестности провала, отмеченного стрелкой. На вставке показана схема наноструктуры

же изучен кондактанс G_{21} , характеризующий транспорт электронов из первой трубки во вторую в том случае, когда контакты 1 и 1' имеют одинаковый потенциал V_1 , а контакты 2 и 2' — потенциал V_2 . Согласно формуле Ландауэра–Бьюттикера кондактанс G_{ji} при нулевой температуре выражается через коэффициенты прохождения электрона из состояния с магнитным числом m' в i -й трубке в состояние с m в j -й трубке:

$$G_{ji} = G_0 \sum_{m,m'} T_{mm'}^{ji}, \quad (2)$$

где G_0 — квант кондактанса, а сумма берется по всем состояниям, энергия которых не превышает энергию Ферми.

Контакт между трубками в работе моделируется с помощью линейных граничных условий, накладываемых на волновую функцию. Для получения явного вида граничных условий в работе используется подход, основанный на теории потенциалов нулевого радиуса, использовавшийся ранее в работах [6, 7]. Как следует из теории потенциалов нулевого радиуса, при наличии точечного возмущения в точке q волновая функция электрона $\psi_j(x)$ имеет логарифмическую сингулярность в окрестности этой точки [6]:

$$\psi_j(x) \approx -u_j \ln(\rho(x, q)) + v_j \quad \text{при } x \rightarrow q, \quad (3)$$

где $\rho(x, q)$ — расстояние между точками x и q по поверхности цилиндра, а комплексные коэффициенты u_j и v_j как раз и играют роль граничных параметров для волновой функции в точке контакта q . С учетом того, что гамильтониан всей системы должен быть самосопряженным оператором, в работе граничные условия выбраны в виде

$$\begin{aligned} v_1 - b_1 u_1 &= a u_2, \\ v_2 - b_2 u_2 &= a u_1. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь параметр a отвечает за связь между нанотрубками, а параметры b_1 и b_2 описывают мощность точечного потенциала в точке контакта и могут быть выражены через соответствующие длины рассеяния по формуле

$$b_j = 2 \ln \lambda_j.$$

Решая уравнение Шредингера с граничными условиями (4), найдем явные формулы для коэффициентов прохождения $T_{mm'}^{ji}$. Затем, вычисляя суммы в формуле (2), получим следующее выражение для кондактанса G_{11} :

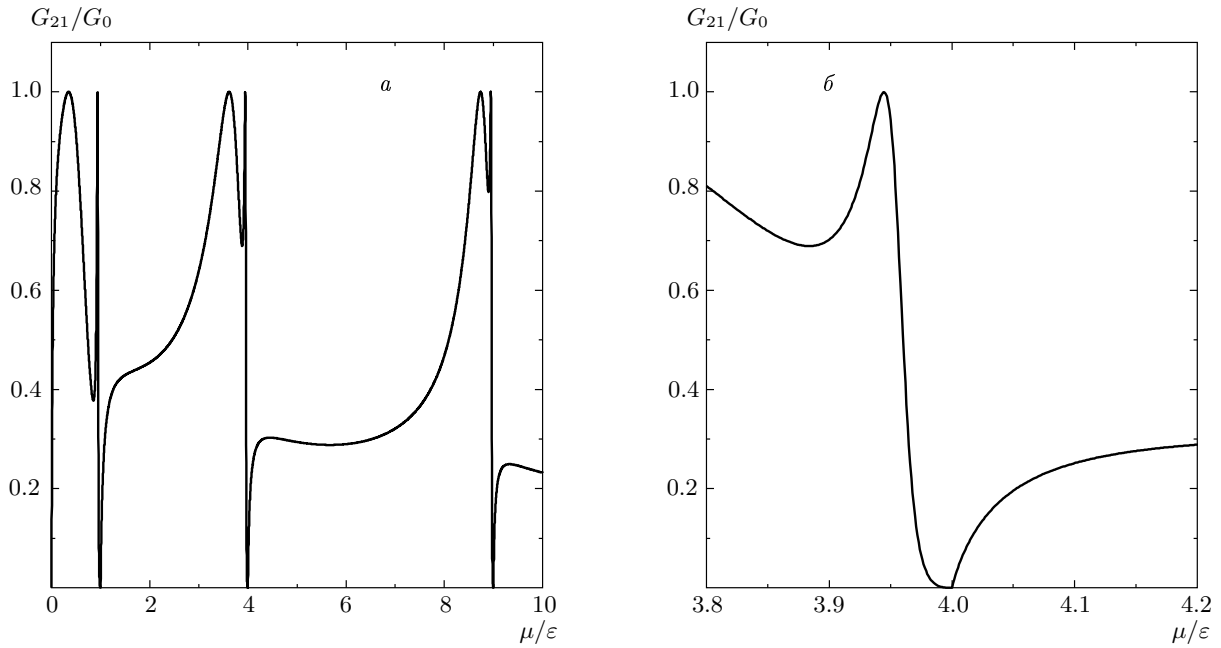


Рис. 2. *a* — Зависимость кондактанса G_{21} от химического потенциала μ при тех же параметрах, что и на рис. 1. *б* — Фрагмент той же зависимости в окрестности $\mu = 4\epsilon$

$$G_{11}(\mu) = G_0 \left(N(\mu) - \frac{(\text{Im } Q_1)^2 |Q_2|^2}{|Q_1 Q_2 - |a|^2|^2} - 2 \frac{|a|^2 \text{Im } Q_1 \text{Im } Q_2}{|Q_1 Q_2 - |a|^2|^2} \right), \quad (5)$$

где $N(\mu)$ — число состояний электрона с энергией ниже μ , а $Q_j(\mu)$ — перенормированная функция Грина гамильтониана H_j , имеющая вид [4]

$$Q_j(\mu) = \frac{i}{r_j k_0^{(j)}} + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{i}{r_j k_m^{(j)}} - \frac{1}{m} \right) + 2 \ln \left(\frac{r_j}{\lambda_j} \right). \quad (6)$$

Здесь

$$k_m^{(j)} = \frac{\sqrt{2m^*(\mu - E_m^{(j)})}}{\hbar}.$$

При отсутствии контакта между трубками в формуле (5) имеется только первое слагаемое и зависимость кондактанса G_{11} от химического потенциала μ имеет ступенчатый характер. Второе слагаемое в формуле (5) описывает уменьшение кондактанса за счет отражения электронов от контакта, а третье слагаемое связано с переходом электронов во вторую трубку.

При $\lambda_j \gg r_j$ на графике зависимости $G_{11}(\mu)$ имеются провалы вблизи порогов ступеней, связанные

с резонансным рассеянием на виртуальном уровне (рис. 1*a*). В этом случае точечный потенциал создает виртуальный энергетический уровень ниже границы подзоны с номером m . Взаимодействие этого уровня с состояниями непрерывного спектра в лежащей ниже подзоне увеличивает вероятность рассеяния электрона и приводит к появлению резонансов в амплитудах отражения. Глубина провалов при $a = 0$ равна G_0 . При ненулевых a глубина провалов уменьшается, а при достаточно больших значениях a ($a \gg 1$) в области плато имеется дополнительный провал, связанный с резонансным прохождением электронов во вторую трубку (рис. 1*a*).

Отметим, что при $\mu \rightarrow E_m$ слева второе слагаемое в формуле (5) стремится к нулю, а при $\mu \rightarrow E_m$ справа — к минус единице, поэтому амплитуда скачка G_{11} в точках $\mu = E_m$ равна одному кванту кондактанса (рис. 1*б*), в то время как для невозмущенной трубки амплитуда скачка равна $2G_0$.

Если радиусы трубок различны, то на графике $G_{11}(\mu)$ имеются дополнительные всплески типа пик–провал в области плато кондактанса, связанные с резонансным прохождением электронов во вторую трубку. Следует отметить, что асимметричные резонансы типа пик–провал наблюдались экспериментально в кондактансе скрещенных углеродных нанотрубок [1].

Рассмотрим теперь кондактанс $G_{21}(\mu)$, соответствующий переходу электронов из первой трубки во вторую. Аналогично формуле (5), найдем

$$G_{21}(\mu) = 4G_0 \frac{|a|^2 \operatorname{Im} Q_1 \operatorname{Im} Q_2}{|Q_1 Q_2 - |a|^2|^2}. \quad (7)$$

Здесь множитель 4 связан с наличием четырех путей, по которым электрон из резервуаров, отмеченных цифрой 1 на рис. 1, может попасть в резервуары, отмеченные цифрой 2. Как следует из формулы (7), зависимость $G_{21}(\mu)$ имеет не ступенчатый, а резонансный характер (рис. 2а). При $\mu = E_m^{(2)}$ кондактанс $G_{21}(\mu)$ обращается в нуль. В окрестности нуля имеется асимметричный пик, сходный по форме с кривой резонанса Фано. Однако, в отличие от гладкой кривой, описывающей резонанс Фано, зависимость $G_{21}(\mu)$ при нулевой температуре имеет излом в точках $\mu = E_m^{(2)}$ (рис. 2б).

В заключение отметим, что, как следует из формулы (7), в случае одинаковых трубок величина кондактанса $G_{21}(\mu)$ не превышает G_0 , что связано с ограниченной пропускной способностью точечного контакта. Экспериментально измеренное в работе [1] сопротивление контакта между скрещенными нанотрубками при температуре 4.2 К состав-

ляло 16.8 кОм, т.е. было близко по величине к $1/G_0 = 12.9$ кОм.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 05-02-16145).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Kim, J.-R. Kim, Jeong-O. Lee, J. W. Park, H. M. So, N. Kim, K. Kang, K.-H. Yoo, and J.-J. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 166403 (2003).
2. B. Gao, A. Komnik, R. Egger, D. C. Glatli, and A. Bachtold, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 216804 (2004).
3. F. Y. Meng, S. Q. Shi, D. S. Xu, and R. Yang, *Phys. Rev. B* **70**, 125418 (2004).
4. G. Kim, S. B. Lee, T.-S. Kim, and J. Ihm, *Phys. Rev. B* **71**, 205415 (2005).
5. H. T. Yang, J. W. Chen, L. F. Yang, and J. Dong, *Phys. Rev. B* **71**, 073401 (2005).
6. В. А. Гейлер, В. А. Маргулис, М. А. Пятаев, *ЖЭТФ* **124**, 851 (2003).
7. V. A. Margulis and M. A. Pyataev, *Phys. Rev. B* **72**, 075312 (2005).