

Туннельный ток контакта между графеновыми нанолентами с примесными атомами

© М.Б. Белоненко^{+,*}, А.В. Пак^{‡,¶}, Н.Г. Лебедев[‡]

⁺ Волгоградский институт бизнеса (лаборатория нанотехнологий),
400048 Волгоград, Россия

^{*} Entropic Inc., London, N6J 3S2, ON, Canada

[‡] Волгоградский государственный университет,
400062 Волгоград, Россия

(Получена 21 марта 2012 г. Принята к печати 29 мая 2012 г.)

На основании рассчитанной ранее плотности состояний для исследуемого материала были получены вольт-амперные характеристики туннельного контакта между двумя графеновыми нанолентами с примесными атомами. Построены зависимости от геометрических и энергетических характеристик нанолент.

1. Введение

В последнее время интерес многих исследователей направлен на изучение свойств трансформированного графена [1,2]. Это обусловлено тем, что „чистый“, идеальный, графен не имеет энергетической щели в зонной структуре и поэтому создание на его основе различных устройств (например, аналогов транзисторов) крайне затруднительно. В качестве примера модифицированного графена можно рассмотреть графеновые наноленты с примесными атомами, которые вследствие ограниченности в пространстве в одном измерении и появлении дополнительного квазилокализованного уровня в зонной структуре имеют квантованный энергетический спектр электронов, что в свою очередь может приводить к образованию энергетической щели в зонной структуре. Благодаря линейному закону дисперсии $\varepsilon = v_f \hbar k$ и высокой скорости Ферми ($v_f \approx 10^6$ м/с) в графене энергия квантования графеновой наноленты может быть существенно больше, чем в обычных полупроводниковых материалах той же размерности и с параболическим законом дисперсии. Наиболее очевидным способом экспериментальной проверки изменения плотности состояний является изучение туннельного тока [3,4], например, для контакта лент между собой.

2. Основные уравнения

Дисперсионное соотношение для однослойного графена с адсорбированными различными одиночными атомами рассчитывалось с помощью математического аппарата функций Грина и имеет следующий вид [5]:

$$\varepsilon_{k, \text{adsorb}} = \frac{1}{2} \left[\varepsilon_a + \varepsilon_k \pm \sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_k)^2 + 4 \frac{N_{\text{imp}}}{N} |V_{ka}|^2} \right]. \quad (1)$$

Здесь ε_a — энергия адсорбированного атома, ε_k — энергии в зонной структуре однослойной графеновой ленты, электронный спектр которой представлен далее,

V_{ka} — потенциал гибридизации, N — число элементарных ячеек, N_{imp} — число атомов примесей. Свойства электронов в графеновой наноленте в длинноволновом приближении будем описывать следующим дисперсионным соотношением [6]:

$$\varepsilon_m(k_{\parallel}) = \pm \hbar v_f \sqrt{k_{\parallel}^2 + (m + \alpha)^2 \pi^2 / W^2}. \quad (2)$$

Для ленты шириной W модуль волнового вектора, перпендикулярного направлению движения, может принимать дискретные значения согласно соотношению $k_{\perp} W = \pi m$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ — целое число для подзоны ленты, α зависит от кристаллографической ориентации графеновой наноленты и дает запрещенную щель $\Delta = 2\Delta\varepsilon|\alpha|$, где $\Delta\varepsilon = \hbar v_f \pi / W$ — это разность энергий между подзонами.

Заметим, что модуль волнового вектора k находится из граничных условий на концах наноленты.

В данном случае была для определенности выбрана нанолента типа arm-chair [7], и

$$k_n = \frac{2\pi}{3a_0} \left(\frac{2M + 1 + n}{2M + 1} \right), \quad (3)$$

где a_0 — расстояние между атомами в углеродной решетке, M — число атомов вдоль оси наноленты, n — квантовое число.

3. Туннельные характеристики

Геометрия исследуемой задачи представлена на рис. 1.

При изучении туннельных эффектов зададим гамилтониан нашей модели в виде

$$H = \sum_p \varepsilon_p^A a_p^+ a_p + \sum_q \varepsilon_q^B b_q^+ b_q + \sum_{pq} T_{pq} (a_p^+ b_q + b_q^+ a_q), \quad (4)$$

где a_p^+ , a_p — операторы рождения, уничтожения электронов с импульсом p в графеновых нанолентах; ε_p^A — электронный спектр графеновых нанолент (1), T_{pq} — матричный элемент оператора туннелирования между

[¶] E-mail: pak.anastasia@gmail.com

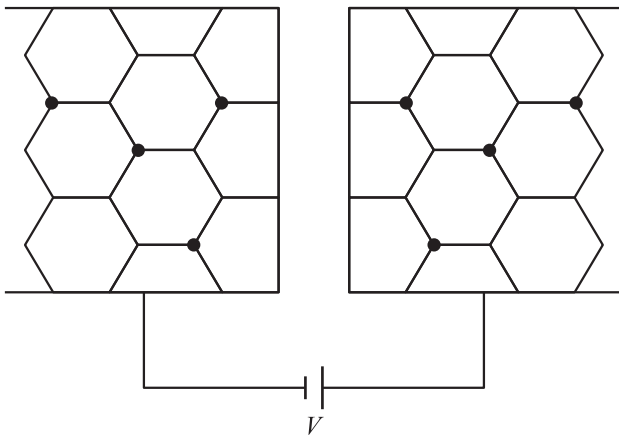


Рис. 1. Геометрия задачи.

состояниями p и q ; b_q^+ , b_q — операторы рождения, уничтожения электронов с импульсом q в веществе, приведенном в контакт с графеновой нанолентой; ϵ_p^B — электронный спектр другого вещества. Отметим, что в (3) p и q являются мультииндексами. Так, для графеновой наноленты (далее мы возьмем для определенности графеновую наноленту типа arm-chair) мультииндекс $p = (p_y, n)$, $n = 0, 1 \dots M - 1$. Мультииндекс q определяется веществом, приведенным в контакт, и, например, для металлов он имеет вид $q = (p_x, p_y, p_z)$, тогда как для графена $q = (p_x, p_y)$. Отметим, что рассмотрение внешнего электрического поля \mathbf{E} , которое мы будем исследовать в калибровке

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t},$$

можно легко провести при помощи замены соответствующей компоненты импульса: $p \rightarrow p - eA/c$.

Определяя туннельный ток как [8]

$$J = ie \sum_{pq} (a_p^+ b_q - b_q^+ a_p) \quad (5)$$

и делая калибровочное преобразование [8]

$$a_p \rightarrow S^{-1} a_p S,$$

$$S = \exp\left(ieVt \sum_p a_p^+ a_p\right),$$

где V — приложенное для определенности к графеновым нанолентам напряжение, e — заряд электрона, можно формально свести задачу о вычислении вольт-амперной характеристики к вычислению отклика оператора $J_t = ie \sum_{pq} T_{pq} (a_p^+ b_q e^{ieVt} - b_q^+ a_p e^{-ieVt})$ на внешнее воздействие [8]:

$$H_t = \sum_{pq} T_{pq} (a_p^+ b_q e^{ieVt} - b_q^+ a_p e^{-ieVt}).$$

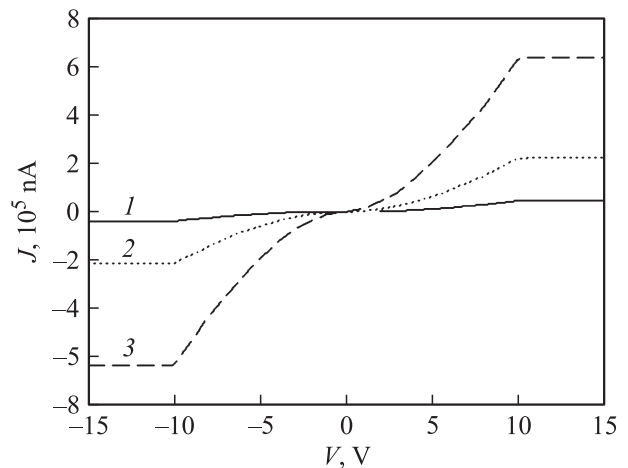


Рис. 2. ВАХ для разных значений ширины ленты, нм: 1 — 100, 2 — 200, 3 — 500.

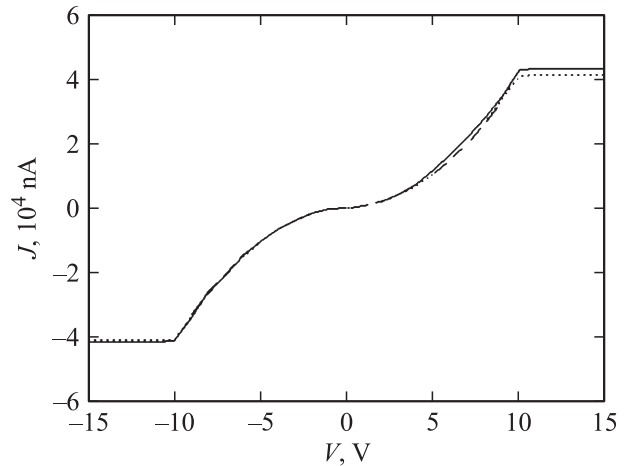


Рис. 3. ВАХ для разных значений энергии гибридизации: -1.43 (сплошная линия), -0.4 (пунктирная), -0.1 эВ (штриховая).

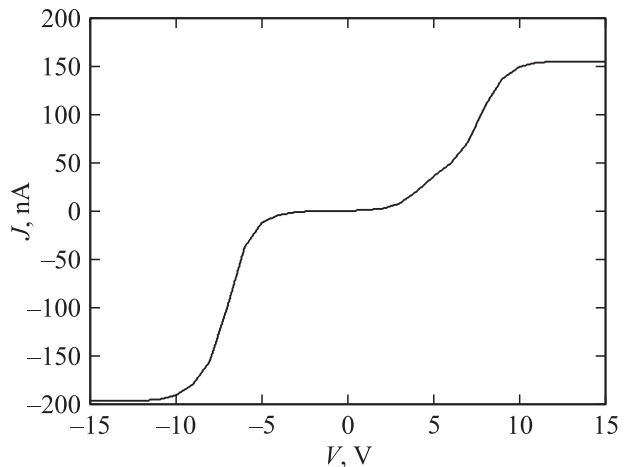


Рис. 4. ВАХ для энергии уровня примесных атомов ($\epsilon_{1\sigma}$) -5.11 эВ.

В рамках теории Кубо выражение для тока задается формулой

$$J = 4\pi e|T|^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon v_A(\varepsilon + eV)v_B(\varepsilon)[n_f(\varepsilon) - n_f(\varepsilon + eV)],$$

$$v_A(\varepsilon) = \sum_p \delta(\varepsilon - \varepsilon_p^A), \quad v_B(\varepsilon) = \sum_q \delta(\varepsilon - \varepsilon_q^B), \quad (6)$$

где $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака, $v_{A,B}(\varepsilon)$ — туннельная плотность состояний; $n_f(\varepsilon)$ — равновесное число фермионов с энергией ε . Здесь и далее используется приближение „шероховатого“ контакта: $T_{pq} = T$ (фактически накладываются ограничения на геометрию контакта, т.е. в дальнейшем рассматривается случай, когда нанолента перпендикулярна к поверхности контактного материала).

После вычисления интегралов, входящих в (6), легко получить вольт-амперную характеристику контакта, представленную на рис. 2–4.

На рис. 2 ярко выражен размерный эффект, когда характеристики туннельного контакта сильно зависят от геометрических размеров графеновых нанолент. Чем больше ширины графеновых лент, вступающих в контакт, тем больше величина протекающего туннельного тока. Отметим, что подобное поведение связано, на наш взгляд, с туннельной плотностью состояний графеновой наноленты, а участок с насыщением объясняется плотностью состояний исходных систем. В доказательство последнего утверждения приведен рис. 3, на котором явно видна зависимость от величины потенциала гибридизации примесных атомов ленты. Как видно, существенных изменений зависимости не происходит.

На рис. 4 представлены вольт-амперные характеристики контактов в зависимости от энергии уровня примесных атомов. Как видно из рис. 4, уровень энергии сверхрешетки квантовых точек также определяет вид вольт-амперной характеристики контакта, что при существующей технологии изготовления систем квантовых точек дает возможность формировать туннельные диоды с заданным набором свойств.

Полученные зависимости могут иметь важные практические приложения при изучении наноконтактов и при конструировании туннельных диодов на основе графеновых нанолент.

4. Заключение

В заключение сформулируем основные выводы из сделанной работы:

— получены вольт-амперные характеристики контактов графеновая нанолента–графеновая нанолента с выраженным размерным эффектом;

— величина тока насыщения для данного контакта определяется зонной структурой контактируемых систем.

Работа поддержана грантом РФФИ № 12-02-31654.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и образования РФ, госконтракт № 14.740.11.0374.

Список литературы

- [1] Y. Zhang, J.W. Tan, H.L. Stormer, P. Kim. *Nature*, **438**, 201 (2005).
- [2] S. Stankovich, D.A. Dikin, Gh.B. Dommett, K.M. Kohlhaas, E.J. Zimney, E.A. Stach, R.D. Piner, S.T. Nguyen, R.S. Ruoff. *Nature*, **442**, 282 (2006).
- [3] M.B. Belonenko, N.G. Lebedev, N.N. Yanyushkina. *J. Nanophotonics*, **4**, 041 670 (2010).
- [4] Н. Кобаяси. *Введение в нанотехнологию* (М., БИНОМ, 2007).
- [5] M.B. Belonenko, A.V. Popov, N.G. Lebedev, A.V. Pak, A.V. Zhukov. *Phys. Lett. A*, **375**, 946 (2011).
- [6] Yu.M. Lin, V. Perebeinos, Zh. Chen, Ph. Avouris. arXiv:0805.0035v2[cond-mat.mes-hall] 1 May 2008.
- [7] L. Brey, H.A. Fertig. *Phys. Rev. B*, **73**, 235 411 (2006).
- [8] Л.С. Левитов, А.В. Шитов. *Функции Грина. Задачи с решениями* (М., Физматлит, 2003).

Редактор Л.В. Шаронова

The tunneling current of the contact between impurity graphene nanoribbons

M.B. Belonenko^{+,*}, A.V. Pak[‡], N.G. Lebedev[‡]

⁺ Volgograd Institute of Business
(Laboratory of the Nanotechnology),
400048 Volgograd, Russia

^{*} Entropique Inc., London, N6J 3S2, ON, Canada

[‡] Volgograd State University,
400062 Volgograd, Russia

Abstract Current–voltage characteristics of a tunnel contact between two impurity graphene nanoribbons have been obtained, based on the previously calculated density of states. The dependences of the geometrical and energy characteristics of nanoribbons have been calculated.