ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ, 2011, том 75, № 12, с. 1680–1682

УДК 538.915

ИЗОГНУТЫЕ ГРАФЕНОВЫЕ НАНОЛЕНТЫ И ТУННЕЛЬНЫЙ ТОК

© 2011 г. М. Б. Белоненко[2, 3], Н. Н. Янюшкина[1], Н. Г. Лебедев[1], А. В. Жуков[3, 4]
E-mail: mbelonenko@yandex.ru

На основании уравнения Дирака в криволинейном пространстве времени, примененном для описания длинноволновых электронов в изогнутой графеновой наноленте, вычислена плотность состояний и электронный спектр. На основе полученной плотности состояний была рассчитана вольт-амперная характеристика туннельных контактов наноленты с металлом и с квантовыми точками. Обнаружена зависимость от геометрических характеристик изогнутой наноленты.

ВВЕДЕНИЕ

Начиная с открытия графена и его уникальных характеристик [1], которые позволяют рассматривать его как базу для электроники будущего, интерес исследователей в последнее время все больше и больше смещается в сторону изучения свойств графена, который модифицирован тем или иным образом (примеси, дефекты, графеновые наноленты и др.) [2]. Последнее обстоятельство связано с тем, что чистый графен не имеет энергетической щели в зонной структуре и, следовательно, создание на его основе различных структур (например, аналогов транзисторов) затруднено. Особенный интерес возникает при этом к графеновым нанолентам, которые вследствие ограниченности в пространстве в одной измерении имеют квантованный в данном направлении энергетический спектр электронов, что также может приводить к образованию энергетической щели. Кроме того, известно, что плоская структура графеновых листов неустойчива и графен имеет волнообразную искривленную поверхность. Все эти обстоятельства стимулировали в последнее время и изучение различных искривленных модификаций графена [3]. По-видимому, наиболее простой способ экспериментальной проверки изменения плотности состояний – изучение туннельного тока [4], например для контакта с металлом или квантовыми точками.

1. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ И СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ

Рассмотрим два вида графеновых нанолент, изогнутых вдоль либо поверхности геликоида, либо тора.

Свойства электронов в графеновой наноленте в длинноволновом приближении в окрестности дираковской точки (например, для определенности K) будем описывать на основании обобщения уравнения Дирака для искривленного пространства времени [5]:

$$\gamma^{\mu}(\partial_{\mu} - \Omega_{\mu})\Psi = 0, \tag{1}$$

здесь и далее по повторяющимся индексам, если не оговорено обратное, подразумевается суммирование. ∂_{μ} – частная производная по координате μ, Ω_{μ} – компонента спиновой связности, $\Psi = (\phi/\varphi)$ – волновая функция (вектор-столбец) состоящая из волновых функций, описывающих электроны различных подрешеток графена в окрестности дираковской точки K.

Как известно из литературы [5, 6], если задан метрический тензор, можно определить поля реперы (диады):

$$\begin{gathered} g_{\alpha\beta} = e^a_{\alpha} e^b_{\beta} \eta_{ab}, \\ g^{\alpha\beta} = e^{\alpha}_a e^{\beta}_b \eta^{ab}, \\ \eta_{ab}\eta^{bc} = \delta^c_a, \end{gathered} \tag{2}$$

где для двумерной изогнутой поверхности $\eta_{ab} = \mathrm{diag}(1, -1, -1)$ Тогда

$$\begin{gathered} \Omega_{\mu} = \frac{1}{4}\gamma_a\gamma_b e^a_{\lambda} g^{\lambda\sigma}(\partial_{\mu} e^b_{\sigma} - \Gamma^{\lambda}_{\mu\sigma} e^b_{\lambda}), \\ \Gamma^{\lambda}_{\mu\sigma} = \frac{1}{2} g^{\lambda\nu}(g_{\sigma\nu,\mu} + g_{\nu\mu,\sigma} - g_{\mu\sigma,\nu}); \quad \gamma^{\mu} = e^{\mu}_a \gamma_a. \end{gathered} \tag{3}$$

Метрика на поверхности тора и геликоида есть

$$\begin{gathered} ds^2 = dx_0^2 - r^2 dx_1^2 - (R + r\cos x_1)^2 dx_2^2 \\ \text{и} \quad ds^2 = dx_0^2 - dx_1^2 - (h^2 + x_1^2) dx_2^2. \end{gathered} \tag{4}$$

Равны нулю все символы Кристоффеля, кроме Γ^2_{12} и Γ^1_{22},

при этом для тора $\Omega_0 = 0$; $\Omega_1 = 0$; $\Omega_2 = \frac{1}{2}\gamma_1\gamma_2 f'/r$ $(f = R + r\cos x_1; f' = \partial f/\partial x_1)$,

---

[1] Волгоградский государственный университет.
[2] Волгоградский институт бизнеса.
[3] Entropique Inc., London, Canada.
[4] Wilfrid Laurier University, Waterloo, Canada.

для геликоида: $\Omega_0 = 0; \Omega_1 = 0; \quad \Omega_2 = \frac{1}{2}\gamma_1\gamma_2 \times \frac{x_1}{(h^2 + x_1^2)^{1/2}}$.

Выбирая $\gamma_0 = \sigma_3$; $\gamma_1 = -i\sigma_2$; $\gamma_2 = -i\sigma_1$, где σ соответствующие матрицы Паули, получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} V_F^{-1}\partial_t\varphi = -\frac{1}{r^2}\partial_{x_1}\Psi - \frac{i}{f^2}\partial_{x_2}\Psi + \frac{f'}{2f^2r}\Psi, \\ V_F^{-1}\partial_t\varphi = -\frac{1}{r^2}\partial_{x_1}\varphi + \frac{i}{f^2}\partial_{x_2}\varphi + \frac{f'}{2f^2r}\varphi, \end{cases} \tag{5a}$$

$$\begin{cases} V_F^{-1}\partial_t\varphi + \partial_{x_1}\Psi + \frac{i}{h^2 + x_1^2}\partial_{x_2}\Psi - \frac{x_1}{2(h^2 + x_1^2)^{3/2}}\Psi = 0, \\ -V_F^{-1}\partial_t\Psi - \partial_{x_1}\varphi + \frac{i}{h^2 + x_1^2}\partial_{x_2}\varphi - \frac{x_1}{2(h^2 + x_1^2)^{3/2}}\varphi = 0, \end{cases} \tag{5b}$$

(здесь явно введена скорость Ферми для плоского графена $\partial_0 = V_F^{-1}\partial_t$), Отметим, что, поскольку метрика (4) допускает два вектора киллинга, соответствующих трансляциям вдоль x_0, x_1, решение (5) можно искать в виде

$$\begin{pmatrix} \varphi \\ \Psi \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \varphi(x_1) \\ \Psi(x_1) \end{pmatrix} e^{iEt - ikx_2},$$

что при переходе к уравнению на одну функцию дает окончательно:

$$\Psi'' = \left(-\frac{E^2r^4}{V_f^2} + \frac{k_n^2r^4}{f^4}\right)\Psi + \frac{rf'}{2f^2}\Psi' + \left(\frac{2k_nr^2f'}{f^3} + \frac{rf''}{2f^2} - \frac{rf'^2}{f^3} - \frac{r^2f'^2}{4f^4}\right)\Psi, \tag{6a}$$

$$\Psi'' = \left(-\frac{\varepsilon^2}{V_f^2} + \frac{k^2}{(h^2 + x_1^2)^2}\right)\Psi + \left(-\frac{kx_1}{(h^2 + x_1^2)^{5/2}} + \frac{x_1^2}{4(h^2 + x_1^2)^3}\right)\Psi. \tag{6b}$$

Волновой вектор k находится из граничных условий на концах наноленты.

В данном случае была выбрана нанолента типа arm-chair [3] и

$$k_n = \frac{2\pi}{3a_0}\left(\frac{2M + 1 + n}{2M + 1}\right). \tag{7}$$

где a_0 — расстояние между атомами в углеродной решетке, M — число атомов вдоль оси наноленты, n — квантовое число. Уравнения (6) можно рассматривать как уравнение Шрёдингера с возмущением:

$$\hat{V}_{Torus} = \left[\left(\frac{2k_nr^2f'}{f^3} + \frac{rf''}{2f^2} - \frac{rf'^2}{f^3} - \frac{r^2f'^2}{4f^4}\right) + \frac{rf'}{2f^2}\partial_x\right],$$

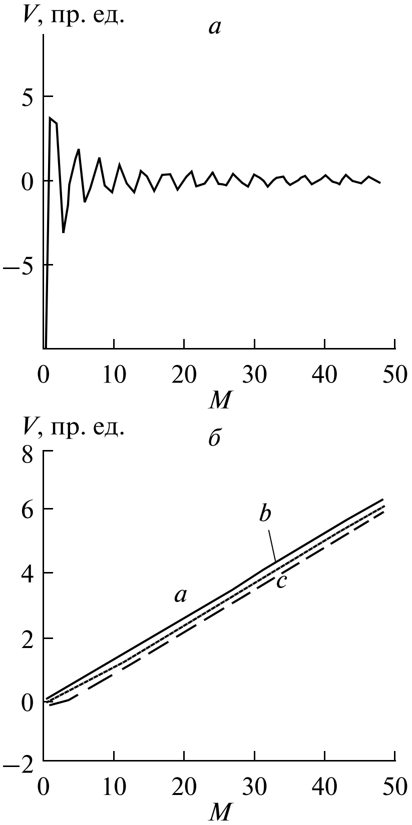

Рис. 1. Зависимость поправки к энергии V, вносимой возмущением $\hat{V}$ от числа атомов вдоль оси наноленты M: *а* — для тора ($r/R = 0.1$, $n = 1$), *б* — для геликоида ($h = 2$): *a*) $n = 1$, *b*) $n = 2$, *c*) $n = 3$.

$$\hat{V}_{Helicoid} = \left(-\frac{kx_1}{(h^2 + x_1^2)^{5/2}} + \frac{x_1^2}{4(h^2 + x_1^2)^3}\right).$$

Спектр невозмущенной задачи в этом случае есть

$$E = \pm\sqrt{k_n^2 + k_y^2}. \tag{8}$$

Раскладывая функции, стоящие в знаменателе, в ряд Маклорена и учитывая в разложении только слагаемые не более второго порядка, вычислим первую поправку к спектру под действием возмущения $\hat{V}_{Torus}$ и $\hat{V}_{Helicoid}$.

Зависимость возмущения от числа атомов вдоль оси наноленты M показана на рис. 1.

Зависимость, приведенная на рис. 2*а*, носит сложный характер, что связано с квантованием спектра электронов в графеновой наноленте согласно (6). Отметим, что аналогичный характер носит зависимость энергетической щели в углеродных нанотрубках zig-zag-типа, которая также возникает вследствие квантования спектра электронов в направлении вдоль окружности нанотрубки. Что касается рис. 2*б* то, как показали рас-

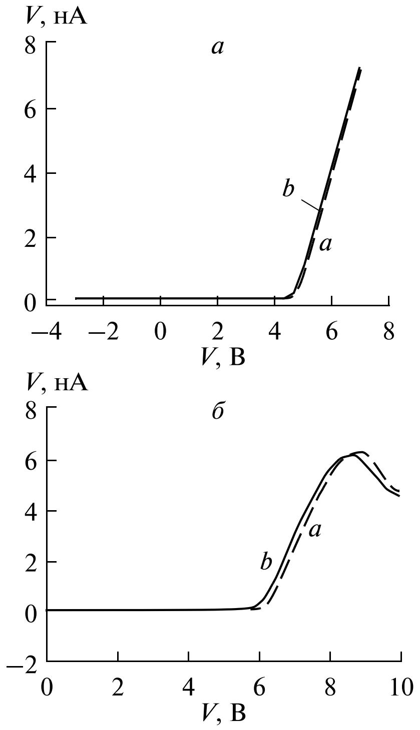

Рис. 2. Вольт-амперная характеристика контакта: изогнутая графеновая нанолента – металл: *а* – случай контакта с металлом, *б* – случай контакта с квантовыми точками. Зависимости приведены для тора (*a*); для геликоида (*б*).

четы, наиболее на поправку к энергии, на ее знак влияет величина параметризации геликоида *h*.

2. ТУННЕЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

В рамках теории Кубо туннельный ток задается формулой

$$J = 4\pi e|T|^2 \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dE \nu_A(E + eV)\nu_B(E)\big((n_f(E) - n_f(E + eV)\big), \quad (9)$$

$$\nu_A(E) = \sum_p \delta(E - E_p^A); \ \nu_B(E) = \sum_q \delta(E - E_q^B),$$

где $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака, $\nu_{A(B)}(E)$ – туннельная плотность состояний; $n_f(E)$ – равновесное число фермионов с энергией E. Здесь и далее используется приближение "шероховатого" контакта: $T_{pq} = T$ (т.е. фактически накладываются ограничения на геометрию контакта, т.е. в дальнейшем рассматривается случай, когда нанолента перпендикулярна к поверхности металла). Задавшись электронным спектром графеновых нанолент с учетом поправки и выбрав в качестве вещества, с которым происходит контакт, металл либо квантовые точки с законом дисперсии

$$E_q^A = \frac{p^2}{2m} \text{ и } E_q^A = \varepsilon_0 - \Delta\cos(p), \quad (10)$$

после вычисления интегралов, входящих в (11), легко получить вольт-амперную характеристику контакта, представленную на рис. 2.

Из приведенной на рис. 2 зависимости прослеживается асимметричность поведения тока в зависимости от прикладываемого напряжения к контакту в обоих случаях. Это связано как с особенностями электронного строения (плотностью состояний) графеновых нанолент и металла, так и с процессами рекомбинации носителей в переходе, при $V > 0$ преобладающими над процессами тепловой генерации (аналогичное поведение наблюдается для кремниевых диодов). Отметим, что приведенная зависимость может иметь важное практическое применение при исследовании наноконтактов и при конструировании графеновых нанодиодов.

Также отметим, что при некоторых значениях V наблюдается участок с отрицательным дифференциальным сопротивлением. Наличие такого участка позволяет использовать туннельный диод в качестве быстродействующего переключателя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V.et al.* // Science. 2004. V. 306. P. 666.
2. *Zhang Y., Tan J. W, Stormer H. L., Kim P.* // Nature. 2005. V. 438. P. 201.
3. *Brey L., Fertig H.A.* // Phys. Rev. B. 2006. V. 73. P. 235411.
4. *Belonenko M.B., Lebedev N.G., Yanyushkina N.N.* // J. Nanophotonics. 2010. V. 4, 041670.
5. *Vozmediano M.A.H., Katsnelson M.I., Guines F.* // arXiv:1003.5179v2[cond-mat.mes-hall] 20 Jul 2010.
6. *Биррел Н., Девис П.* Квантованные поля в искривленном пространстве-времени. М.: Мир, 1984. 356 с.