

01;02

Углеродные нанотрубки как терагерцовые излучатели нового типа

© О.В. Кибис, М.Е. Портной

Новосибирский государственный технический университет

E-mail: Oleg.Kibis@nstu.ru

School of Physics, University of Exeter,

Stocker Road, Exeter EX4 4QL, United Kingdom

Поступило в Редакцию 6 апреля 2005 г.

Теоретически показано, что в углеродных нанотрубках разогрев электронного газа электрическим полем может приводить к инверсии заселенности электронных подзон и, как следствие, к излучению электромагнитных волн терагерцового диапазона горячими электронами. Этот эффект может быть использован для создания нового типа терагерцовых излучателей на основе углеродных нанотрубок.

Углеродные нанотрубки представляют собой цилиндрические молекулы с нанометровым диаметром и микрометровой длиной [1]. Такое необычное сочетание масштабов диаметра и длины приводит к уникальным электронным свойствам углеродных нанотрубок, обещающим в перспективе создание новых наноэлектронных приборов, что определяет неослабевающий интерес научного сообщества к исследованию этих структур на протяжении последнего десятилетия. В предлагаемой работе мы впервые обсудим особенности энергетического спектра нанотрубок, которые могут быть использованы при создании терагерцовых излучателей, где накачка энергии осуществляется путем разогрева электронов с помощью электрического поля.

Электронные состояния в углеродной нанотрубке можно классифицировать с помощью двух квантовых чисел: целочисленного углового момента электрона l , характеризующего вращательное движение электрона вокруг оси нанотрубки, и непрерывного электронного волнового числа k , характеризующего поступательное движение электрона вдоль оси нанотрубки. В этих терминах энергетический спектр электронов в углеродной нанотрубке с произвольной кристаллографической структу-

рой (n, m) при $m \neq 0$ определяется выражением [2]

$$\varepsilon_l(k) = \pm \gamma_0 \left[1 + 4 \cos \left(\frac{k_s a}{2} \right) \cos \left(\frac{2n+m}{2m} k_s a - \frac{2\pi l}{m} \right) + 4 \cos^2 \left(\frac{k_s a}{2} \right) \right]^{1/2}, \quad (1)$$

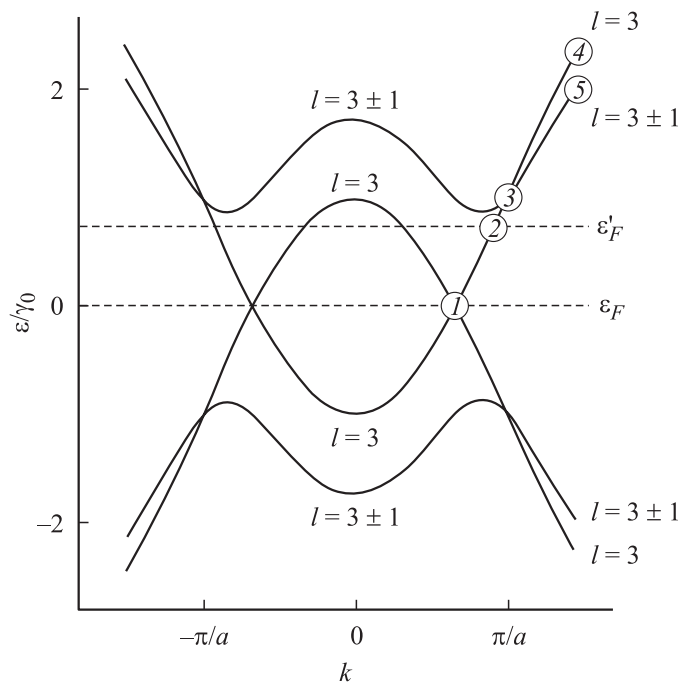
где

$$k_s = \frac{\pi l}{a} \frac{2n+m}{n^2+m^2+nm} + k \frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2+m^2+nm}},$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, \frac{2(n^2+m^2+nm)}{d_R} - 1,$$

знаки \pm соответствуют двум ветвям энергетического спектра электронов (соответственно зоне проводимости и валентной зоне), $\gamma_0 \approx 3$ eV — интеграл перекрытия электронных π -орбиталей ближайших углеродных атомов в графеновом листе, $a = \sqrt{3} \times a_{c-c} = 2.46$ Å, где $a_{c-c} = 1.42$ Å — расстояние между ближайшими углеродными атомами в графеновом листе, d_R — наибольший общий делитель чисел $2n+m$ и $2m+n$, а пара целых чисел (n, m) определяет кристаллографический тип углеродной нанотрубки в общепринятой нотации [1,2]. Таким образом, энергетический спектр электронов в нанотрубке представляет собой совокупность электронных подзон $\varepsilon_l(k)$, нумеруемых угловым моментом l . Из (1) следует, что при некоторых значениях волнового числа k возможно пересечение электронных подзон с отличающимися на единицу значениями углового момента l , между которыми разрешены оптические электронные переходы, сопровождающиеся излучением электромагнитных волн. Существенно, что благодаря этому пересечению появляется возможность создать условия для генерации электромагнитного излучения, разогревая электронный газ продольным электрическим полем, направленным вдоль оси нанотрубки. Обсудим этот эффект более подробно на частном примере углеродных нанотрубок с кристаллической структурой (n, n) .

Углеродные нанотрубки (n, n) (так называемые armchair carbon nanotubes в соответствии с общепринятой терминологией [1]) всегда обладают металлическим типом проводимости. Полагая в (1) $m = n$, получим выражение для энергетического спектра электронов в (n, n) -



Фрагмент энергетического спектра электронов в углеродной нанотрубке с кристаллографической структурой (3,3).

нанотрубке в форме

$$\varepsilon_l(k) = \pm \gamma_0 \left[1 + 4 \cos\left(\frac{\pi l}{n}\right) \cos\left(\frac{ka}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ka}{2}\right) \right]^{1/2}, \quad (2)$$

где $l = 0, 1, 2, \dots, 2n - 1$. Из анализа (2) следует, что основное электронное состояние в зоне проводимости (n, n) -нанотрубки соответствует подзоне с угловым моментом $l = n$. Поэтому для анализа интересных нас эффектов можно ограничиться рассмотрением подзон $l = n$ и $l = n \pm 1$. На рисунке приведен энергетический спектр этих подзон в схеме расширенных зон Бриллюэна для конкретной углеродной нанотрубки (3,3). Пусть к нанотрубке приложено электрическое поле, направленное вдоль ее оси. Под действием этого

поля электрон, первоначально находившийся на уровне Ферми ε_F (состояние 1 в подзоне $l = 3$), будет увеличивать свою энергию, перемещаясь в k -пространстве. Поскольку направленное вдоль оси нанотрубки продольное электрическое поле не может менять угловой момент электрона l , то движение электрона будет происходить вдоль ветви $l = 3$ по цепочке состояний $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$, где состояние 3 соответствует пересечению подзоны $l = 3$ и вырожденных подзон с угловыми моментами $l = 2$ и $l = 4$ (на рисунке эти вырожденные подзоны обозначены символом $l = 3 \pm 1$). После того как электрон в процессе своего движения минует состояние 3, возникает инверсная заселенность: имеются занятое высокоэнергетичное состояние 4 в подзоне $l = 3$ и свободное, ниже лежащее по энергии состояние 5 в подзоне $l = 3 \pm 1$. Очевидно, что такая инверсия заселенности приведет к генерации электромагнитных волн, соответствующих оптическим электронным переходам из состояния 4 в состояние 5.

Существенно, что положение уровня Ферми в нанотрубках можно менять в широком диапазоне как приложением поперечного электрического поля (поле затвора) в полевых транзисторах на основе углеродных нанотрубок [3], так и инжекцией носителей заряда из специально подобранных металлических контактов к нанотрубке [4]. Увеличив энергию Ферми ε_F до величины ε'_F достаточно близкой к энергии состояния 3, можно наблюдать обсуждаемый эффект при сколь угодно слабых греющих продольных электрических полях. В этой связи необходимо отметить, что разогрев электронного газа в углеродных нанотрубках может быть осуществлен значительно более просто, чем разогрев электронного газа в обычных полупроводниковых структурах, поскольку длина свободного пробега электронов в углеродных нанотрубках для упругих процессов рассеяния очень велика и даже при комнатных температурах составляет величину около микрометра [5,6]. Основным фактором, препятствующим разогреву электронного газа в нанотрубках, является неупругое рассеяние, сопровождаемое излучением высокоэнергетичных фононов с энергией около 0.2 eV [5,6]. Поэтому для успешного наблюдения эффекта необходимо увеличить энергию Ферми одним из вышеперечисленных способов [3,4] так, чтобы разность энергии точки пересечения подзон 3 и энергии электрона на уровне Ферми ε'_F (состояние 2) была меньше характерной энергии фононов 0.2 eV. Эта характерная энергия ограничивает также и максимальную энергию фотона, который может испускаться при оптическом переходе

из состояния 4 в состояние 5. Энергии фотона 0.2eV соответствует частота электромагнитной волны около 50THz , в связи с чем обсуждаемый эффект будет приводить к генерации электромагнитных волн в широком диапазоне, вплоть до терагерцовых частот включительно. Это обстоятельство представляется важным с точки зрения перспектив использования обсуждаемого эффекта в технике, поскольку создание эффективных терагерцовых излучателей является одной из наиболее актуальных проблем в современной прикладной физике [7].

Работа выполнена при поддержке Британского Королевского общества, INTAS, РФФИ и Программы „Университеты России“.

Список литературы

- [1] *Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S.* Physical Properties of Carbon Nanotubes. London: Imperial College Press, 1998. 260 p.
- [2] *Kibis O.V., Parfitt D.G.W., Portnoi M.E.* // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. P. 035 411.
- [3] *Appenzeller J., Knoch J., Derycke V.* et al. // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 89. P. 126 801.
- [4] *Misewich J.A., Martel R., Avouris Ph.* et al. // Science. 2003. V. 300. P. 783–786.
- [5] *Park J.-Y., Rosenblatt S., Yaish Y.* et al. // Nano Lett. 2004. V. 4. N. 3. P. 517–520.
- [6] *Javey A., Guo J., Paulsson M.* et al. // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 92. P. 106 804.
- [7] *Davies G., Linfield E.* // Physics World. 2004. V. 17. N. 4. P. 37–41.