

УДК 537.9

## ИОНИЗАЦИЯ ПРИМЕСЕЙ СТАТИЧЕСКИМ И ПЕРЕМЕННЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ ПОЛЯМИ В ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ТИПА

© 2022 г. О. Ю. Бабина<sup>1</sup>, С. Ю. Глазов<sup>1, 2, \*</sup>, И. А. Подгорная<sup>1, 2</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Волгоградский государственный социально-педагогический университет”, Волгоград, Россия

<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Волгоградский государственный медицинский университет”, Волгоград, Россия

\*E-mail: ser-glazov@yandex.ru

Поступила в редакцию 24.08.2021 г.

После доработки 06.09.2021 г.

Принята к публикации 22.09.2021 г.

Исследована вероятность ионизации примесей в однослойных углеродных нанотрубках полупроводникового типа в присутствии сильных постоянного и переменного электрических полей в квазиклассическом приближении. Электрические поля поляризованы вдоль оси нанотрубки. Получены аналитические выражения для вероятности ионизации в присутствии только постоянного или переменного электрических полей в предельных случаях.

DOI: 10.31857/S0367676522010033

### ВВЕДЕНИЕ

Электрические свойства углеродных нанотрубок (УНТ) существенно различаются в зависимости от их структуры, условий синтеза, наличия примесей и дефектов. Первоначальные эксперименты проводились над образцами, содержащими хаотично расположенные нанотрубки разных типов, что затрудняло теоретическое описание полученных результатов. Экспериментальные значения данных свойств, например, электрического сопротивления, теплопроводности, варьируются в пределах нескольких порядков величины. В настоящее время большее внимание уделяется исследованию одиночных углеродных нанотрубок или систем, содержащих нанотрубки одного типа (например, вертикально выровненные массивы углеродных нанотрубок), поскольку в этом случае появляется возможность для теоретического предсказания и практического получения структур с заданными свойствами. Современные технологии позволяют получать “чистые” УНТ, практически без примесей [1]. Будущее за технологиями, обеспечивающими контроль над составом и концентрацией примесных центров.

Одним из методов для описания ионизации атомов под действием внешних электрических полей является квазиклассический метод “мнимого времени”. Первоначально построенный для структур с квадратичным энергетическим спектром [2–4], он успешно развит для полупровод-

никовых узкозонных структур [5, 6] и активно применяется для современных низкоразмерных систем [7–10].

В данной работе изучается одновременное влияние постоянного и переменного квазиклассически сильных электрических полей на ионизацию примесных центров в УНТ полупроводникового типа.

### ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Электронная структура УНТ описывается, как правило, в рамках анализа динамики  $\pi$ -электронов в приближении сильной связи, учитывающем взаимодействие лишь трех соседних атомов в гексагональной структуре. В рамках данной модели закон дисперсии, описывающий свойства УНТ типа zigzag  $(m, 0)$ , имеет вид [11]

$$\varepsilon = \pm \gamma \sqrt{1 + 4 \cos y (\cos x + \cos y)}, \quad (1)$$

где  $\gamma \approx 2.7$  эВ – интеграл перескока электронов между соседними узлами кристаллической решетки,  $x = p_x a$ ,  $y = \pi s / m$ ,  $s = 1, 2 \dots m$ ,  $a = 3b / 2\hbar$ ,  $b = 0.142$  нм – расстояние между соседними атомами углерода в графене,  $p_x$  – квазиимпульс электрона вдоль оси УНТ. Разные знаки относятся к зоне проводимости и валентной зоне. Закон дисперсии (1) можно получить из хорошо известного энергетического спектра неограниченной графитовой плоскости (графена), накладывая периоди-

ческие граничные условия, из-за которых поперечная составляющая квазиимпульса электрона принимает лишь набор дискретных значений. Продольная компонента квазиимпульса при этом остается непрерывной. Энергетический спектр электронов в нанотрубке представляет собой совокупность электронных подзон  $\epsilon_s(k)$ , нумеруемых угловым моментом  $s$ .

Процесс перехода электрона с примесного уровня в зону проводимости представляет собой туннелирование электрона через потенциальный барьер и может носить квазиклассический характер [3]. При этом вероятность перехода (ионизации) описывается с экспоненциальной точностью в виде

$$W = \exp\left(-\frac{2 \operatorname{Im}(S)}{\hbar}\right), \quad (2)$$

где  $S$  – классическое действие, которое набирает частица при подбарьерном движении, определяемое формулой

$$S = \int_0^{t_0} [\epsilon(p(t)) - V] dt, \quad (3)$$

где  $p(t)$  – импульс электрона, определяемый из классического уравнения движения,  $V$  – энергия залегания примеси. Предполагаем, что примеси находятся в УНТ на заданной глубине  $v$ . На рис. 1. уровень энергии примеси обозначен штриховой линией. Начало отсчета энергии выбираем посередине запрещенной зоны.

Электрические поля  $\vec{E} = \{E_1 + E_0 \cos \omega t, 0\}$  поляризованы вдоль оси нанотрубки. Характеристики

электрических полей выбираются такие, чтобы выполнялось условие применимости квазиклассического метода

$$\operatorname{Im}(S) \gg \hbar. \quad (4)$$

Для нахождения момента начала туннелирования  $t_0$  воспользуемся условием минимума мнимой части действия

$$\left. \frac{\partial \operatorname{Im}(S(t))}{\partial t} \right|_{t_0} = 0, \quad (5)$$

что соответствует условию

$$\epsilon(t_0) = V. \quad (6)$$

Для нахождения  $\epsilon(t)$  достаточно рассмотреть классическое уравнение движения

$$\frac{dp_x}{dt} = eE_x, \quad (7)$$

с начальным условием  $p_x(0) = p_{0x}$ ,  $s(0) = s_0$ , что соответствует попаданию электрона в зону проводимости в состоянии с минимальной энергией.

Подставляя решение (7) в (6), получим трансцендентное уравнение для нахождения момента начала туннелирования, корень которого чисто мнимый  $t_0 = i\tau_0$ . После перехода к безразмерным единицам получаем уравнение, которое решается численно

$$F_1 \tilde{\tau}_0 + \frac{F_0}{w} \operatorname{sh}(w \tilde{\tau}_0) = \beta, \quad (8)$$

где

$$\beta = \operatorname{arch} \left( \frac{(\tilde{\Delta} - \tilde{v})^2 - 1 - 4 \cos^2(y_0)}{4 \cos(x_0) \cos(y_0)} \right),$$

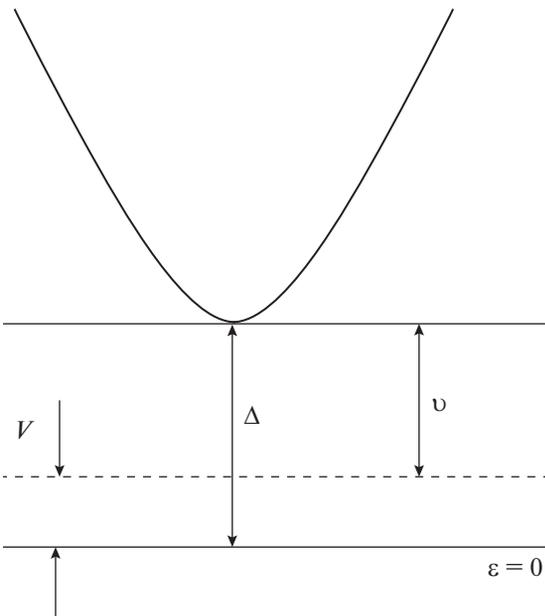


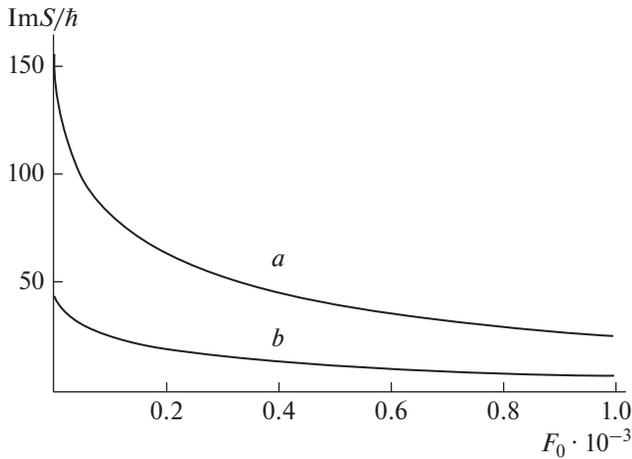
Рис. 1. Энергетическая диаграмма примеси.

$\tilde{\Delta} = \Delta/\gamma$ ,  $\Delta$  – полуширина запрещенной зоны,  $\tilde{v} = v/\gamma$ ,  $w = \hbar\omega/\gamma$ ,  $\tilde{\tau}_0 = \gamma\tau_0/\hbar$ ,  $F_1 = aeE_1\hbar/\gamma$ ,  $F_0 = aeE_0\hbar/\gamma$ . Отметим, что при выводе формулы (8) можно конкретизировать значения  $x_0$  и  $y_0$ , для УНТ определенного радиуса [11]

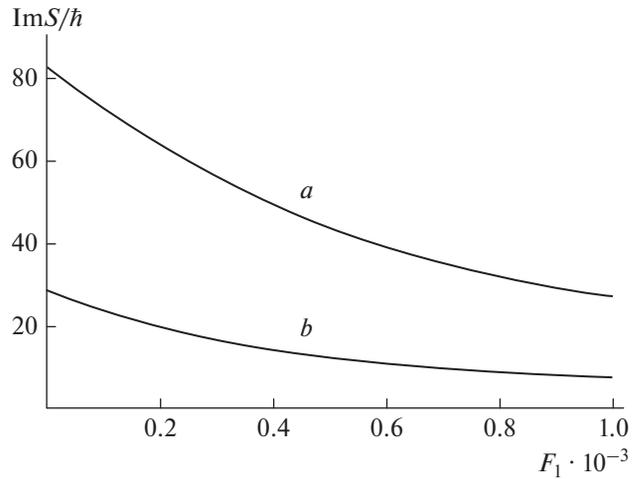
$$R = \frac{\sqrt{3}b}{2\pi} m. \quad (9)$$

Например, для УНТ типа zigzag (14, 0) для самых низших подзон ( $s = 5$  и  $s = 9$ ) мы имеем эквивалентные точки с безразмерной компонентой квазиимпульса  $(0, 9\pi/14)$ ,  $(\pi, 5\pi/14)$  и  $(-\pi, 5\pi/14)$ . Отметим, что для всех подзон  $\sin(x_0) = 0$ , и это будет учтено в дальнейших формулах.

По формуле (3) проведен расчет классического действия, с момента времени начала туннелирования  $t_0$  до момента выхода частицы из-под барьера при  $t = 0$ . Подставляя в (3) решение (8), находим мнимую часть действия в виде интеграла



**Рис. 2.** Зависимость мнимой части действия  $S$  от амплитуды переменного электрического поля в безразмерных единицах при  $F_1 = 0.0002$ ;  $w = 0.005$ ;  $m = 13$  (а), 14 (б).



**Рис. 3.** Зависимость мнимой части действия  $S$  от напряженности постоянного электрического поля в безразмерных единицах при  $F_0 = 0.0002$ ;  $w = 0.005$ ;  $m = 13$  (а), 14 (б).

$$\text{Im } S = \hbar \int_0^{\tilde{t}_0} \left\{ \sqrt{1 + 4 \text{ch} \left( F_1 t + \frac{F_0}{w} \text{sh}(wt) \right) \cos x_0 \cos y_0 + 4 \cos^2 y_0 + (\tilde{v} - \tilde{\Delta})} \right\} dt, \quad (10)$$

который не выражается через элементарные функции, поэтому берется численно.

Отметим, что мнимая часть действия в (10) зависит от начальных условий, т.е. от того, в какую подзону совершается переход.

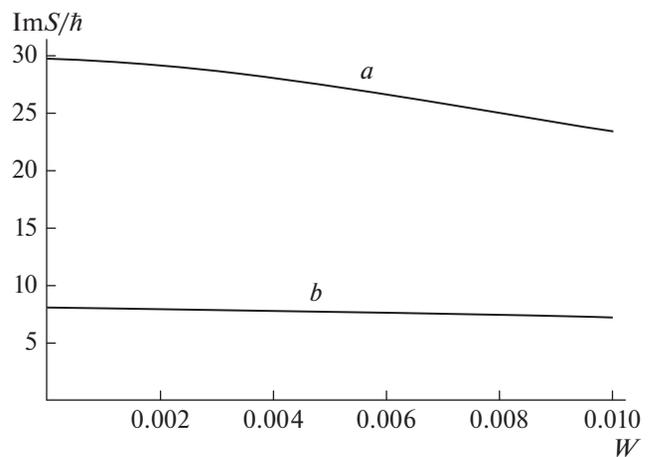
### РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

Выполнено численное исследование вероятности ионизации примесей в зависимости от параметров приложенных полей. На рис. 2–4 приведены характерные зависимости мнимой части действия от параметров электрических полей в безразмерных единицах для УНТ типа zigzag (13, 0) и (14, 0). С ростом частоты и амплитуды переменного и напряженности постоянного электрического поля вероятность ионизации примесей в УНТ увеличивается, что согласуется с результатами работ [7–10] и более ранних работ, посвященных узкозонным полупроводникам и сверхрешеткам [5, 6]. Увеличение числа подзон соответствует увеличению радиуса нанотрубки. Таким образом, при увеличении радиуса УНТ мнимая часть действия уменьшается, при этом вероятность ионизации возрастает. Отметим также, что при увеличении радиуса УНТ уменьшается запрещенная зона и уменьшается ширина разрешенных подзон.

Сделаем численные оценки параметров, используемых при построении графиков на рис. 2–4: значения безразмерных напряженностей  $F_{0,1} = 10^{-3}$

соответствуют  $E_{0,1} \approx 10^5 \text{ В} \cdot \text{см}^{-1}$ , а безразмерной частоте  $w = 0.01$  соответствует  $\omega \approx 4 \cdot 10^{13} \text{ Гц}$ . Для УНТ типа zigzag (13, 0) для подзон  $s = 4$  и  $s = 9$  ширина подзоны проводимости  $\Delta_e \approx 2.0\gamma$ ,  $\Delta \approx 1.36\gamma$ . Для УНТ типа zigzag (14, 0) для подзон  $s = 5$  и  $s = 9$  ширина подзоны проводимости  $\Delta_e \approx 1.74\gamma$ ,  $\Delta \approx 1.32\gamma$ .

При решении задачи не учитывались межзонные переходы, что соответствует выполнению усло-



**Рис. 4.** Зависимость мнимой части действия  $S$  от частоты переменного электрического поля в безразмерных единицах при  $F_1 = 0.0001$ ;  $F_0 = 0.001$ ;  $m = 13$  (а), 14 (б).

вия  $\hbar\omega \ll 2\Delta$  ( $\omega \ll 10^{15} \text{ с}^{-1}$ ), и тепловыми забросами электронов с примеси в подзоны  $-k_{\text{Б}}T \ll \nu$  ( $T \ll 2 \cdot 10^3 \text{ К}$ ).

### ОСНОВНЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Рассмотрим случай действия только постоянного электрического поля  $\vec{E} = \{E_1, 0\}$ , ориентированного вдоль оси нанотрубки.

Для момента времени начала туннелирования  $t_0 = i\hbar\tilde{\tau}_0/\gamma$  из (8) получен аналитический результат

$$\tilde{\tau}_0 = \frac{\beta}{F_1}. \quad (11)$$

По формуле (3) проведен расчет классического действия, набираемого частицей при подбарьерном движении с момента времени начала туннелирования  $t_0$  до момента выхода частицы из-под барьера при  $t = 0$

$$S = \frac{\hbar}{F_1} \left\{ 2\delta E \left( i \frac{\beta}{2}; k \right) + i(\tilde{\nu} - \tilde{\Delta})\beta \right\}, \quad (12)$$

где  $\delta = \sqrt{1 + 4 \cos(y_0)(\cos(x_0) + \cos(y_0))}$ ,  $k = 8 \cos(x_0)\cos(y_0)/\delta^2$ .

$$\text{Im } S = i\hbar \int_0^{\tilde{\tau}_0} \sqrt{1 + 4 \cos x_0 \cos y_0 \text{ch} \left( \frac{F_0}{w} \text{sh}(wt) \right) + 4 \cos^2 y_0} dt + (\tilde{\nu} - \tilde{\Delta})\tilde{\tau}_0. \quad (15)$$

Интеграл в (15) не выражается в элементарных функциях, поэтому для получения аналитического результата рассмотрим несколько частных случаев.

В случае  $F_0/w \ll 1$ , ограничившись первым членом разложения гиперболического косинуса в ряд Тейлора, после преобразования и выделения мнимой части действия, имеем

$$\begin{aligned} \text{Im } S = & \frac{\hbar}{w} \left\{ \delta [-E(\text{arctg}(\xi), 1 - k') + \right. \\ & + F(\text{arctg}(\xi), 1 - k') + \xi \sqrt{\frac{1 + k'\xi^2}{1 + \xi^2}} + \\ & \left. + (\tilde{\nu} - \tilde{\Delta}) \text{arsh} \left( \frac{w\beta}{F_0} \right) \right\}, \quad (16) \end{aligned}$$

где  $\xi = w\beta/F_0$ ,  $k' = 2 \cos x_0 \cos y_0 (F_0/w)^2/\delta^2$ .

Выделив мнимую часть действия [12], имеем

$$\begin{aligned} \text{Im } S = & \frac{\hbar}{F_1} \left\{ 2\delta [-E(\text{arctg}(\xi), 1 - k) + \right. \\ & \left. + F(\text{arctg}(\xi), 1 - k) + \xi \sqrt{\frac{1 + k\xi^2}{1 + \xi^2}} + (\tilde{\nu} - \tilde{\Delta})\beta \right\}, \quad (13) \end{aligned}$$

где  $\xi = \text{sh}(\beta/2)$ ,  $F(x, k)$  и  $E(x, k)$  – эллиптические интегралы I и II рода соответственно. Мнимая часть действия, как видно из формулы (13), обратно пропорциональна напряженности постоянного электрического поля, что является характерной особенностью полупроводниковых структур в квазиклассически сильных электрических полях [2–5, 7, 8]. Коэффициент в фигурных скобках содержит информацию о параметрах примеси и исследуемой структуры.

Рассмотрим случай действия только переменного электрического поля  $\vec{E} = \{E_0 \cos \omega t, 0\}$ , поляризованного вдоль оси нанотрубки.

Время начала туннелирования можно получить из (8)

$$\tilde{\tau}_0 = \frac{1}{w} \text{arsh} \left( \frac{w\beta}{F_0} \right). \quad (14)$$

Аналогично предыдущему случаю воздействия на систему только постоянного электрического поля, используя формулу (3), получим выражение для действия

В противоположном предельном случае  $F_0/w \gg 1$  после преобразования получаем выражение для мнимой части действия

$$\begin{aligned} \text{Im } S = & \frac{\hbar}{w} \text{arsh} \left( \frac{w\beta}{F_0} \right) \left\{ \frac{2\delta}{\beta} [-E(\text{arctg}(\xi'), 1 - k) + \right. \\ & \left. + F(\text{arctg}(\xi'), 1 - k) + \xi' \sqrt{\frac{1 + k\xi'^2}{1 + \xi'^2}} + (\tilde{\nu} - \tilde{\Delta}) \right\}, \quad (17) \end{aligned}$$

где  $\xi' = \text{sh} \frac{\beta}{2}$ .

В случае, когда в дополнение к условию  $F_0/w \gg 1$  еще и  $\beta/2 \ll 1$ , выражение для мнимой части действия значительно упрощается

$$\begin{aligned} \text{Im } S = & \frac{\hbar}{w} \text{arsh} \left( \frac{w\beta}{F_0} \right) \times \\ & \times \left\{ \delta \int_0^1 \sqrt{1 + k''\beta^2 z^2} dz + (\tilde{\nu} - \tilde{\Delta}) \right\}, \quad (18) \end{aligned}$$

где  $k'' = k'/4$ . После взятия интеграла в (18), получим следующее выражение для мнимой части действия

$$\text{Im } S = \frac{\hbar\beta}{F_0} \times \left\{ \frac{\delta}{2} \left( \sqrt{1 + k''\beta^2} + \frac{\text{arsh}(\sqrt{k''\beta^2})}{\sqrt{k''\beta^2}} \right) + (\tilde{\nu} - \tilde{\Delta}) \right\}. \quad (19)$$

Как видно из (19), в данном предельном случае пропадает зависимость мнимой части действия, а, следовательно, и вероятности ионизации примесей от частоты переменного электрического поля.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получено выражение для нахождения вероятности ионизации примесей статическими и переменными электрическими полями в квазиклассическом приближении в однослойных УНТ полупроводникового типа. Электрические поля поляризованы вдоль оси УНТ. В результате численного исследования показано, что при увеличении таких параметров как: частота, амплитуда переменного и напряженность постоянного электрического поля, возрастает вероятность ионизации примесей в УНТ. С увеличением радиуса УНТ при одинаковой глубине залегания примесных центров и параметров приложенных полей вероятность ионизации примесей возрастает. Получено аналитическое выражение для вероятности ионизации примесей в УНТ, находящихся в постоянном электрическом поле. В случае воздействия переменного электрического поля получены аналитические выражения для вероятности ионизации примесей в предельных случаях. Проведено сравнение ионизации примесей в УНТ с щелевы-

ми модификациями графена и полупроводниковыми структурами.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zhukova E.A., Urvanov S.A., Karaeva A.R. et al. // Mater. Today. Proc. 2018. V. 5. No. 12. Art. No. 25948.
2. Попов В.С., Кузнецов В.П., Переломов А.М. // ЖЭТФ. 1967. № 53. С. 331; Popov V.S., Kuznetsov V.P., Perelomov A.M. // J. Exp. Theor. Phys. 1968. V. 26. P. 222.
3. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1989.
4. Попов В.С., Карнаков Б.М., Мур В.Д. // ЖЭТФ. 1998. № 113. V. 5. С. 1579; Popov V.S., Karnakov B.M., Mur V.D. // J. Exp. Theor. Phys. 1998. V. 86. No. 5. P. 860.
5. Крючков С.В., Сыродоев Г.А. // Изв. вузов СССР. Радиофиз. 1990. № 6. С. 762.
6. Крючков С.В., Сыродоев Г.А. // ФТП. 1988. Т. 22. № 9. С. 1695.
7. Глазов С.Ю., Бадикова П.В. // Журн. нано-электрон. физ. 2018. № 2. Т. 10. С. 02020.
8. Бадикова П.В., Глазов С.Ю. // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 11. С. 1536; Badikova P.V., Glazov S.Yu. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2018. V. 82. No. 11. P. 1399.
9. Бадикова П.В., Глазов С.Ю., Сыродоев Г.А. // ФТП. 2019. Т. 53. № 7. С. 927; Badikova P.V., Glazov S.Yu., Syrodoyev G.A. // Semicond. 2019. V. 53. No. 7. P. 911.
10. Бадикова П.В., Глазов С.Ю., Сыродоев Г.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 1. С. 38; Badikova P.V., Glazov S.Yu., Syrodoyev G.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 1. P. 30.
11. Максименко С.А., Слепян Г.Я. // Радиотехн. и электроника. 2002. Т. 47. № 3. С. 261; Maksimenko S.A., Slepian G.Ya. // J. Commun. Technol. Electron. 2002. V. 47. No. 3. P. 235.
12. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. Москва: Наука, 1979.

## Ionization of impurities by static and alternating electric fields in single-layer carbon nanotubes of the semiconductor type

O. Yu. Babina<sup>a</sup>, S. Yu. Glazov<sup>a, b, \*</sup>, I. A. Podgornaya<sup>a, b</sup>

<sup>a</sup> Volgograd State Socio-Pedagogical University, Volgograd, 400005 Russia

<sup>b</sup> Volgograd State Medical University, Volgograd, 400131 Russia

\*e-mail: ser-glazov@yandex.ru

The probability of impurity ionization in single-layer carbon nanotubes of the semiconductor type in the presence of strong DC and AC electric fields in the quasi-classical approximation is studied. The electric fields are polarized along the axis of the nanotube. Analytical expressions are obtained for the probability of ionization in the presence of only constant or alternating electric fields in the limiting cases.