

УДК 537.9

ПРОВОДИМОСТЬ ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ТИПА С УЧЕТОМ ИОНИЗАЦИИ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ

© 2022 г. С. Ю. Глазов^{1, 2, *}, Н. Е. Мещерякова², И. А. Подгорная^{1, 2}

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

²Федеральное 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 зависимость плотности тока в однослойной углеродной нанотрубке полупроводникового типа от характеристик приложенных статического и переменного электрических полей с учетом ионизации примесных центров. Для расчета тока использовано решение кинетического уравнения Больцмана с модельным интегралом столкновений Батнагара–Гросса–Крука при учете темпа генерации и рекомбинации.

DOI: 10.31857/S0367676522010124

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время внимание исследователей сосредотачивается на изучении графеновых структур и, в частности, углеродных нанотрубок (УНТ). Исследованию проводимости УНТ посвящено достаточно большое количество работ [1–5]. В [3] изучена проводимость УНТ различных типов в присутствии постоянного электрического поля, получены вольт-амперные характеристики, выявлены участки дифференциальной отрицательной проводимости. В [5, 6] исследовано влияние переменного электрического поля на проводимость и генерацию высших гармоник тока вертикально выровненного массива однослойных УНТ полупроводникового типа, находящегося в постоянном электрическом поле, и выявлен эффект абсолютной отрицательной проводимости.

Особый интерес вызывают структуры с контролируемыми примесями, в которых появляется возможность, задавая параметры примесей (концентрацию, глубину залегания), управлять их характеристиками [7–10]. Транспортные свойства УНТ существенно различаются в зависимости от структуры и условий синтеза (наличия примесей и дефектов), поэтому экспериментальные значения данных свойств варьируются в больших пределах. Развитие нанотехнологий открывает возможность создания УНТ с определенными примесями, вплоть до “чистых” образцов [11].

В этой связи представляется актуальным исследовать зависимость плотности тока в однослойных УНТ от характеристик приложенных статического и переменного электрических полей с учетом ионизации примесных центров.

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Энергетический спектр носителей заряда в УНТ типа zigzag ($m, 0$) в приближении сильной связи имеет вид [3]

$$\varepsilon(\vec{p}) = \pm \gamma \sqrt{1 + 4 \cos(ap_z) \cos\left(\frac{\pi s}{m}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\pi s}{m}\right)}, \quad (1)$$

где квазиимпульс \vec{p} задается как (p_z, s) , $\gamma \approx 2.7$ эВ, $a = 3b/2\hbar$, $b = 0.142$ нм – расстояние между соседними атомами углерода, $s = 1, 2 \dots m$, разные знаки относятся к зоне проводимости и валентной зоне. Ограничимся случаем полупроводниковых УНТ типа zigzag ($3p - 1, 0$) и ($3p + 1, 0$), где p – натуральное число.

Скорость движения носителей заряда вдоль оси нанотрубки

$$v_z(p_z, s) = \frac{2a \sin(ap_z) \cos\left(\frac{\pi s}{m}\right)}{\sqrt{1 + 4 \cos(ap_z) \cos\left(\frac{\pi s}{m}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\pi s}{m}\right)}}. \quad (2)$$

Приложенные постоянное и переменное электрические поля поляризованы вдоль оси нанотрубки $\vec{E} = (0, 0, E_1 + E_0 \cos \omega t)$ – суммарная напряженность электрического поля, E_1 – модуль напряженности постоянного электрического поля, E_0 и ω – амплитуда и частота переменного электрического поля.

Плотность тока j_z текущего вдоль оси z определяется по формуле

$$j_z = -e \sum_{\vec{p}} v_z(\vec{p}) f(\vec{p}), \quad (3)$$

где e – заряд электрона, $f(\vec{p})$ – неравновесная функция распределения носителей, которая может быть найдена из уравнения Больцмана с модельным интегралом столкновений Батнагара–Гросса–Крука [10].

После разложения скорости носителей в ряд Фурье по p_z , и с учетом найденной неравновесной функции распределения для невырожденного электронного газа, после усреднения по времени

$$C_{sn} = \int_{-\pi}^{\pi} \cos(nap_z) \exp(-\delta \sqrt{1 + 4 \cos ap_z \cos(\pi s/m) + 4 \cos^2(\pi s/m)}) dp_z,$$

$$C = \sum_s \int \exp[-\delta \sqrt{1 + 4 \cos ap_z \cos(\pi s/m) + 4 \cos^2(\pi s/m)}] dp_z.$$

Используемый в данной работе квазиклассический метод расчета плотности тока применялся ранее для описания проводимости в приближении постоянного времени релаксации в идеальных (беспримесных) графеновых структурах [5, 12, 13].

Учет влияния ионизации примесей на проводимость УНТ проведен с использованием кинетического уравнения Больцмана с модельным интегралом столкновений Батнагара–Гросса–Крука при учете темпа генерации и рекомбинации [10]. В

определяем постоянную составляющую плотности тока

$$j_z = j_0 B_{ion} \sum_{s=1}^m \sum_{n=1}^{\infty} A_{sn} C_{sn} \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k^2(n\alpha) \sin \varphi_{kn} \cos \varphi_{kn}, \quad (4)$$

где $j_0 = ean_0\gamma$, n_0 – концентрация электронов в зоне проводимости, $B_{ion} = 1 + \frac{N}{n_0 v_r \text{Im } t_0 + \exp(-2 \text{Im } S)}$,

N – концентрация примесей в УНТ, S – классическое действие, набираемое электроном при подбарьерном движении, t_0 – время начала туннелирования, v – характерная частота релаксации, v_r – частота рекомбинации, $J_n(x)$ – функция Бесселя 1-го рода n -го порядка, $\sin \varphi_{kn} = \frac{v}{\sqrt{v^2 + (n\Omega + k\omega)^2}}$, $\Omega = eE_1a$, $\alpha = eE_0a/\omega$,

$$A_{sn} = \frac{2}{\pi C} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sin z \cos(\pi s/m) \sin nz}{\sqrt{1 + 4 \cos z \cos(\pi s/m) + 4 \cos^2(\pi s/m)}} dz,$$

$$\delta = \gamma/k_B T,$$

случае динамического равновесия концентрация носителей в зоне проводимости в присутствии внешних электрических полей равна $n_0 B_{ion}$ и определяется через вероятность ионизации примесей, рассчитанной с использованием метода мнимого времени [14, 15]. В случае совместного влияния статического и переменного электрических полей, поляризованных вдоль оси нанотрубки, выражение для мнимой части классического действия, которое набирает частица при подбарьерном движении, задается формулой

$$\text{Im } S = \int_0^{\tau_0} \left\{ \gamma \sqrt{1 + 4 \text{ch}(\Omega t + \alpha \text{sh}(\omega t)) \cos x_0 \cos y_0 + 4 \cos^2 y_0} + (v - \Delta) \right\} dt, \quad (5)$$

где v – глубина залегания примеси, Δ – полуширина запрещенной зоны, x_0 и y_0 – безразмерные компоненты квазиимпульса электрона, которые соответствуют минимальной энергии в зоне проводимости, а мнимая часть времени начала туннелирования τ_0 определяется уравнением

$$\Omega \tau_0 + \alpha \text{sh}(\omega \tau_0) = \beta, \quad (6)$$

где $\beta = \text{arch}(\{(\Delta - v)^2 / \gamma^2 - 1 - 4 \cos^2 y_0 \} / \{ 4 \cos x_0 \cos y_0 \})$.

Ионизация приводит к увеличению концентрации носителей заряда в минизоне проводимости и, соответственно, к росту плотности тока.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Анализ формулы (4), ввиду ее сложности, проводился численно. На рис. 1 показана зависимость постоянной составляющей плотности тока от напряженности постоянного электрического поля

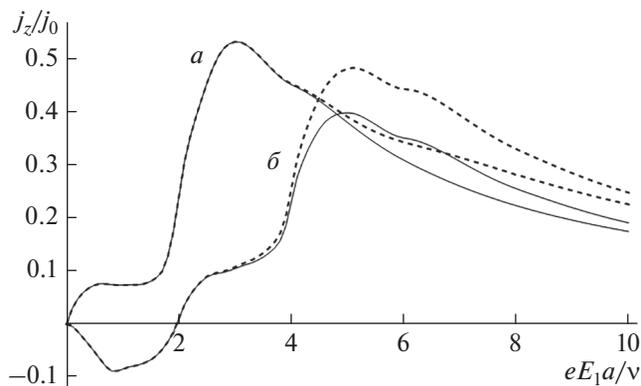


Рис. 1. Зависимости постоянной составляющей плотности тока от напряженности постоянного электрического поля при $\omega/\nu = 2$; $\nu = 0.3\Delta$; $a - aeE_0/\nu = 3$; $б - aeE_0/\nu = 5$.

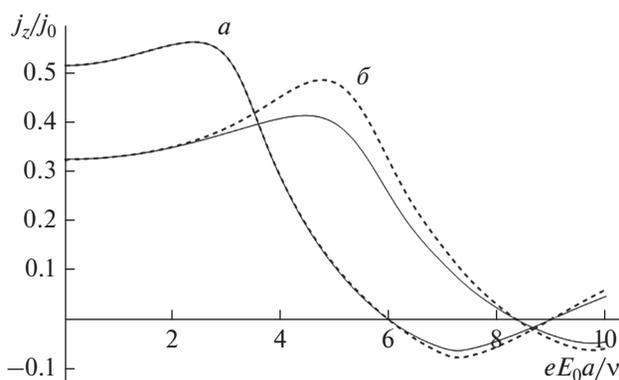


Рис. 2. Зависимости постоянной составляющей плотности тока от амплитуды переменного электрического поля при $\omega/\nu = 2$; $\nu = 0.3\Delta$; $a - aeE_1/\nu = 3$; $б - aeE_1/\nu = 5$.

при фиксированных значениях частоты и амплитуды переменного электрического поля. Зависимость плотности тока от напряженности электрического поля имеет максимум, определяемый характерной частотой релаксации, участки с отрицательной дифференциальной и абсолютной отрицательной проводимостью [5, 16]. Сплошной линией представлен график, соответствующий “чистым” УНТ, пунктирной – с учетом ионизации примеси. Отклонение графика постоянной составляющей плотности тока для примесных УНТ от аналогичного графика для идеальных беспримесных начинается с некоторого значения напряженности постоянного электрического поля, когда возникает существенное увеличение концентрации носителей за счет ионизации примесных центров.

Зависимость постоянной составляющей плотности тока от амплитуды переменного электрического поля при его фиксированных значениях частоты и напряженности постоянного поля

представлена на рис. 2. Зависимость имеет осциллирующий характер, на графиках также видны участки с отрицательной дифференциальной и абсолютной отрицательной проводимостью. Начиная с некоторого значения амплитуды напряженности переменного электрического поля, которое определяется напряженностью постоянного поля, частотой переменного поля, параметрами УНТ и примеси, происходит увеличение постоянной составляющей плотности тока в примесных по сравнению с “чистыми” УНТ.

На рис. 3 представлена зависимость постоянной составляющей плотности тока от напряженности постоянного электрического поля при заданной частоте, амплитуде переменного электрического поля и разных значениях глубины залегания примесей. Начало роста тока и длительность процесса установления насыщения ионизации определяются глубиной залегания примеси и ее концентрацией. Подбор примеси заданной глубины приво-

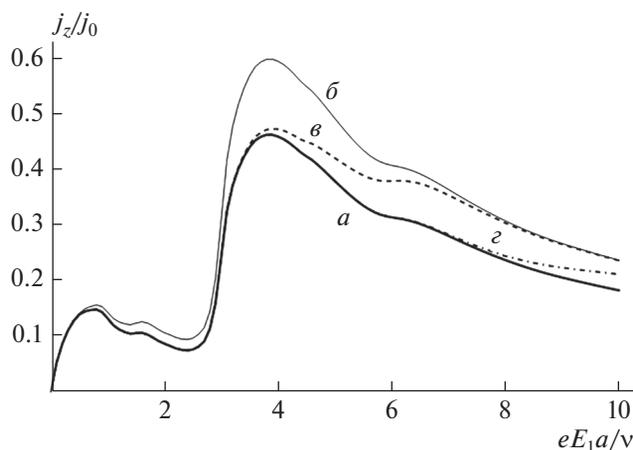


Рис. 3. Зависимости постоянной составляющей плотности тока от напряженности постоянного электрического поля при $\omega/\nu = 3$; $aeE_0/\nu = 4$; *a* – без примесей; *б* – $\nu = 0.2\Delta$; *в* – $\nu = 0.3\Delta$; *з* – $\nu = 0.4\Delta$.

дит к возможности задания нужных проводящих свойств УНТ.

На основе результатов данного исследования возможно создание аппаратно-программного комплекса, анализирующего экспериментальные значения тока в зависимости от параметров электрических полей, предназначенного для определения глубины залегания и концентрации примеси.

При решении задачи, пренебрегалось межзонными переходами, что соответствует выполнению условия $\hbar\omega \ll 2\Delta$ ($\omega \ll 10^{15} \text{ c}^{-1}$), и тепловыми забросами электронов с примеси в подзоны – $k_B T \ll \nu$ ($T \ll 2 \cdot 10^3 \text{ K}$).

Сделаем численные оценки параметров, используемых при построении графиков на рис. 1–3: значения безразмерных напряженностей E при $aeE/\nu = 1$ составляет 10^4 В/см , время релаксации $\tau = \nu^{-1} = 3 \cdot 10^{-12} \text{ с}$ [3], температура 100 K . Представленные результаты приведены для УНТ типа zigzag (14,0), для которой $\Delta \approx 1.32\gamma$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получено аналитическое выражение для нахождения плотности тока в однослойных УНТ в условиях воздействия статического и переменного электрических полей, поляризованных вдоль оси нанотрубки с учетом ионизации примесных центров. Наличие примесей приводит к возможности роста плотности тока за счет увеличения концентрации носителей заряда в минизоне проводимости вследствие ионизации примесных центров. Начало интенсивного роста тока и длительность процесса установления насыщения ионизации определяются параметрами примеси: глубиной залегания и концентрацией. Найденные зависимости плотно-

сти тока от параметров электрических полей могут быть использованы как в детекторах электромагнитного излучения, так и для уточнения глубины залегания примесных центров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ebbesen T.W., Lezec H.J., Hiura H. et al.* // Nature. 1996. V. 382. P. 54.
2. *Елецкий А.В.* // УФН. 1997. Т. 167. № 9. С. 945; *Елетский А.В.* // Phys. Usp. 1997. V. 40. P. 899.
3. *Максименко С.А., Слепян Г.Я.* // Радиотехн. и электрон. 2002. Т. 47. № 3. С. 261; *Maksimenko S.A., Slepian G.Ya.* // J. Commun. Technol. Electron. 2002. V. 47. No. 3. P. 235.
4. *Елецкий А.В.* // УФН. 2009. Т. 179. № 3. С. 225; *Елетский А.В.* // Phys. Usp. 2009. V. 52. P. 209.
5. *Белоненко М.Б., Глазов С.Ю., Мещерякова Н.Е.* // ФТП. 2010. Т. 44. № 9. С. 1248; *Belonenko M.B., Glazov S.Yu., Meshcheryakova N.E.* // Semiconductors. 2010. V. 44. No. 9. С. 1211.
6. *Белоненко М.Б., Глазов С.Ю., Мещерякова Н.Е.* // Опт. и спектроск. 2010. Т. 108. № 5. С. 818; *Belonenko M.B., Glazov S.Yu., Meshcheryakova N.E.* // Opt. Spectrosc. 2010. V. 108. No. 5. P. 774.
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.* // Semiconductors. 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., Syrodoev G.A.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 1. P. 29.
11. *Zhukova E.A., Urvanov S.A., Karaeva A.R. et al.* // Mater. Today. Proc. 2018. V. 5. No. 12. Art. No. 25948.
12. *Бадикова П.В., Глазов С.Ю.* // Учен. зап. физ. фак. МГУ. 2015. № 4. С. 154314.
13. *Глазов С.Ю.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2019. Т. 83. № 1. С. 19; *Glazov S.Yu.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2019. V. 83. No. 1. P. 12.
14. *Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1989.
15. *Попов В.С., Карнаков Б.М., Мур В.Д.* // ЖЭТФ. 1998. № 113. V. 5. С. 1579; *Ропов V.S., Karnakov B.M., Mur V.D.* // J. Exp. Theor. Phys. 1998. V. 86. No. 5. P. 860.
16. *Басс Ф.Г., Булгаков А.А., Тетервов А.П.* Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками. М.: Наука, 1989.

Conductivity of single-layer carbon nanotubes of the semiconductor type, considering the ionization of impurity centers

S. Yu. Glazov^{a, b, *}, N. E. Mescheryakova^b, I. A. Podgornaya^{a, b}

^a *Volgograd State Socio-Pedagogical University, Volgograd, 400005 Russia*

^b *Volgograd State Medical University, Volgograd, 400005 Russia*

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

The dependence of the current density in a single-layer carbon nanotube of the semiconductor type on the characteristics of the applied static and alternating electric fields, considering the ionization of impurity centers, is studied. To calculate the current, the solution of the Boltzmann kinetic equation with the Batnagar-Gross-Crook model collision integral is used, considering the rate of generation and recombination.