

形变碳纳米管场效应晶体管的电学性质*

刘 红† 印海建 夏树宁

(南京师范大学物理科学与技术学院,南京 210046)

(2008 年 7 月 16 日收到,2009 年 4 月 10 日收到修改稿)

在紧束缚理论的基础上,推导出轴向拉伸和扭转形变时碳纳米管(CNT)的能带公式.结果显示拉伸和扭转形变都可以改变 CNT 的导电性质,在金属型和半导体型之间转变.特别是对于锯齿型 CNT,根据 n 与 3 的余数关系,在拉伸和扭转中分别显示出三种不同的变化规律.进一步应用场效应晶体管 Natori 理论模拟计算形变对 CNT 场效应晶体管的电流-电压特性的影响.锯齿型 CNT 根据 n 与 3 的余数关系表现出不同的电流变化趋势,而对于扶手椅型 CNT 轴向拉伸不改变电流,在扭转形变时,CNT 电流急剧升高.特别是扶手椅型 CNT,锯齿型 CNT 和扶手椅型 CNT 的电流随扭转角度和外电压行为明显不同.在某些特定的扭转角度,电流随扭转角度变化非常显著,显示出锯齿型 CNT 和扶手椅型 CNT 发生半导体型与金属型之间的转变.

关键词:碳纳米管,紧束缚理论,费米能级,能带结构

PACC:6148,7125X,7155,7360T

1. 引 言

碳纳米管(CNT)是由石墨层卷曲无缝衔接而成的中空纳米管.自从 1991 年 CNT 被发现以来^[1],CNT 因为它独特的物理化学特性,在微观物理和纳米技术领域引起了巨大的兴趣.CNT 在实验中通常由一个固基支持,这必然会引起诸多力学形变,其中弯曲形变的理论和实验研究报道形变引起电子结构的改变^[2,3],拉伸和扭转都会使 CNT 发生金属-半导体相变^[4],文献[5,6]报道了形变对 CNT Raman 光谱和线性光学响应的影响,但是他们没有给出准确的能带关系式,特别是扭转情况下的能带结构.本文详细推导出扭转形变 CNT 的能带公式,发现扭转形变导致 CNT 结构对称性降低,原简并能级消失,可发生半导体型与金属型转变.在本文中我们也希望能通过模拟电流反映出这些特点和转变.

CNT 作为纳米元器件的候选者,首先要做的第一个元器件就是场效应晶体管,而目前形变对 CNT 场效应晶体管电导的研究还未见报道.因此,本文根据固体能带理论,运用紧束缚相互作用详细准确地推出形变 CNT 能带公式,并应用 Natori 电子电导理论^[7]研究考虑形变 CNT 场效应晶体管的 $I-V$ 特性.

2. 能带理论和公式推导

令石墨中 C—C 键长为 a_0 .石墨结构如图 1 所示.CNT(n, m)是在石墨层上以矢量 $R = na_1 + ma_2$ (a_1, a_2 为石墨基矢, $|a_1| = |a_2| = a = \sqrt{3}a_0$) 首尾相重合卷曲而成,圆周长即为 R 的长度 $c_h a = a \sqrt{n^2 + m^2 + nm}$,CNT 半径为 $r = |R| / (2\pi) = c_h a / (2\pi)$.垂直 R 的方向为管轴方向, R 与 a_1 方向的夹角 θ 叫螺旋角. $\theta = 0^\circ, 30^\circ$ 的 CNT 分别称之为锯齿型管、扶手椅型管.

在固定 $x-y$ 坐标系下,如图 1 所示,石墨原胞基矢

$$a_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} i + \frac{1}{2} j \right),$$

$$a_2 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} i - \frac{1}{2} j \right).$$

但是在为(n, m)管切割石墨片时,产生一个新的基矢(e_c, e_T), e_c 是沿管径方向的单位向量, e_T 是沿管轴方向的单位向量.CNT 沿管轴方向具有平移对称性,周期长度

$$L_T = \frac{\sqrt{3}ac_h}{\text{gcd}(2n + m, n + 2m)},$$

* 江苏省自然科学基金(批准号: BK2008427)和高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 200803190004)资助的课题.

† E-mail: liuhong3@njnu.edu.cn

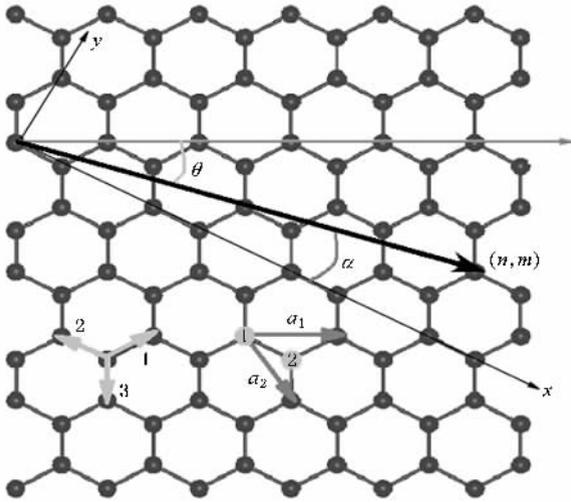


图1 CNT结构

其中 $\text{gcd}(2n+m, n+2m)$ 表示 $(2n+m)$ 和 $(n+$

$2m)$ 的最大公约数. CNT 在 L_T 长度内石墨原胞数

$$N_h = \frac{2c_h^2}{\text{gcd}(2n+m, n+2m)}.$$

在新基矢 (e_c, e_T) 基础上, 发生拉伸和扭转形变时, 原胞基矢改变为

$$\begin{aligned} a_1 &= [(2n+m)(1+e_c) + \sqrt{3}m \tan \gamma] \\ &\times \frac{a}{2c_h} e_c + \sqrt{3}m(1+e_T) \frac{a}{2c_h} e_T, \\ a_2 &= [(n+2m)(1+e_c) - \sqrt{3}n \tan \gamma] \\ &\times \frac{a}{2c_h} e_c - \sqrt{3}n(1+e_T) \frac{a}{2c_h} e_T. \end{aligned} \quad (1)$$

键长改变引起跃迁系数改变^[8] $t_{ij} = t_0 \left(\frac{d_0}{r_{ij}} \right)^2$, 其中 d_0 是没有形变时的键长, 根据形变参数, C 原子与三个最近邻之间的跃迁系数分别为

$$\begin{aligned} t_1 &= t_0 \frac{4c_h^2}{[-\sqrt{3}n(1+e_c) - (n+2m) \tan(\gamma)]^2 + (n+2m)^2(1+e_T)^2}, \\ t_2 &= t_0 \frac{4c_h^2}{[\sqrt{3}(n+m)(1+e_c) - (n-m) \tan(\gamma)]^2 + (n-m)^2(1+e_T)^2}, \\ t_3 &= t_0 \frac{4c_h^2}{[-\sqrt{3}m(1+e_c) + (2n+m) \tan(\gamma)]^2 + (2n+m)^2(1+e_T)^2}. \end{aligned} \quad (2)$$

其中 e_l 是描述拉伸形变的相对形变参数, 等于拉伸长度减去原长度的差值与原长度之比, e_c 是泊松比, $e_c = -0.2e_l^{[4]}$, γ 是扭转角度.

CNT 表面每个 C 原子与周围三个近邻的 C 原子之间形成 sp^2 杂化轨道, 非局域的 π 电子轨道垂直表面, 采用紧束缚近似哈密顿量

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} (t_{ij} c_i^+ c_j + t_{ij}^* c_j^+ c_i), \quad (3)$$

其中 c_i^+ 表示在格点 i 产生一个 π 电子, c_j 表示在格点 j 湮没一个 π 电子, 求和仅对近邻 C 原子求和, t_{ij} 表示由格点 j 到格点 i 的跃迁系数, 本文中取 $t_{ij} = -2.7 \text{ eV}^{[2]}$. 采用紧束缚近似下能带理论^[9] 推导出 CNT 的能带公式为

$$E_k = \pm \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + t_3^2 + 2t_1 t_2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + 2t_2 t_3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + 2t_1 t_3 \cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))}. \quad (4)$$

若只有拉伸形变, 即 $\tan \gamma = 0$, 由于拉伸 CNT 周期长度

$$L_T = \frac{\sqrt{3} a c_h (1+e_l)}{\text{gcd}(2n+m, n+2m)},$$

圆周长

$$c_h a (1+e_c) = a \sqrt{n^2 + m^2 + nm(1+e_c)},$$

将(1)式代入(4)式, CNT 能带的表达式为

$$E_{\pm}(l, k_T) = \pm \left\{ t_1^2 + t_2^2 + t_3^2 + 2t_1 t_2 \cos \left[\frac{\pi l}{c_h} (2n+m) \right] \right. \\ \left. + \frac{2\pi k_T}{N_h} m \right\} + 2t_2 t_3 \cos \left[\frac{\pi l}{c_h} (n+2m) - \frac{2\pi k_T}{N_h} n \right] \\ + 2t_1 t_3 \cos \left[\frac{\pi l}{c_h} (n-m) + \frac{2\pi k_T}{N_h} (n+m) \right] \}^{1/2} \quad (5)$$

其中 $k_T \in [-1/2, 1/2]$, $l = 0, 1, 2, \dots, N_h - 1$. 此能带公式与董锦明等^[6] 所得结果一致.

若只有扭转形变, 即 $e_c = e_l = 0$, 由于扭转导致管轴方向周期长度增大为 $L_T = \frac{\sqrt{3} a}{2c_h} N_h$. 我们经

过仔细推导得到 CNT 能带的表达式

$$\begin{aligned}
 E(l, k_T) = & \pm \left\{ t_1^2 + t_2^2 + t_3^2 + 2t_1 t_2 \cos \right. \\
 & \times \left[\frac{\pi l}{c_h} (2n + m + \sqrt{3} m \tan \gamma) + \frac{2\pi k_T}{N_h} m \right] \\
 & + 2t_2 t_3 \cos \left[\frac{\pi l}{c_h} (n + 2m - \sqrt{3} n \tan \gamma) \right. \\
 & \left. - \frac{2\pi k_T}{N_h} n \right] + 2t_1 t_3 \cos \\
 & \times \left[\frac{\pi l}{c_h} (n - m + \sqrt{3} (n + m) \tan \gamma) \right. \\
 & \left. + \frac{2\pi k_T}{N_h} (n + m) \right] \left. \right\}^{1/2} \quad (6)
 \end{aligned}$$

考虑到最大键长为 0.172 nm, 因此本文计算中扭转角度小于 20°。N_h 急剧增加将导致在计算电流电压特征时对计算机内存容量需求剧增。在本文中, 我们仅计算锯齿型管和扶手椅型管的电流电压特征。对于 n = 17, 18 和 19 的锯齿型管和扶手椅型管, 我们考虑几个特定的角度 γ, 使得

$$\tan \gamma = \frac{j}{2\sqrt{3} \gcd(m, n)} \quad (j = 1, 2, 3, \dots, 24)$$

这样不仅能有足够的计算机内存进行计算, 而且有足够的扭转角度对能隙变化进行分析。CNT 周期长度 L_T 中的石墨原胞数 N_h 与扭转角度之间的关系可由下列公式得到。对于 (n, ρ) 管,

$$N_h = 4n^2 / \gcd(4n, 2n - j), \quad (7a)$$

对于 (n, n) 管,

$$N_h = 12n^2 / \gcd(6n + j, 6n - j). \quad (7b)$$

对于锯齿型管和扶手椅型管, n 的取值有以下三种情形: n = 3s 为 3 的倍数, n = 3s + 1 和 n = 3s - 1。对于锯齿型管, 我们以 (17, ρ), (18, 0) 和 (19, ρ) 为例, 扶手椅型管我们以 (17, 17), (18, 18) 和 (19, 19) 为例。

拉伸形变虽然不改变原 CNT 的轴向对称性, 但也会引起电子结构很大的改变, 特别是带隙增加和减小的幅度可达 0.8 eV。如图 2(a) 所示, 在 e_t = 0.07 时 (17, 0) CNT 能带结构中, 能级简并情况与没有形变时一样, 但能隙降为零, CNT 从原来的半导体型转变为金属型。图 2(b) 显示了锯齿型 CNT 能隙随形变参数的渐变过程。

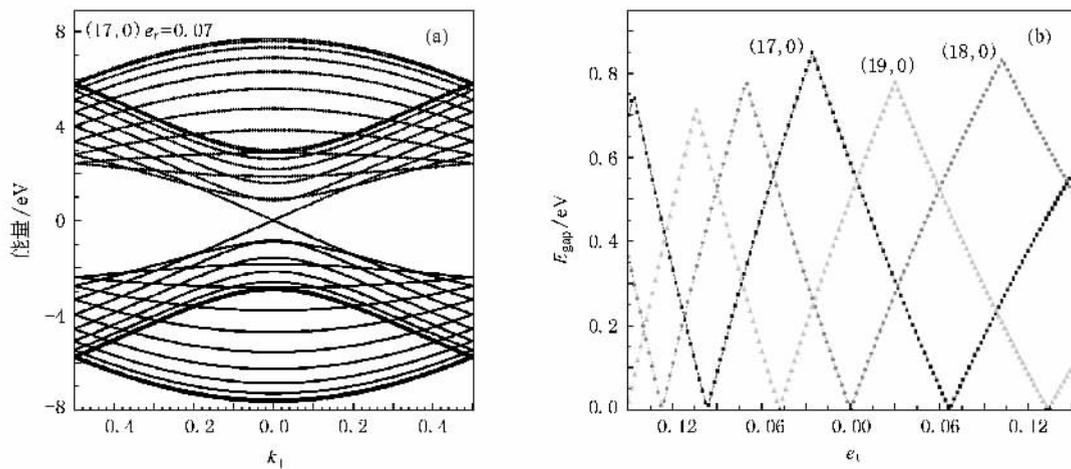


图 2 CNT 能带结构随形变参数的变化 (a) (17, 0) 在拉伸形变 e_t = 0.07 时的能带结构 (b) (n, ρ) 管带隙随拉伸形变的变化 (n = 17, 18, 19)

从图 2(b) 可以看出, 锯齿型管在拉伸形变时, 三种不同 n 值对应的 CNT 的能隙变化曲线形状基本相同, 即随拉伸参数成比例地上升或下降, 且变化斜率一致。这说明电子结构变化规律基本相同, 都会随拉伸经历由半导体到金属型(或金属到半导体)转变, 只是能隙峰的位置和高度与 n 的取值有关。对于 n = 3s, 拉伸和压缩都可以增加带隙 (18, 0) 在

e_t = 0.1025 时带隙可达到 0.83 eV。对于 n = 3s - 1, 压缩能迅速增加带隙 (17, 0) 在 e_t = -0.025 时带隙达到 0.84 eV。对于 n = 3s + 1, 拉伸能迅速增加带隙 (19, 0) 在 e_t = 0.03 时带隙达到 0.78 eV, 如表 1 所列。在拉伸形变中, 对于锯齿型管, n = 3s + 1 时可通过最小的压缩形变变为金属型, n = 3s - 1 时管可通过最小的拉伸形变变为金属型, n = 3s 时, 往压缩

形变方向能最快转变为半导体型. 对于扶手椅型 CNT(n, n), 能隙随拉伸量的变化对任何 n 值都是一样的, 变化复杂且没有一定的规律; 另一个显著特点是形变产生的能隙值很小, 比锯齿型管及扭转形变产生的能隙要小一个数量级. 可近似认为拉伸不改变扶手椅型管的能带结构, 因此本文中并没有考虑扶手椅型管的拉伸形变.

表 1 锯齿型 CNT 拉伸形变时禁带宽度的极大值和极小值与对应拉伸参数

(17, 0)		(18, 0)		(19, 0)	
e_1	带隙/eV	e_1	带隙/eV	e_1	带隙/eV
-0.1475	0.74	-0.1275	0.00	-0.1050	0.70
-0.0975	0.01	-0.0700	0.77	-0.0475	0.01
-0.0250	0.84	0.0000	0.00	0.0000	0.51
0.0000	0.59	0.1025	0.83	0.0300	0.78
0.0675	0.01			0.1325	0.00

表 2 CNT 扭转形变时扭转角度与对应禁带宽度的极大值和极小值

(17, 0)		(18, 0)		(19, 0)		(17, 17)		(18, 18)		(19, 19)	
$\gamma(^{\circ})$	带隙/eV										
0.0	0.59	0.0	0.00	0.0	0.51	0.0	0.02	0.0	0.02	0.0	0.02
11.52	0.02	13.52	0.73	7.78	0.76	3.89	0.44	3.67	0.42	3.48	0.40
17.00	0.74	17.78	0.05	14.48	0.04	6.78	0.03	6.41	0.03	6.07	0.03
20.48	0.04	21.05	0.51	18.48	0.59	10.58	0.44	10.00	0.42	9.49	0.40
						14.29	0.05	13.53	0.05	12.84	0.05
						17.00	0.40	16.10	0.38	15.30	0.37
						20.48	0.01	19.43	0.01	18.48	0.00

扭转形变将导致 CNT 对称性降低, 特别是原先相对于管轴的对称性被打破, 原来的能带简并消失, 如图 3(a) 和 (c) 所示. 在图 3(a) 中 (17, 0) 在 $\gamma = 11.52^{\circ}$ 时, 扭转形变导致允许的波矢 k_T 线恰好穿过 Brillouin 区的 K 或 K' 点, 能隙为零. 在图 3(c) 中, (17, 17) 在 $\gamma = 3.89^{\circ}$ 时, 能带结构能隙为 0.44 eV, 成为半导体型能带结构. 对于锯齿型管, 根据 n 与 3 的倍数和余数关系, 有三种不同的变化曲线, 变化规律相差很大, 示于图 3(b) 中. 对于 $n = 3s$, 如 (18, 0) (21, 0) 和 (24, 0) 扭转引起能隙改变明显, 随着扭转角增加能隙也增加, 在扭转角为 13° 附近达到最大禁带宽度, 由金属特征变为显著的半导体型. 对 (18, 0) 管能隙增加达到 0.74 eV, 这种转变将在场效应 CNT 的电流与扭转形变关系中表现为明显的开关特征, 当扭转角继续增加 (18, 0) CNT 能隙又开始减小, 在 17.78° 左右又降到最低 (0.05 eV). 对于 $n = 3s - 1$, 如 (17, 0) 和 (20, 0) 随扭转角增加能隙都逐渐减小, 有相似的变化规律. (17, 0) 在 11.52° 时转变为金属型, 随后又随扭转角增加禁带宽度增加, 逐步变为半导体型, 能隙在 17° 附近达到 0.74 eV, 比无扭转形变时禁带宽度 0.59 eV 大 0.15

eV. 对于 $n = 3s + 1$, 如 (19, 0) 和 (22, 0) 管, 能隙先随扭转角小幅增加而缓慢增加 (19, 0) 在 7.79° 附近增加到 0.76 eV, 随后随扭转角增加减小, 在 14.48° 附近能隙降到最小约 0.04 eV, 在 18.5° 又增加到 0.59 eV. 由图 3(b) 和表 2 可知, 当扭转角度较小时, 半导体型与金属型转变对应扭转角范围约 6° ; 在扭转角度较大时, 半导体型与金属型转变对应的扭转角范围约为 3° .

从图 3(d) 可以看出, 扶手椅型 CNT 发生扭转形变时, n 取不同的值能隙随扭转角的变化规律基本相同, 随扭转角增大显示出能隙的振荡变化, 且对于不同的 n 值能隙的峰和谷的位置以及峰的高度大致相近, 曲线整体有些很小的移位. 在扭转角为 4° 附近有较大能隙, 对于 (17, 17) 在 $\gamma = 3.89^{\circ}$ 时可达 0.44 eV. 三个 CNT 的能隙随扭转角继续增加而减小, 在 6.78° 附近达到最小值 (约 0.03 eV), 随扭转角的继续增加, 在 17° 附近能隙增加至 0.40 eV, 并在 20° 附近三个管的能隙都趋近于零. 这个结果说明对于扶手椅型管, 金属型与半导体型转变对应扭转角范围约为 3° .

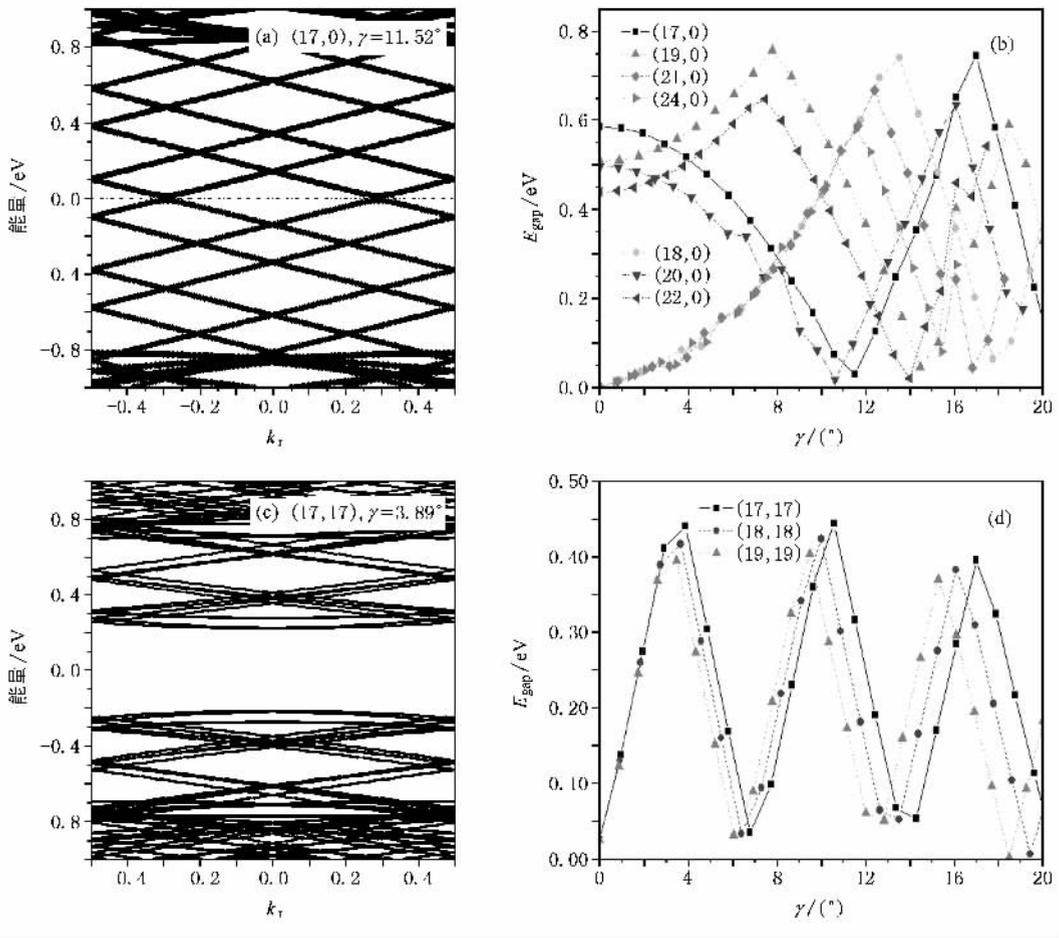


图3 CNT能带结构随形变参数的变化 (a)(17,0)在扭转变形 $\gamma = 11.52^\circ$ 时的能带结构 (b)(n,0)管带隙随扭转变形的变化 ($n = 17, 18, 19$) (c)(17,17)在扭转变形 $\gamma = 3.89^\circ$ 时的能带结构 (d)(n,n)管带隙随扭转变形的变化 ($n = 17, 18, 19$)

3. Natori 电导理论及计算结果

Tans 小组^[10]证实单壁 CNT 中电子的局域化长度可以达到微米以上, Bockrath 小组^[11]证实单壁纳米管是好的量子导线. 在 CNT 长度小于平均自由程时, 电子通道是近似弹道, 所以通道中的电流保持近似恒定. 图 4 所示为一维 CNT 场效应管中电子流动通道, 描绘了源极和漏极的势能分布情况. 采用 Natori 理论, 电流可表达为大量一维电子流通道构成的和^[7]表达式如下:

$$I = q \sum_i \int_{E_{\text{imin}}}^{E_{\text{imax}}} \{v_{\text{sl}} D_{\text{sl}}(E) f(\mu_{\text{FS}}, E) [1 - f(\mu_{\text{FD}}, E)]\} \times \mathcal{T}(E) dE - q \sum_i \int_{E_{\text{imin}}}^{E_{\text{imax}}} \{v_{\text{ls}} D_{\text{ls}}(E) f(\mu_{\text{FD}}, E) \times [1 - f(\mu_{\text{FS}}, E)]\} \mathcal{T}(E) dE, \quad (8)$$

其中 v_{ls} 和 $D_{\text{ls}}(E)$ 分别表示由源极向漏极的电荷速

度和态密度, 而 v_{sl} 和 $D_{\text{sl}}(E)$ 则表示由漏极向源极的电荷速度和态密度.

(8)式具有的普遍意义, 可以适用一维子带系统. 由于近似弹道的通道性质, 这里透射概率 $\mathcal{T}(E) = 1$. 一维情形下, v_{sl} 和 $D_{\text{sl}}(E)$ 的乘积是一个常数 $1/(\pi \hbar)$, $E_{\text{imin}}, E_{\text{imax}}$ 为不同波矢量方向子带 i 的极值, μ_{FS} 和 μ_{FD} 是源极和漏极的化学势. 于是(8)式就可以简写为

$$I = \frac{q}{\pi \hbar} \sum_i \int_{E_{\text{imin}}}^{E_{\text{imax}}} \{f(\mu_{\text{FS}}, E) [1 - f(\mu_{\text{FD}}, E)]\} dE - \frac{q}{\pi \hbar} \sum_i \int_{E_{\text{imin}}}^{E_{\text{imax}}} \{f(\mu_{\text{FD}}, E) [1 - f(\mu_{\text{FS}}, E)]\} dE. \quad (9)$$

计算时只有源极的费米水平 μ_{FS} 是未知的, 需要用自洽的方法来确定. 在下面的计算中, 我们用 μ 来代替 μ_{FS} , 且令 $\mu_{\text{FD}} = \mu - qV_D$, 而门电压 V_G 来自以

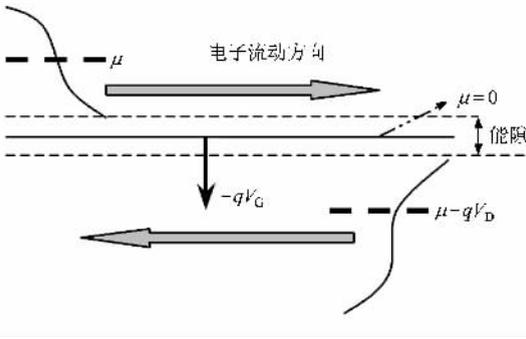


图 4 电子流动通道示意图

下两个方面：一是穿过门介质的电势差，另外就是源极和漏极的化学势变化，即

$$V_G - V_{FB} = \frac{\mu - \mu_0}{q} + \frac{|Q|}{C_i}, \quad (10)$$

其中 V_{FB} 是依赖于功函数的差值。当门极和漏极没有施加电压时，即 $\mu = \mu_0 = 0$ 时， μ_0 的位置与能隙的中心相近，在这里我们设定 $V_{FB} = 0$ 。因此有

$$C_i [(V_G - V_{FB}) - (\mu - \mu_0)/q] = 2q \sum_i \left[\int_{E_{i-}^+}^{E_{i+}^-} D_{i+}(E) (\mu, E) dE \right]$$

$$+ \int_{E_{i-}^+}^{E_{i+}^-} D_{i-}(E) (\mu - qV_D, E) dE]. \quad (11)$$

这里电容可以看作是由一个平面和一个圆柱组成，

$$C_i = \frac{2\pi\epsilon}{\ln \frac{\sqrt{t+d} + \sqrt{t}}{\sqrt{t+d} - \sqrt{t}}}, \quad (12)$$

其中 d 为 CNT 的直径， t 是 CNT 与基底间的距离，取为 2 nm，介电常数 $\epsilon = 40\epsilon_0$ 。由(11)式自洽求出 μ 值，然后代入(9)式，计算电流 I 。没有拉伸时，对于扶手椅型 CNT(n, n)和锯齿型 CNT($n, 0$)，门电压 V_G 一定，电流 I 随着漏电压 V_D 的增加而升高，最后趋于水平。漏电压 V_D 一定，电流 I 随着门电压 V_G 的增加而升高。在相同 V_G 和 V_D 下， n 值越大电流也越大。这是因为随着 n 增大即半径的增大，参与导电的子能带数目增加，参与导电的电子增多^[12]。

锯齿型 CNT 在拉伸形变下，带隙随拉伸变化使得系统在半导体型与金属型间转变。对于电流，我们从有无饱和电流可以判断半导体型或金属型导电特征。图 5(a)显示，对于(17,0)CNT 在无拉伸形变(e_t

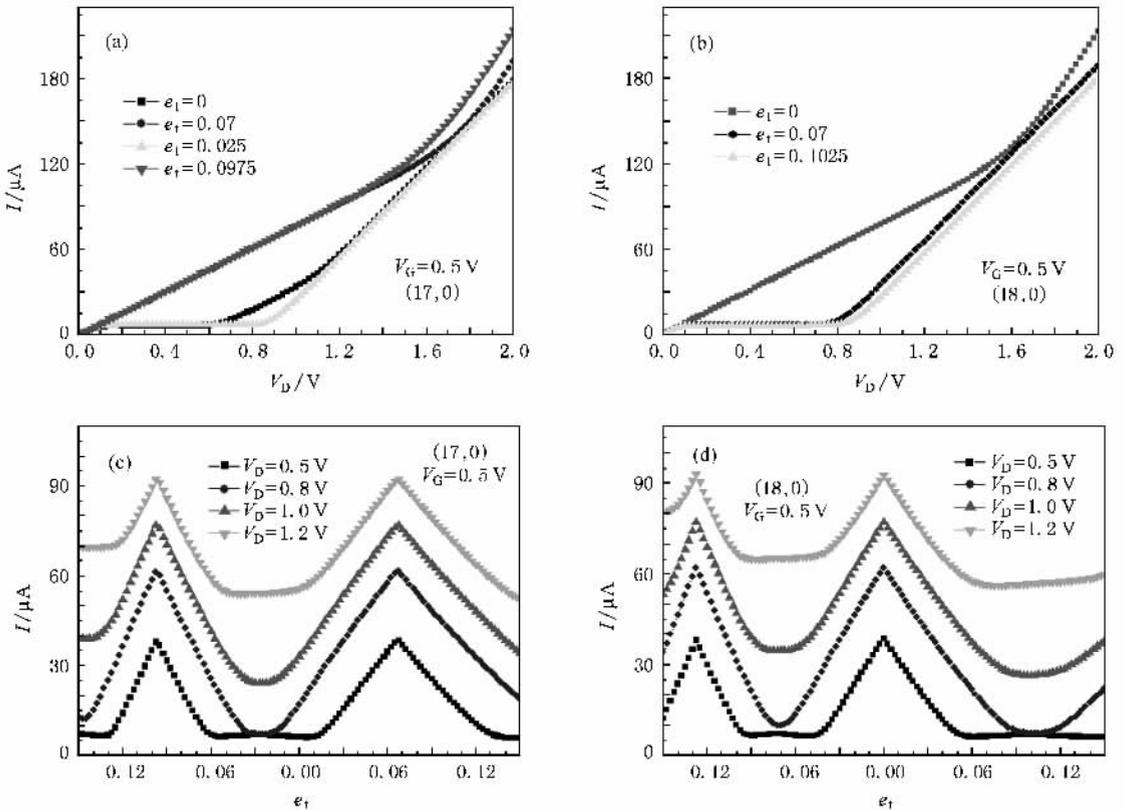


图 5 门电压 $V_G = 0.5$ V 时，CNT(17,0)和(18,0)拉伸形变的电流与电压特征 (a)(b)不同拉伸 e_t 时，电流 I 与 V_D 关系 (c)(d)不同 V_D 值时，电流 I 与 e_t 关系

$= 0$) 时, 禁带宽度为 0.55 eV , 当漏极电压 $V_D < 0.6 \text{ V}$ 时, 表现出一个较小饱和电流, 呈现半导体性质. 从能隙变化和电流特征都可以看到, 当拉伸 CNT 在 $e_t = 0.07$ 和 $e_t = -0.0975$ 时, 没有饱和电流出现, 表现为金属性质; 而在 $e_t = -0.025$ 时, 又表现为半导体性质. 图 5 (b) 显示, 对于 $(18, 0)$ CNT, 根据能隙随拉伸参数的变化, 电流也表现出同样的规律, 在 $e_t = -0.07$ 和 $e_t = 0.1025$ 时, 出现饱和电流, 表现出半导体性质. 图 5 (a) 和 (b) 中电流-电压特征还显示出饱和电流对应的 V_D 宽度大致等于禁带宽度. 图 5 (c) 和 (d) 中显示不同 V_D 值时, 电流随拉伸

参数的变化, 在 $V_D = 0.8 \text{ V}$ 时电流随拉伸变化的幅度可达到 $50 \mu\text{A}$. 与图 2 (b) 比较后可以发现, 在禁带宽度最大时所对应的拉伸参数情况下电流也是最小的. 图 6 (a) 和 (b) 更详细地显示了电流随拉伸参数和漏极电压 V_D 的关系, 显示出 CNT 在不同拉伸变化下电流的逐渐变化行为, 当 V_D 升高时, 拉伸形变对电流的影响逐渐减弱. 图 6 (c) 和 (d) 更清楚地显示了不同锯齿型 CNT 在一些特定拉伸参数 (如 $(17, 0)$ 在 $e_t = 0.07$ 和 $e_t = -0.0975$ ($18, 0$) 在无形变和 $e_t = -0.1275$) 下, 电流较高且不受 V_G 影响, 从而显示出金属特征.

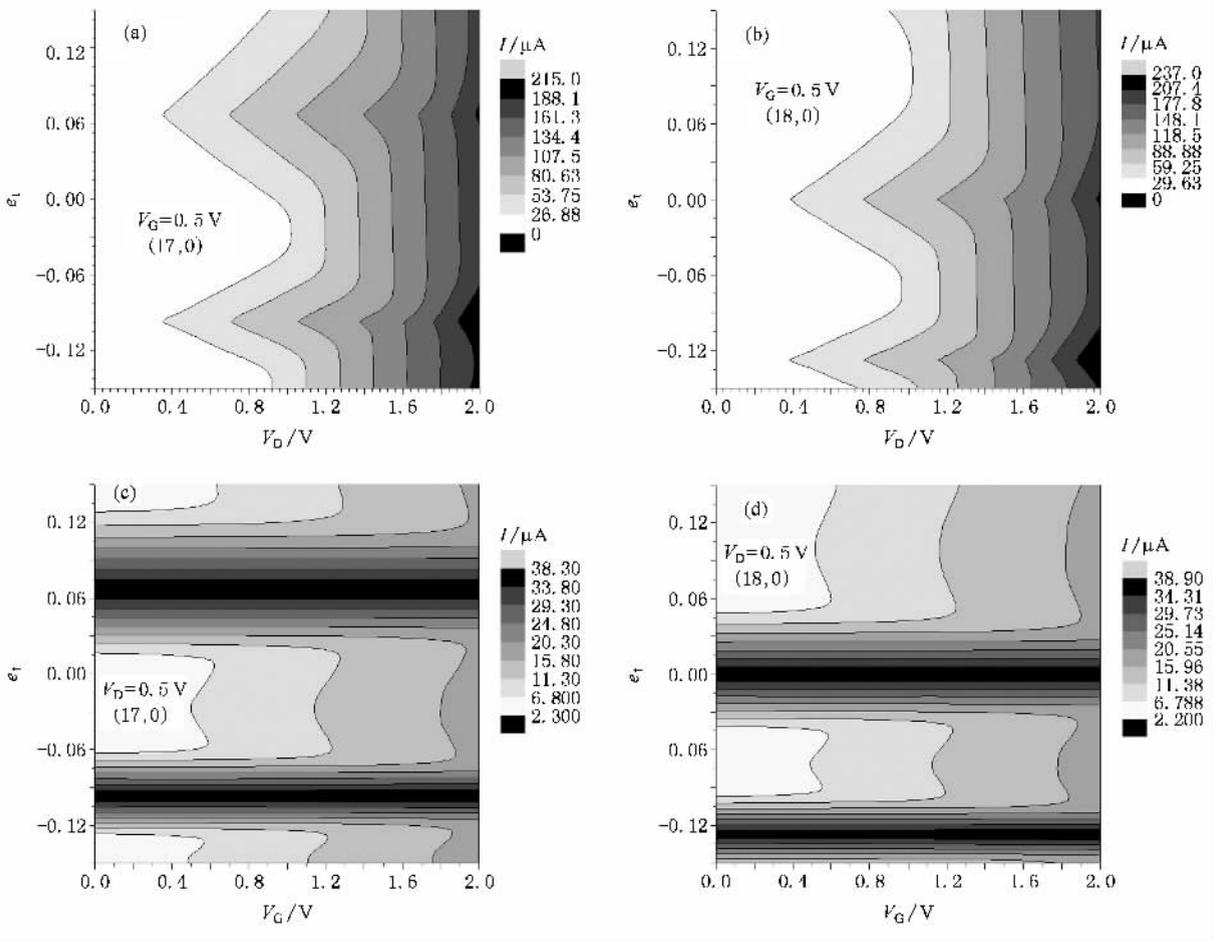


图 6 CNT $(17, 0)$ 和 $(18, 0)$ 拉伸形变的电流 I 等值图显示与拉伸形变 e_t 和电压关系 (a)(b) $V_G = 0.5 \text{ V}$ (c)(d) $V_D = 0.5 \text{ V}$

虽然对于扶手椅型管拉伸对能带结构的影响幅度很小, 且对不同扶手椅型 CNT 能带结构变化完全一样, 但是我们也计算了电流与拉伸参数的关系, 结果示于图 7. 图 7 (a) 和 (b) 显示在 V_D 较小 (如 $V_D < 0.8 \text{ V}$) 时, 电流不受拉伸形变影响. 当 V_D 较大时, 拉伸将使电流稍有减小, 而压缩时电流稍有上升.

锯齿型管在扭转形变下, 带隙随扭转角可发生

半导体-金属转变. 图 8 (a) 显示 $(17, 0)$ 在 $\gamma = 11.52^\circ$ 时, 电流随漏电压 V_D 的增加而增加, 没有出现饱和电流, 表现为金属特征. 在 $V_D = 0.8 \text{ V}$ 时, 电流达到 $102 \mu\text{A}$, 比没有形变时电流高出 $85 \mu\text{A}$. 但当扭转角度继续增加 ($17, 0$) 又逐渐展现出半导体型性质, 在 $\gamma = 17^\circ$, $V_D < 0.8 \text{ V}$ 时, 处于低饱和电流. 图 8 (b) 显示, 对于 $(18, 0)$ CNT 在 $\gamma = 12.56^\circ$ 时出现饱和电流,

表现出半导体性质.图 8(c)和(d)中显示不同 V_D 值时,电流随扭转角变化规律.对于(17,0),随扭转角度增加电流逐渐升高,逐渐变为金属型.而对于(18,0)随扭转角增加在向半导体型转变的过程中不同于(17,0)管,电流在降低过程中出现多次突然升高.在 $V_D = 0.8\text{ V}$ 时(17,0)管电流随扭转角变化的幅度可达到 $90\ \mu\text{A}$.在高 V_D 时,图 8(a)和(b)还显示扭转形变 CNT 电流比无形变 CNT 电流高.如 $V_D =$

2.0 V 时(17,0)电流高出 $200\ \mu\text{A}$ (18,0)电流高出 $245\ \mu\text{A}$,这一点不同于图 5(a)和(b)所示的高 V_D 时,拉伸形变对电流影响较小.这主要是拉伸并没有改变 CNT 的结构对称性,而扭转形变却将 CNT 沿管轴的对称性降低,原筒并能级发生分裂,且子能带数目增加.如图 3(a)和(c)显示的能带结构,参与导电的总电子数剧增,导致电流比没有形变时的电流高.

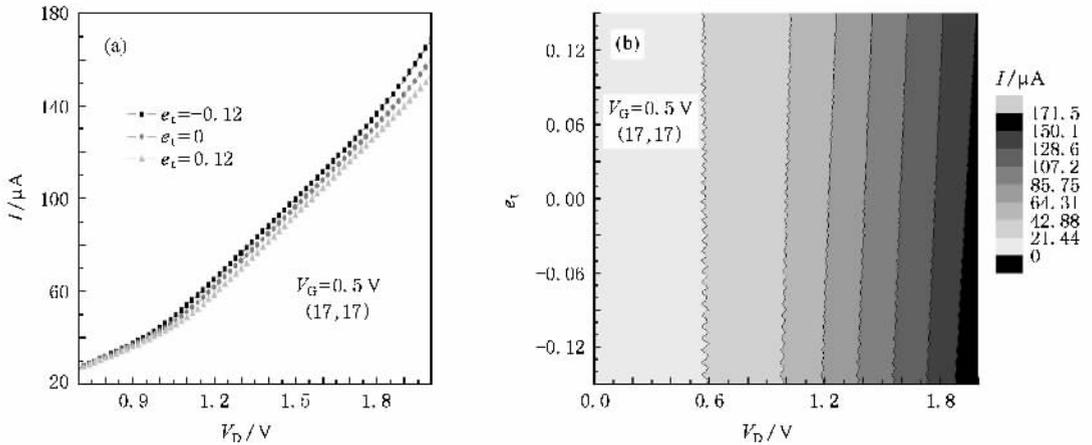


图 7 (n, n)CNT 在 $V_G = 0.5\text{ V}$ 不同拉伸 e_t 时,电流 I 与 V_D 关系及 e_t 和 V_D 电流 I 等值图 (a) I - V 关系 (b) 电流 I 等值图

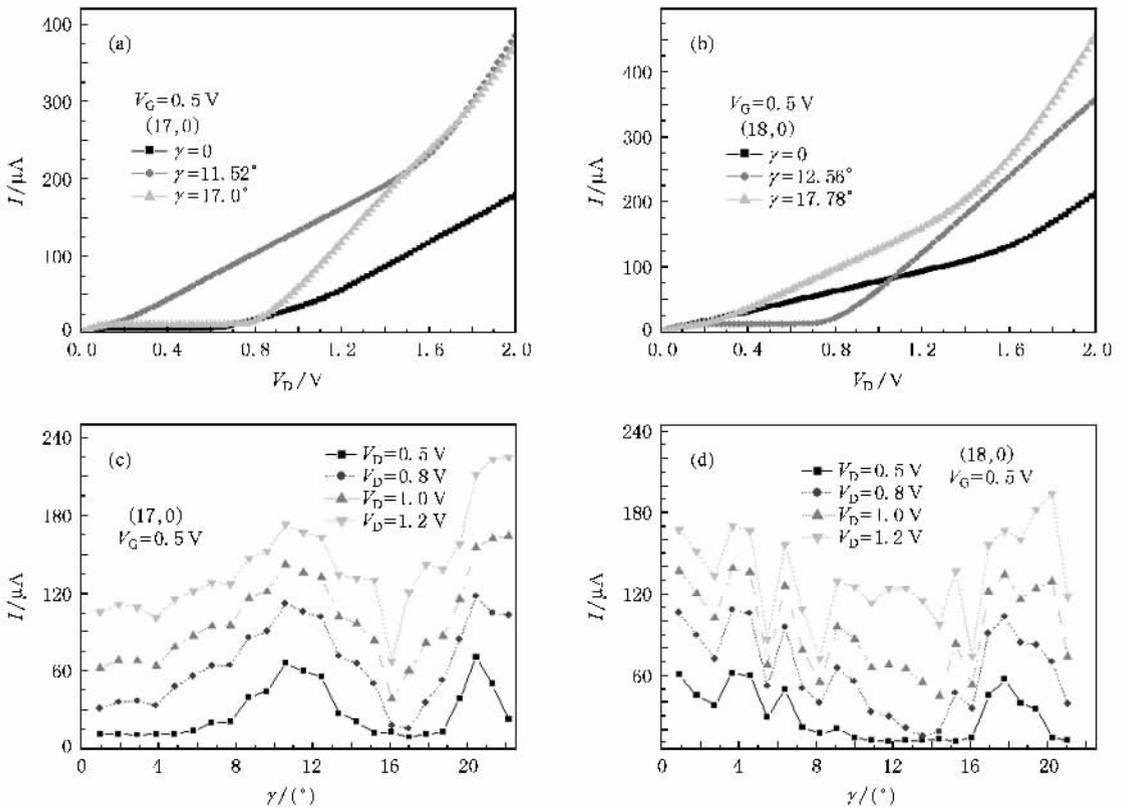


图 8 门电压 $V_G = 0.5\text{ V}$ 时, CNT (17,0) 和 (18,0) 扭转形变的电流与 V_D 特征 (a)(b) 不同扭转角 γ 时, 电流 I 与 V_D 关系 (c)(d) 不同 V_D 值时, 电流 I 与扭转角 γ 关系

图 9(a) 和 (b) 更详细地显示了锯齿型 CNT 在不同扭转形变下电流的逐渐变化行为. 图 9(a) 清楚地显示 (17,0) 在 11° 和 20.5° 附近电流随 V_D 升高较快, 表现金属电导行为, 而在 17° 附近 ($V_D < 1.2\text{ V}$ 区域) 电流上升很慢, 具有饱和电流特征, 表现出明显半导体特征. 图 9(b) 显示出 (18,0) 的电流变化行为更复杂, 在 8° 和 16° 附近, 电流上升很慢, 具有饱和电流特征, 表现出明显的半导体特征, 而在 4°, 6°, 9° 和 17.5° 附近, 电流随 V_D 升高较快, 又表现金属电导行为. 图 9(a) 和 (b) 也显示出当漏极电压 V_D 升高时,

扭转形变对电流的影响仍然较强. 图 9(c) 和 (d) 则显示出在一些特定的扭转角度, 锯齿型 CNT 表现出与 V_G 无关的金属性. 特别是图 9(c) 中, (17,0) 有两个扭转角 11.52° 和 20.48° 具有较高电流, 且不随 V_G 改变, 表现出金属行为. 而从图 9(d) 可以看出 (18,0) 除 0° 和 17.78° 有清楚的金属行为外, 在小扭转角 5° 附近的金属型与半导体型转变较复杂, 且电流变化幅度不明显. 这也与图 8(d) 中 $V_G = 0.5\text{ V}$, $V_D = 0.5\text{ V}$ 时, 电流随扭转角变化曲线一致.

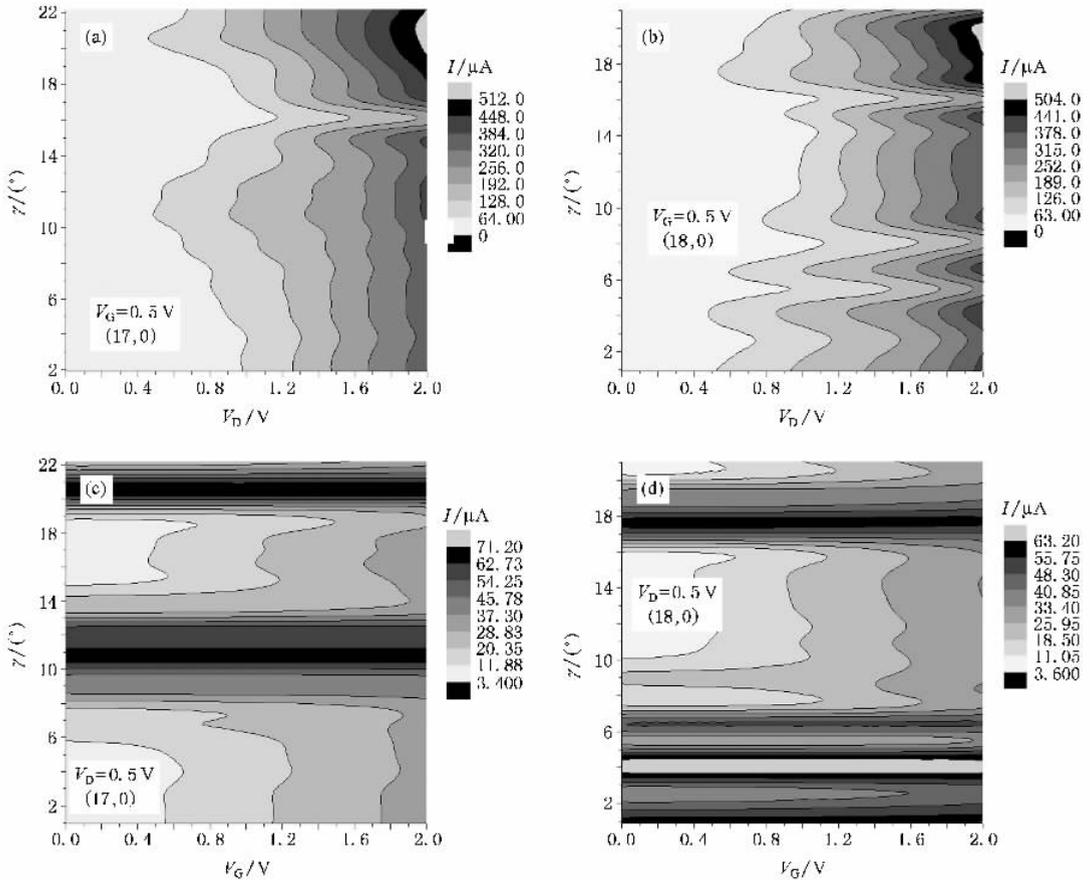


图 9 CNT(17,0) 和 (18,0) 扭转形变的电流 I 等值图显示与扭转角 γ 和电压关系 (a)(b) $V_G = 0.5\text{ V}$ (c)(d) $V_D = 0.5\text{ V}$

图 10 和图 11 显示, 扭转形变下扶手椅型 CNT 电流随漏电压 V_D , 门电压 V_G 和扭转角 γ 的变化规律明显不同于锯齿型 CNT. 图 10(a) 和 (b) 中, 扶手椅型管在 4° 和 10° 附近, 都显示出饱和电流, 呈现半导体特征, 与图 3(d) 能带结构中能隙的变化一致. 图 10(a) 和 (b) 还显示, 当 $V_G = 0.5\text{ V}$, 高 V_D (如 $V_D = 2.0\text{ V}$) 时, 电流随着扭转角度增加而增加 (17,17)

管在 $\gamma = 3.89^\circ$ 时电流为 $616\ \mu\text{A}$ (18,18) 管在 $\gamma = 3.67^\circ$ 时电流为 $506\ \mu\text{A}$, 而对于 20° 扭转角, 电流高达 $900\ \mu\text{A}$, 比没有形变时的电流 ($160\ \mu\text{A}$) 高出 $740\ \mu\text{A}$. 电流显示出具有急速的开关效应, 这种特性可作为敏感元器件的电流控制开关. 由于能隙振荡变化时扭转角对应的变化范围是 3° , 因此图 10(c) 和 (d) 显示在电压固定情形下, 电流随扭转角也有类似的振

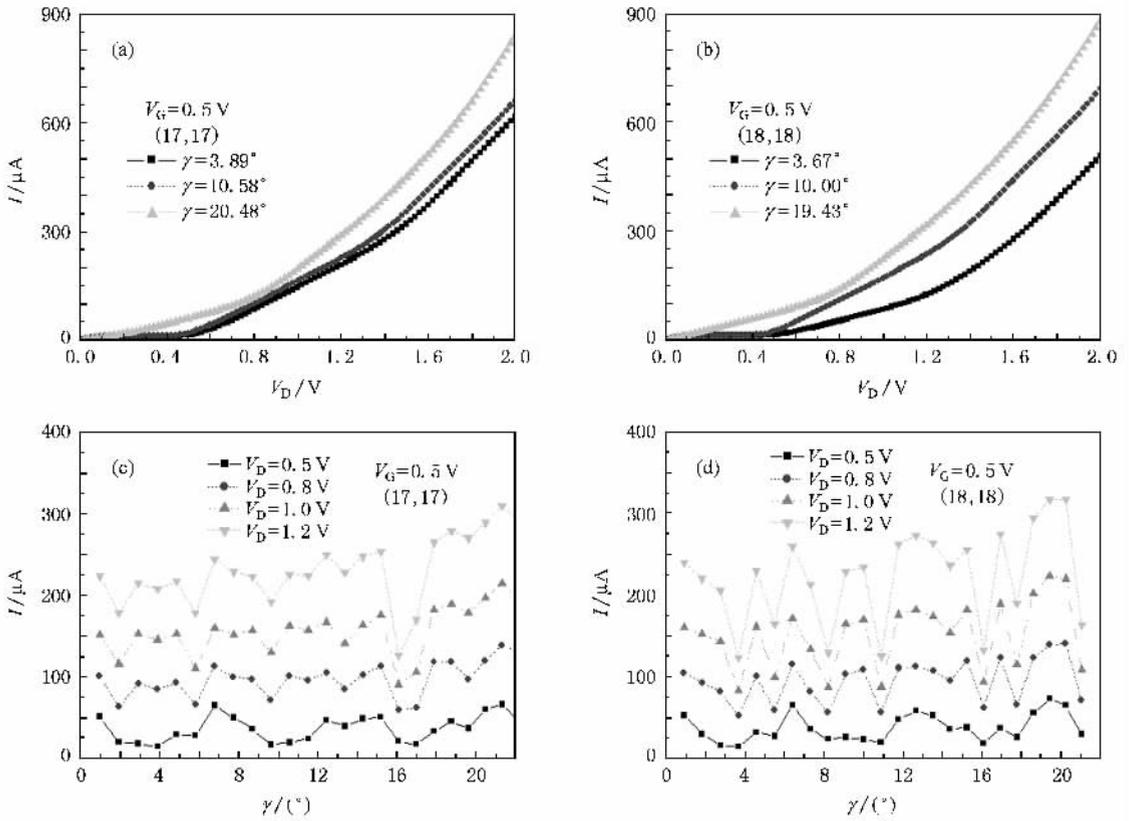


图 10 门电压 $V_G=0.5\text{V}$ 时, CNi(17,17) 和 (18,18) 扭转形变的电流与 V_D 特征 (a)(b) 不同扭转角 γ 时电流 I 与 V_D 关系 (c)(d) 不同 V_D 值时电流 I 与扭转角 γ 关系

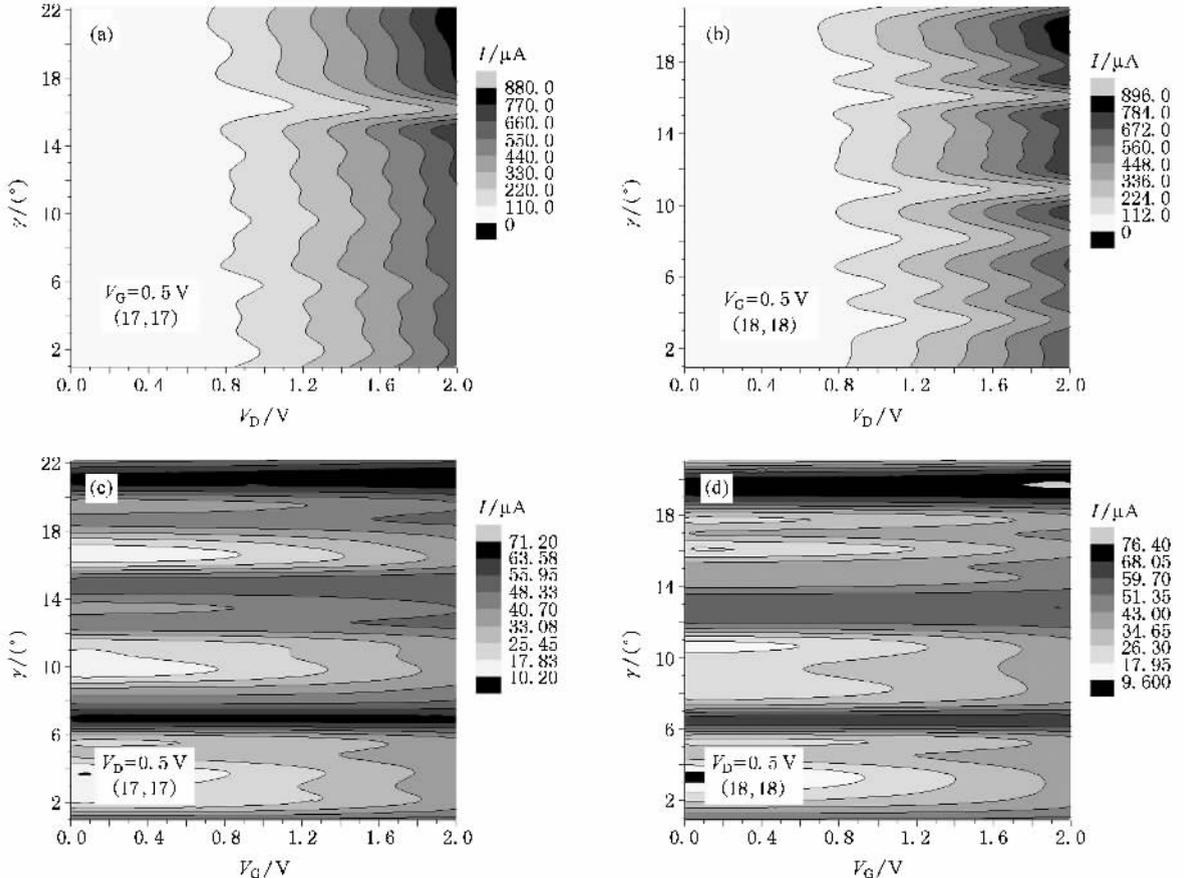


图 11 CNi(17,17) 和 (18,18) 扭转形变的电流 I 等值图显示与扭转角 γ 和电压关系 (a)(b) $V_G=0.5\text{V}$ (c),(d) $V_D=0.5\text{V}$

荡. $V_D = 1.2$ V 电流振荡的最高值与最低值的差值近 $150 \mu\text{A}$.

图 11(a) 和 (b) 更详细地显示了在扭转形变下, 扶手椅型 CNT 电流逐渐的变化行为. 图 11(a) 清楚地显示 (17, 17) 在 16° 附近, $V_D < 1.2$ V 区域, 电流上升很慢, 具有饱和电流特征, 显示出明显的半导体特征. 图 11(b) 则显示出 (18, 0) 在多个扭转角度, 电流上升很慢, 具有饱和电流特征, 显示出明显的半导体特征. 图 11(a) 和 (b) 也显示出当 V_D 升高时, 扭转形变对电流的影响没有减弱. 图 11(c) 和 (d) 则显示出在一些特定扭转角度, 扶手椅型 CNT 电流表现出与 V_G 无关的金属性. 特别是图 11(c) 中 (17, 17) 有三个扭转角 7° , 14.4° 和 21° , 具有较高电流, 且不随 V_G 改变, 表现出金属行为. 在 3° , 10° 和 16.5° 附近半导体性质较强. 而图 11(d) 显示 (18, 18) 在 6.4° , 13.5° 和 19.5° 处有清楚的金属行为. 在 3° 和 10° 附近半导体性质较强. 比较图 9 和图 11 可以发现: 扶手椅型管在 $0.8\text{V} < V_D < 1.1\text{V}$ 较窄范围, 虽然电流随扭转角度多次振荡, 电流变化幅度约 $100 \mu\text{A}$. 但要比锯齿型管稳定, 因为锯齿型管在 $0.5\text{V} < V_D < 1.1\text{V}$ 的较大范围内电流随扭转角变化振荡较缓慢, 特别是 (17, 0) 管, 电流变化幅度约为 $100 \mu\text{A}$, 而电流最大值为 $180 \mu\text{A}$.

4. 结 论

采用紧束缚能带理论方法, 我们得到形变 CNT 能带公式, 禁带宽度随形变参数变化, 导电性质可在半导体型与金属型之间转变. 进而, 应用场效应晶体管 Natori 理论, 计算两种不同形变下不同螺旋度 CNT 的场效应管电流. 结果表明, 锯齿型管和扶手椅型管的电流随外电压和形变的变化行为有明显差别. 拉伸形变时, 锯齿型管电流随拉伸参数有极为显著的振荡行为, 电流随拉伸变化的幅度达到 $50 \mu\text{A}$. 对于 $n = 3s \pm 1$ 拉伸和压缩都能发生到金属型的转变, 而对于 $n = 3s$ CNT 拉伸和压缩都可以使其转变为半导体型. 而拉伸形变几乎不改变扶手椅型管电流. 然而在扭转形变时, 由于 CNT 结构对称性降低, 能级简并消失, CNT 电流急剧升高. 特别是扶手椅型管, 电流在较高漏极电压 ($V_D = 2.0\text{eV}$) 时可达 $900 \mu\text{A}$, 增幅为 $740 \mu\text{A}$, 可作为电流开关器件. 在本文工作中, 我们详细分析了在某些特定的扭转角度电流随扭转角变化非常显著, 显示出锯齿型管和扶手椅型管发生半导体型与金属型之间的转变. 希望本文的研究结果能得到实验的验证.

- [1] Iijima S 1991 *Nature* **354** 56
- [2] Heyd R, Charlier A, McRae E 1997 *Phys. Rev. B* **55** 6820
- [3] Tomblor T W, Zhou C W, Kong J, Dai H J 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 2412
- [4] Yang L, Han J 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 154
- [5] Wu G, Zhou J, Dong J 2005 *Phys. Rev. B* **72** 115411
- [6] Jiang H, Wu G, Yang X, Dong J 2004 *Phys. Rev. B* **70** 125404
- [7] Natori K 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 034306
- [8] Harrison W A 1999 *Elementary Electronic Structure* (中译本) (Beijing: World Scientific) (in Chinese) [Harrison W A 1999 基础电子结构(北京:世界图书出版公司)]
- [9] Huang K, Han R Q 2005 *Physics in Solid* (Beijing: Higher Education Press) (in Chinese) [黄 昆、韩汝琦 2005 固体物理(北京:高等教育出版社)]
- [10] Tans S J, Devoret M H, Dai H J, Thess A, Smalley R E, Geerlings L J, Dekker C 1997 *Nature* **386** 474
- [11] Bockrath M, Cobden D H, McEuen P L 1997 *Science* **275** 1922
- [12] Zhao X, Wang Y, Yu Z P 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 1327

Electrical properties of the deformed carbon nanotube field-effect transistors^{*}

Liu Hong[†] Yin Hai-Jian Xia Shu-Ning

(School of Physical Science and Technology , Nanjing Normal University , Nanjing 210046 , China)

(Received 16 July 2008 ; revised manuscript received 10 April 2009)

Abstract

On the basis of the tight-binding theory , we derive the band structure formula of the deformed carbon nanotube . The results show that the band gap varies with increasing deformation , which shows that the deformation can change the nature of the conductivity of carbon between the metal-type and semiconductor-type . Especially for zigzag nanotubes , there are three different rules governing this translation , which is dependent on the remainder of n divided by 3 . Furthermore , by using Natori theory on the field-effect transistor we study the current-voltage characteristics of deformed carbon nanotube field-effect transistors . For strain deformation , the conductivity of zigzag nanotube presents different characteristics with the remainder of n by 3 . For armchair nanotubes , the conductivity does not change with the strain parameter . However , for torsion deformation , the conductivity rapidly increases , specially for the armchair tube . It has many obviously different conductivity behaviors between zigzag tubes and armchair tubes . At some special torsion angles , the conductivity of zigzag tube and armchair tube has obvious changes , which reveals the translation between metal-type and semiconductor-type conductivities .

Keywords : carbon nanotubes , tight-binding theory , Fermi level , band structure

PACC : 6148 , 7125X , 7155 , 7360T

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Jiangsu Province , China (Grant No. BK2008427) and the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education , China (Grant No. 200803190004) .

[†] E-mail : liuhong3@njnu.edu.cn