

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ТИПА «ARMCHAIR»

Д. В. Поздняков, В. М. Борздов

Белорусский государственный университет, pozdneyakov@bsu.by

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время углеродные нанотрубки рассматриваются большинством известных специалистов в области нанотехнологий в качестве перспективных базовых элементов наноэлектроники. Основной причиной для этого являются их уникальные электрофизические свойства. Однако вплоть до недавнего времени некоторые из этих свойств, выявленных в процессе накопления экспериментальных данных, не укладывались в рамки существовавших теоретических представлений о происходящих в нанотрубках физических явлениях. Только в работах [1, 2] путем более строгого квантово-механического описания состояний электронного и фононных газов удалось объяснить наблюдаемые электрофизические свойства углеродных нанотрубок.

В работах [1, 2] изучались одностенные углеродные нанотрубки типа «armchair». В [1] все электрофизические параметры нанотрубок определялись в процессе численного решения кинетического уравнения Больцмана для электронного газа. При этом разогрев LA- и LO-фононного газов описывался приближенно с помощью модифицированного уравнения баланса энергии. Более строгое рассмотрение этого процесса обуславливает необходимость решения не только кинетического уравнения Больцмана для электронов, но и соответствующих кинетических уравнений для LA- и LO-фононов.

В итоге целью настоящей работы стал расчет ряда электрофизических параметров одностенных углеродных нанотрубок типа «armchair» путем численного решения системы кинетических уравнений Больцмана для электронного, LA- и LO-фононного газов.

2. ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Как и в работах [1–3] ограничимся рассмотрением бесконечно длинных углеродных нанотрубок. В таком случае существенно упрощаются вычислительные процедуры, используемые при численном решении дифференциальных уравнений в частных производных. Сама же система кинетических уравнений Больцмана для электронного, LA- и LO-фононного газов при указанном приближении выглядит так:

$$\frac{eF}{\hbar} \frac{\partial f_{1,2}}{\partial k} + \hat{I}^1 f_{1,2} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{n_{1,2,10} - n_{1,2,10}^0}{\tau_{1,2,10}} + \hat{I}^q_{1,2,10} (f_1 + f_2) = 0, \quad (2)$$

где $\hbar$ – постоянная Планка; e – заряд электрона; F – напряженность тянущего продольного электрического поля в нанотрубке; k ($k \in [-\pi/a, \pi/a]$), a – постоянная кристаллической решетки графена и q ($0 < q \leq \pi/a$ для нормальных процессов рассея-

ния $\pi/a < |q| < 2\pi/a$ для процессов рассеяния с перебросом [2]) – волновые вектора электронов и фононов, соответственно; $\hat{I}^e$ и $\hat{I}^v$ – операторы рассеяния электронов на фононах и фононов на электронах, соответственно; $f_{1,2} = f_{1,2}(k)$ – функция распределения электронов в первой и второй зоне, соответственно; $n_{LA, LO} = n_{LA, LO}(q)$ – функция распределения LA- и LO-фононов, соответственно; n^0 – равновесная функция распределения фононов, характеризуемая температурой окружающей среды, например температурой диэлектрической подложки или матрицы; $\tau_{LA, LO} = \tau(q_{LA, LO})$ – среднее время жизни (время релаксации) неравновесных LA- и LO-фононов, соответственно. Далее, как и во многих других работах, для упрощения расчетов предположим, что выполняется следующее условие: $\tau_{LA} = \tau_{LO} = \tau = const$.

Решение системы кинетических уравнений Больцмана подразумевает задание дисперсионных соотношений для электронов, LA- и LO-фононов. Явный вид этих соотношений может быть взят из [1].

После того как найдено решение системы уравнений (1) и (2), можно рассчитать значения всех интересующих нас кинетических параметров. Они вычисляются путем интегрирования функции распределения электронов:

$$\bar{L} = \left(\int_{-\pi/a}^{\pi/a} (f_1 + f_2) dk \right)^{-1} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \hat{L} (f_1 + f_2) dk, \quad (3)$$

где $\bar{L}$ – искомое значение интересующего нас кинетического параметра L , $\hat{L}$ – статистический оператор, соответствующий параметру L .

Соотношение (3) позволяет рассчитывать значения любых кинетических параметров, определяющих электрофизические свойства углеродных нанотрубок. Так, например, электрический ток в углеродных нанотрубках задается равенством [1]:

$$I = \frac{e a J_0}{\pi \hbar} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} (f_2(k) - f_1(k)) \sin(ak/2) dk, \quad (4)$$

где $J_0 = 2.7$ эВ – величина интеграла перекрытия.

Рассмотрим далее функциональную зависимость $I := I(F)$ для различных значений параметра τ .

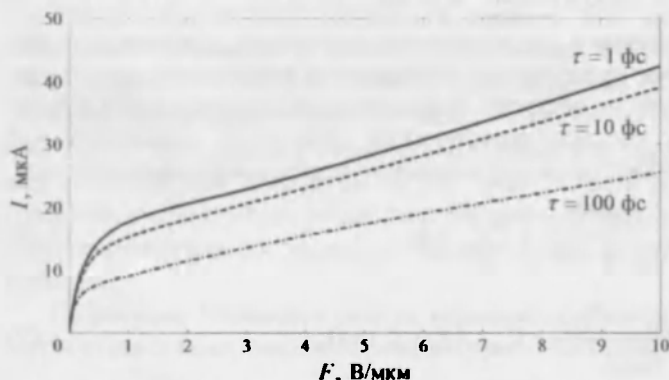


Рис. 1. Зависимость электрического тока I в одностенных углеродных нанотрубках типа «armchair» от напряженности приложенного к ним тянущего продольного электрического поля F

На рисунке 1 в качестве примера приведены полученные нами результаты в предположении, что температура окружающей среды (подложки или матрицы) равна 300 К. Представленные на этом рисунке зависимости были рассчитаны с помощью равенства (4) после численного самосогласованного решения системы кинетических уравнений Больцмана, задаваемой формулами (1) и (2).

Рисунок 1 дает представление о влиянии параметра τ на ход зависимости $I(F)$. Из рисунка видно, что увеличение τ обуславливает смещение кривой вниз по оси ординат практически без изменения ее наклона. Причем величина τ не влияет на начальный участок зависимости $I(F)$. Данный факт объясняется тем, что этот начальный участок определяется лишь процессами рассеяния электронов на ТА-фононах (процессами релаксации групповой скорости носителей заряда), в то время как остальная часть зависимости $I(F)$ определяется, в основном, процессами рассеяния заряженных частиц на LA- и LO-фононах (процессами релаксации как групповой скорости, так и энергии электронов).

Сравнение доступных из литературы экспериментальных данных с полученными нами результатами указывает на то, что величина параметра τ лежит в диапазоне от 2 до 100 фс для всех видов использованных в экспериментах диэлектрических матриц и подложек. Результаты основной массы проведенных опытов соответствуют величине времени релаксации $\tau \sim 10$ фс. То есть вторая сверху кривая на рис. 1 отражает ход наиболее типичной вольт-амперной характеристики одностенных углеродных нанотрубок типа «armchair» (см., например, [4]).

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, проведенные нами теоретические исследования позволили сделать вывод о том, что процессы релаксации LA- и LO-фононов в одностенных углеродных нанотрубках типа «armchair» являются очень значимыми. При этом варьирование такого параметра, как время релаксации LA- и LO-фононов в углеродных нанотрубках, приводит к значительной вариации протекающего по ним электрического тока. В частности, увеличение этого параметра от 1 до 100 фс обуславливает почти двукратное уменьшение тока.

ЛИТЕРАТУРА

1. Pozdnyakov, D.V., Galenchik, V.O. et al. // Physica E. 2006. Vol. 33. P. 336.
2. Pozdnyakov, D.V., Galenchik, V.O. et al. // Proc. SPIE. 2006. Vol. 6328. P. 0Y-1.
3. Pozdnyakov, D.V., Galenchik, V.O. et al. // Physics, Chemistry and Application of Nanostructures. Reviews and Short Notes to Nanomeeting-2007. 2007. P. 245.
4. Kuroda, M.A., Cangellaris, A., Leburton, J.-P. // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 95. P. 266803.

ВЛИЯНИЕ ПОПЕРЕЧНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ДРЕЙФОВУЮ СКОРОСТЬ ЭЛЕКТРОНОВ В ТОНКОЙ GaAs КВАНТОВОЙ ПРОВОЛОКЕ

А. В. Борздов, Д. В. Поздняков, Д. С. Сперанский, В. М. Борздов

Белорусский государственный университет, borzdov@bsu.by

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время достаточно много внимания уделяется исследованию влияния поперечного электрического поля на электрофизические свойства полупроводниковых структур с квазидвумерным и квазиодномерным электронным газом [1–4]. Такой интерес обусловлен использованием данных структур при создании новых наноразмерных элементов интегральных схем.