

# 单壁碳纳米管电子输运特性的稳定性分析\*

梅龙伟 张振华<sup>†</sup> 丁开和

(长沙理工大学物理与电子科学学院,长沙 410076)

(2008 年 7 月 13 日收到,2008 年 8 月 15 日收到修改稿)

基于变形单壁碳纳米管能量色散关系,计算了碳纳米管最低导带的电子速度及有效质量随形变系数变化的各种曲线,以此推测碳纳米管输运性质的稳定性问题.计算结果表明:对于特定类型的碳纳米管,只当其形变发生在某特定方向、且处于低形变(形变系数  $\epsilon \leq 0.02$ )区时,电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  及平均有效质量  $m_{\text{mean}}^*$  随形变改变才会很小(相对改变量  $\leq 2\%$ ).这意味着此时的碳纳米管低偏压电子输运性能是基本稳定的.而其他形变情形,电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  或电子平均有效质量  $m_{\text{mean}}^*$  或两者随形变变化明显,甚至有跃变,这意味着其低偏压电子输运性能是不稳定的,甚至极不稳定.

关键词:变形单壁碳纳米管,电子速度,电子有效质量,输运性能稳定性

PACC: 7320D, 7210

## 1. 引言

碳纳米管自 1991 年被首次发现以来,一直受到人们广泛的关注和研究<sup>[1-11]</sup>.单壁碳纳米管或为金属型、或为半导体型完全取决于它的几何结构,特别取决于它的手性.这一独特的电子特性对于电子学的实际应用,特别是发展小型分子电子器件具有重要的意义<sup>[12-17]</sup>.

目前,人们对于碳纳米管电子结构和输运性质的研究,大多局限于完整碳纳米管的情况<sup>[1-11]</sup>.事实上,碳纳米管在制备、沉积、处理和操作过程中,各种形变不可避免地引入其中,因此,研究各种实际碳纳米管在形变条件下的电子结构及输运性质,对于了解和理解碳纳米管分子电子器件稳定性问题具有特殊的意义.

本文从一个新的视角来研究在形变条件下碳纳米管输运性质的稳定性问题.众所周知,晶体的电子速度及有效质量是描述其电子结构及导电性能的重要物理量,这两个物理量的变化从不同角度精细反映晶体能带的变化,所以根据这两个物理量的变化可以推测晶体输运性质的变化.本文在推导出的变

形手性碳纳米管电子结构的一般表达式的基础上,计算出碳纳米管第一 Brillouin 区的最低导带的电子速度及有效质量随变形的变化规律,以此来推测碳纳米管输运性质的稳定性.计算结果表明:对于各种椅型碳纳米管或各种金属锯齿型碳纳米管或半导体锯齿型碳纳米管( $4\theta$ ),若分别只有管口周长方向发生形变(形变系数为  $\epsilon_L$ )或只有管口周长方向和管轴方向同时发生形变(取形变系数  $\epsilon_L = \epsilon_J$ )或只有管轴方向发生形变(形变系数为  $\epsilon_J$ ),且都处于低形变(形变系数  $\epsilon \leq 0.02$ )区时,电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  及电子平均有效质量  $m_{\text{mean}}^*$  随形变改变很小(相对改变量  $\leq 2\%$ ).这意味着此时的碳纳米管低偏压电子输运性能是基本稳定的.而其他形变情形,电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  或电子平均有效质量  $m_{\text{mean}}^*$  或两者随形变变化明显,甚至有跃变,这意味着其低偏压电子输运性能是不稳定的,甚至极不稳定.

## 2. 理论模型

紧束缚(TB)模型对于描述石墨烯<sup>[18]</sup>、碳纳米管<sup>[1,7,8,19-22]</sup>的  $\pi$ -电子结构是一种非常有用的方法.这里,我们也利用此方法来研究变形碳纳米管的电

\* 国家自然科学基金(批准号:60771059),湖南省自然科学基金(批准号:08JJ4002),湖南省优秀博士论文基金(批准号:200526)和湖南省教育厅科技项目(批准号:08A005)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人, E-mail: zscuzh@163.com

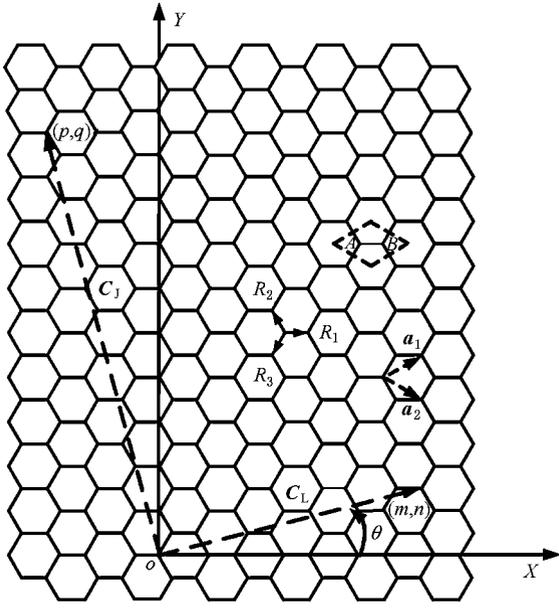


图 1 石墨平面的蜂窝晶体结构(手性矢量  $G_L = ma_1 + na_2$  对应管口周长,  $a_1$  和  $a_2$  是石墨平面的单胞基矢,  $R_1, R_2, R_3$  为键长矢量,  $\theta$  是手性角, 即手性矢量  $C_L$  与石墨椅形边的夹角. 石墨平面的每一个单胞包含两个不对等的碳原子 A 和 B)

子结构. 我们使用的 TB Hamiltonian 具有下列形式<sup>[21, 22]</sup>:

$$H = \sum_l \epsilon_l C_l^+ C_l - \sum_{l, \rho} \gamma_{l, l+\rho} C_l^+ C_{l+\rho}, \quad (1)$$

其中  $C_l^+$  ( $C_{l+\rho}$ ) 是电子的产生(消失)算符.  $\rho$  取值被限制到最邻近的原子. 对(1)式做算符变换:

$$C_l^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ik \cdot R_l} C_k^+,$$

$$C_{l+\rho} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik \cdot (R_l + R_\rho)} C_k, \quad (2)$$

其中  $N$  是体系的原胞数目, 所有的转移积分  $\gamma_{l, l+\rho}$  仅仅取决于石墨平面的 C—C 原子键长<sup>[23]</sup>. 如果原子的位置  $R_l$  (即图 1 的 A 原子) 被给定, 那么我们记  $R_{l+\rho} - R_l = R_\rho$  和  $\gamma_{l, l+\rho} = \gamma_\rho$ ,  $\rho$  对应图 1 中的 3 个最邻近 B 原子. 为简便起见, 其位置能  $\epsilon_l$  取为 0. 因此(1)式可改写为

$$H = - \sum_{k, \rho} \gamma_\rho \exp(ik \cdot R_\rho) C_k^+ C_k = \sum_k \epsilon(k) \hat{n}_k \quad (3)$$

TB 模型的久期方程为<sup>[1, 10, 18]</sup>

$$\det[\mathbf{H} - E\mathcal{I}] = 0 \quad (4)$$

且  $H_{AA} = \alpha$  ( $H_{BB} = 0$ ) 和  $H_{AB} = \epsilon(k)$  ( $H_{BA} = \epsilon^*(k)$ ), 为简单起见, 取  $S_{AA} = 1$  ( $S_{BB} = 1$ ) 和  $S_{AB} = \alpha$  ( $S_{BA} = 0$ )<sup>[1, 10, 18]</sup>, 我们得到

$$\begin{vmatrix} -E(k) & \epsilon(k) \\ \epsilon^*(k) & -E(k) \end{vmatrix} = 0. \quad (5)$$

解方程(5), 得到该系统的能量色散关系:

$$E(k) = \pm \sqrt{|\epsilon(k)|^2}$$

$$= \pm \left\{ \sum_{\rho=1}^3 \gamma_\rho^2 + 2\gamma_1 \gamma_2 \cos(k \cdot a_2) + 2\gamma_1 \gamma_3 \cos(k \cdot a_1) + 2\gamma_1 \gamma_3 \cos[k \cdot (a_1 - a_2)] \right\}^{1/2}, \quad (6)$$

其中  $a_1$  和  $a_2$  是石墨平面的单位矢量(见图 1).

碳纳米管可视为无限长石墨平面沿管轴方向( $//C_j$ )卷曲而成. 当石墨平面发生变形时, 我们用  $\epsilon_L$  和  $\epsilon_j$  分别表示沿  $\hat{c}_L$  方向(即管口周长方向)和  $\hat{c}_j$  方向(即管轴方向)的拉伸或压缩而产生的应变. 为简单起见, 旋转  $XOY$  坐标系, 使  $X$  轴与手性矢量  $C_L$  重合. 发生形变后的碳纳米管, 它的单胞基矢与石墨键长都与形变有关, 变形后的单胞基矢为

$$a_1 = \sqrt{3}\lambda [ \cos(30^\circ - \theta) (1 + \epsilon_L) \hat{i} + \sin(30^\circ - \theta) (1 + \epsilon_j) \hat{j} ], \quad (7a)$$

$$a_2 = \sqrt{3}\lambda [ \cos(30^\circ + \theta) (1 + \epsilon_L) \hat{i} - \sin(30^\circ + \theta) (1 + \epsilon_j) \hat{j} ], \quad (7b)$$

其中  $\lambda$  为未变形前 C—C 键长. 变形后三个方向的 C—C 键矢量为

$$R_1 = \lambda \cos\alpha (1 + \epsilon_L) \hat{i} - \lambda \sin\alpha (1 + \epsilon_j) \hat{j}, \quad (8a)$$

$$R_2 = -\lambda \sin(30^\circ - \theta) (1 + \epsilon_L) \hat{i} + \lambda \cos(30^\circ - \theta) (1 + \epsilon_j) \hat{j}, \quad (8b)$$

$$R_3 = -\lambda \sin(30^\circ + \theta) (1 + \epsilon_L) \hat{i} - \lambda \cos(30^\circ + \theta) (1 + \epsilon_j) \hat{j}, \quad (8c)$$

手性知量  $C_L$  为

$$C_L = ma_1 + na_2$$

$$= \sqrt{3}\lambda (1 + \epsilon_L) [ m \cos(30^\circ - \theta) + n \cos(30^\circ + \theta) ] \hat{i}$$

$$+ \sqrt{3}\lambda (1 + \epsilon_j) [ m \sin(30^\circ - \theta) - n \sin(30^\circ + \theta) ] \hat{j}. \quad (9)$$

由于手性知量在  $x$  轴方向, 所以有

$$m \sin(30^\circ - \theta) - n \sin(30^\circ + \theta) = 0,$$

即

$$\tan\theta = \frac{m - n}{\sqrt{3}(m + n)},$$

变形后, 转移积分有简单关系<sup>[23]</sup>:  $\gamma_i = \gamma_0 (R_0/R_i)$ , 这里  $R_0 = \lambda$  是未变形的 C—C 原子键长,  $\gamma_0 = 2.66$

$eV$  是石墨平面未变形时的转移积分,按(8)式,可得

$$\gamma_1 = \gamma_0 [\cos^2 \theta (1 + \epsilon_L) + \sin^2 \theta (1 + \epsilon_J)]^{-1} \quad (10a)$$

$$\gamma_2 = \gamma_0 [\sin^2 (30^\circ - \theta) (1 + \epsilon_L) + \cos^2 (30^\circ - \theta) (1 + \epsilon_J)]^{-1}, \quad (10b)$$

$$\gamma_3 = \gamma_0 [\sin^2 (30^\circ + \theta) (1 + \epsilon_L) + \cos^2 (30^\circ + \theta) (1 + \epsilon_J)]^{-1}. \quad (10c)$$

由此得到变形石墨平面能量色散关系的一般表达式

$$E(\mathbf{k}) = \pm \gamma_0 \left\{ \frac{1}{(\cos^2 \theta (1 + \epsilon_L) + \sin^2 \theta (1 + \epsilon_J))} + \frac{1}{(\sin^2 (30^\circ - \theta) (1 + \epsilon_L) + \cos^2 (30^\circ - \theta) (1 + \epsilon_J))} + \frac{1}{(\sin^2 (30^\circ + \theta) (1 + \epsilon_L) + \cos^2 (30^\circ + \theta) (1 + \epsilon_J))} + \frac{2\cos(k_x \lambda (1 + \epsilon_L) \cos \theta + \sin(30^\circ - \theta)) - k_y \lambda (1 + \epsilon_J) (\sin \theta + \cos(30^\circ - \theta))}{[\cos^2 \theta (1 + \epsilon_L) + \sin^2 \theta (1 + \epsilon_J)] [\sin^2 (30^\circ - \theta) (1 + \epsilon_L) + \cos^2 (30^\circ - \theta) (1 + \epsilon_J)]} + \frac{2\cos(k_x \lambda (1 + \epsilon_L) \cos \theta + \sin(30^\circ + \theta)) + k_y \lambda (1 + \epsilon_J) (\cos(30^\circ + \theta) - \sin \theta)}{[\cos^2 \theta (1 + \epsilon_L) + \sin^2 \theta (1 + \epsilon_J)] [\sin^2 (30^\circ + \theta) (1 + \epsilon_L) + \cos^2 (30^\circ + \theta) (1 + \epsilon_J)]} + \frac{2\cos(k_x \lambda (1 + \epsilon_L) \sin(30^\circ + \theta) - \sin(30^\circ - \theta)) + k_y \lambda (1 + \epsilon_J) (\cos(30^\circ + \theta) + \cos(30^\circ - \theta))}{\sin^2 (30^\circ - \theta) (1 + \epsilon_L) + \cos^2 (30^\circ - \theta) (1 + \epsilon_J)} \right\}^{1/2}. \quad (11)$$

对于碳纳米管,利用周期性边界条件  $\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r} + \mathbf{C}_L)$  (其中  $\Psi(\mathbf{r})$  是电子的 Bloch 函数),可得(11)式中  $k_x$  的表达式

$$k_x = \frac{2\pi J}{\sqrt{3}\lambda(1 + \epsilon_L)\sqrt{m^2 + n^2 + mn}} \quad (J = 1, 2, \dots, N), \quad (12)$$

其中  $N$  是  $m$  和  $n$  的函数,即

$$N = \begin{cases} \frac{2(m^2 + n^2 + mn)}{d} & (m - n \neq 3di), \\ \frac{2(m^2 + n^2 + nm)}{3d} & (m - n = 3di), \end{cases} \quad (13)$$

其中  $i$  是整数, $d$  是  $m$  和  $n$  的最大公约数.

晶体中的电子速度及有效质量是描述其电子结构及导电性能的重要物理量,其电子速度  $v$  可用下式计算:

$$v_j(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_j(\mathbf{k}), \quad (14)$$

式中  $\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ .

晶体中电子有效质量概括了周期性势场的作用,按照半经典理论,电子有效质量  $m^*$  定义为

$$(m^*)_j^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \nabla_{\mathbf{k}}^2 E_j(\mathbf{k}). \quad (15)$$

### 3. 碳纳米管电子输运特性的稳定性分析

#### 3.1. 椅型碳纳米管

椅型碳纳米管在未形变前为理想的金属管.利

用(14)式,我们计算出各种椅型碳纳米管( $m, m$ )最低导带的电子速度  $v$  随形变的变化曲线,如图2所示.显然,不同的椅型碳纳米管( $m$  取不同值)的最低导带电子速度  $v$  随形变的变化曲线完全相同.从图2(a)或(b))可以看出,随着管口周长方向形变  $\epsilon_L$  (或管轴方向形变  $\epsilon_J$ ) 增大,曲线往波矢  $k_y$  较大(或较小)的方向规则移动;图2(c)所示为管口周长方向和管轴方向同时发生形变,且大小取  $\epsilon_L = \epsilon_J$  时的电子速度随形变的变化曲线,可以看出形变增大时,曲线往波矢  $k_y$  较小的方向规则移动;图2(d)所示为第一 Brillouin 区电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  随形变的变化曲线,显然有:1)管口周长方向和管轴方向同时发生形变(取  $\epsilon_L = \epsilon_J$ ) 时与仅有管口周长方向发生形变  $\epsilon_L$  或仅有管轴方向发生形变  $\epsilon_J$  时相比,电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  随形变变化较大;2)在低形变区( $\epsilon \leq 0.02$ ) 电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  变化很小(相对改变量  $\leq 2\%$ ) 在高形变时,电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  变化较大,在整过计算区间,电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  随形变增大几乎线性变小.

利用(15)式,我们计算出各种椅型碳纳米管( $m, m$ )最低导带的电子有效质量  $m^*$  随形变的变化曲线,如图3所示.显然,不同的椅型碳纳米管( $m$  取不同值)的最低导带电子有效质量  $m^*$  随形变的变化曲线完全相同.从图3(a)或(b))可以看出,随着管口周长方向形变  $\epsilon_L$  (或管轴方向形变  $\epsilon_J$ ) 增大,曲线发生移动,且管轴方向产生形变时,曲线移动更

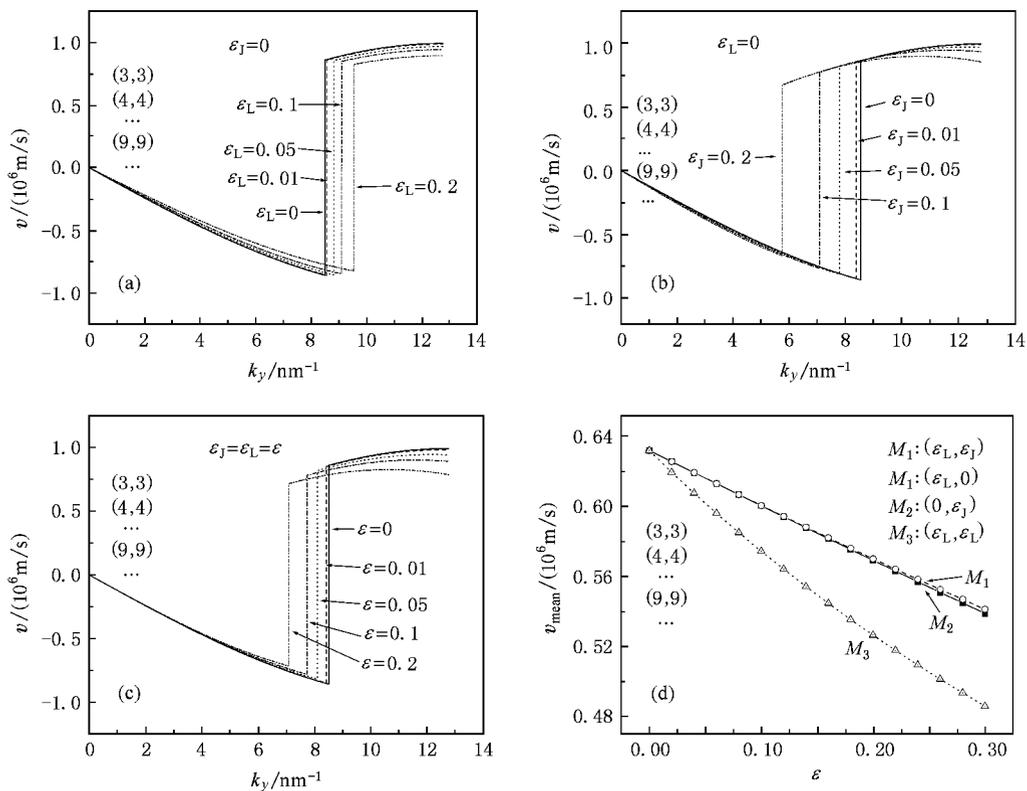


图 2 椅型碳纳米管中电子速度随形变变化曲线

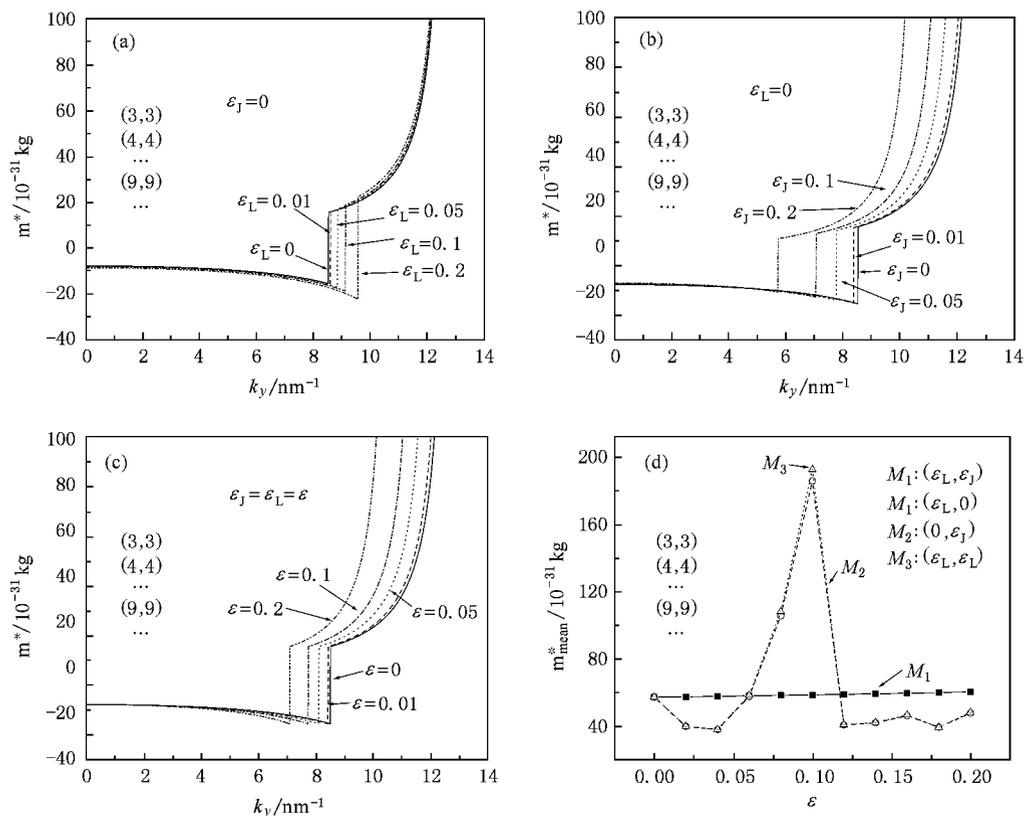


图 3 椅型碳纳米管电子有效质量随形变变化曲线

为明显.图 3(c)所示为管口周长方向和管轴方向同时发生形变、且取  $\epsilon_L = \epsilon_j$  时的电子有效质量随形变的变化曲线,可以看出形变增大时,曲线往波矢  $k_y$  较小的方向移动.图 3(d)所示为第一 Brillouin 区电子平均有效质量随形变的变化曲线,不难看出:1)若只有管口周长方向发生形变  $\epsilon_L$ ,则电子平均有效质量随形变增加几乎不变;2)管口周长方向和管轴方向同时发生形变(取  $\epsilon_L = \epsilon_j$ )时或仅有管轴方向发生形变  $\epsilon_j$  时,电子平均有效质量发生不规则变化,且有跃变,即使在低形变( $\epsilon \leq 0.02$ )情形,电子平均有效质量随形变变化也较大.

综上所述,对于椅型碳纳米管( $m, m$ ),若只有管口周长方向发生形变  $\epsilon_L$ ,且处于低形变区( $\epsilon \leq 0.02$ )时,电子平均速度  $v_{mean}$  及电子平均有效质量  $m_{mean}^*$  随形变改变都很小(相对改变量  $\leq 2\%$ );而其他形变情形,电子平均速度  $v_{mean}$  或电子平均有效质量  $m_{mean}^*$  或两者随形变变化明显,甚至有跃变.这意味着对于椅型碳纳米管( $m, m$ ),只有管口周长方向发生形变  $\epsilon_L$ ,且处于低形变区( $\epsilon \leq 0.02$ )时,其低偏压电子输运性能是基本稳定的,否则是不稳定的,甚至极不稳定.

### 3.2. 金属锯齿型碳纳米管

对于锯齿型碳纳米管( $m, 0$ ),若  $m = 3i$  ( $i$  为整数),在未形变前为准金属管,若不满足  $m = 3i$  ( $i$  为整数),则为半导体管.利用(14)式,我们计算出各种金属锯齿型碳纳米管最低导带的电子速度  $v$  随形变的变化曲线,如图 4 所示.显然,不同的金属锯齿型碳纳米管的最低导带电子速度  $v$  随形变的变化曲线完全相同.从图 4(a)或(b))可以看出,管口周长方向形变  $\epsilon_L$ (或管轴方向形变  $\epsilon_j$ )发生后,电子速度随波矢  $k_y$  变化曲线从单调下降变为有峰值的结构,且电子速度随形变增加而变小.图 4(c)所示为管口周长方向和管轴方向同时发生形变、且大小取  $\epsilon_L = \epsilon_j$  时的电子速度随形变的变化曲线,可以看出形变增大时,电子速度变小.图 4(d)所示为第一 Brillouin 区电子平均速度  $v_{mean}$  随形变的变化曲线,显然有:1)只有管口周长方向和管轴方向同时发生形变(取  $\epsilon_L = \epsilon_j$ )时与仅有管口周长方向发生形变  $\epsilon_L$  或仅有管轴方向发生形变  $\epsilon_j$  时相比,电子平均速度  $v_{mean}$  随形变变化较小;2)在低形变( $\epsilon \leq 0.02$ )区,电子平均速度  $v_{mean}$  变化很小(相对改变量  $\leq 2\%$ ),在高

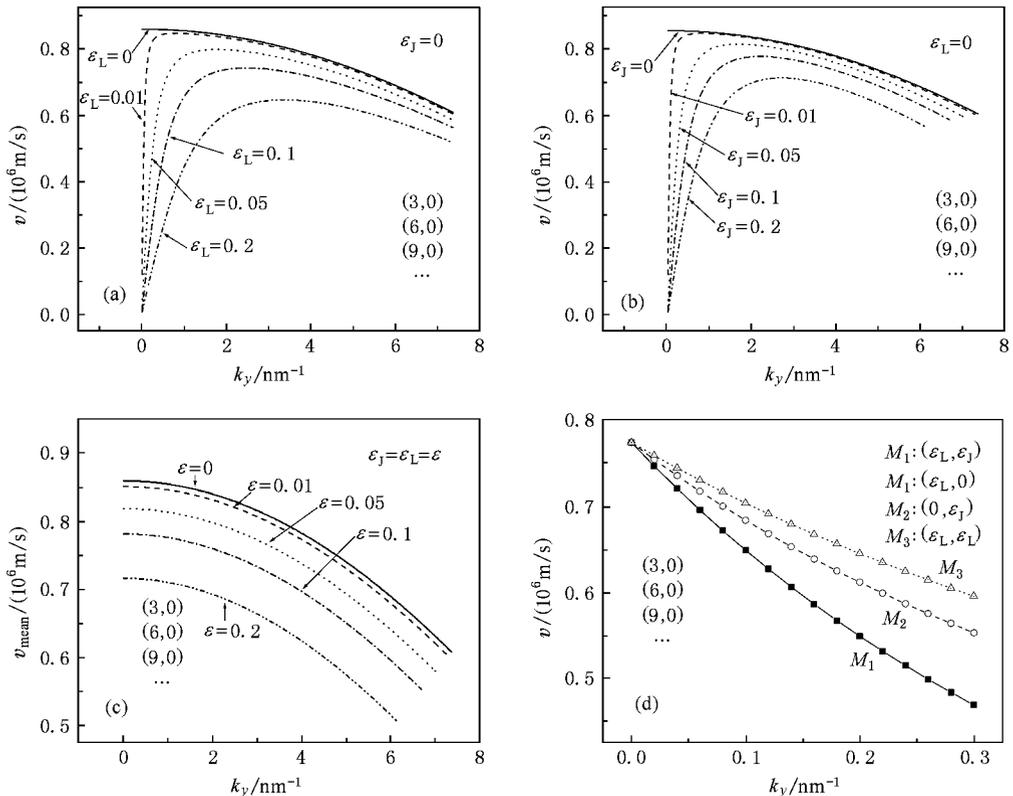


图 4 金属锯齿型碳纳米管电子速度随形变变化曲线

形变时,电子平均速度  $v_{mean}$  变化较大,在整过计算区间,电子平均速度  $v_{mean}$  随形变几乎线性变化。

利用(15)式,我们计算出各种金属锯齿型碳纳米管最低导带的电子有效质量  $m^*$  随形变的变化曲线,如图5所示。显然,不同的金属锯齿型碳纳米管的最低导带电子有效质量  $m^*$  随形变的变化曲线完全相同。从图5(a)或(b))可以看出,管口周长方向形变  $\epsilon_L$ (或管轴方向形变  $\epsilon_J$ )发生后,电子有效质量随波矢  $k_y$  变化曲线从单枝结构变为有跃变的双枝结构,且随着形变增大,曲线往波矢  $k_y$  较大的方向规则移动。图5(c)所示为管口周长方向和管轴方向同时发生形变、且取  $\epsilon_L = \epsilon_J$  时的电子有效质量随形变的变化曲线,可以看出形变增大时,曲线往波矢  $k_y$  较小的方向发生很小的移动。图5(d)所示为第一 Brillouin 区电子平均有效质量随形变的变化曲线,不难看出:1)只有管口周长方向和管轴方向同时发生形变(取  $\epsilon_L = \epsilon_J$ )时,电子平均有效质量随形变增加几乎不变;2)若只有管口周长方向发生形变  $\epsilon_L$  或只有管轴方向发生形变  $\epsilon_J$  时,电子平均有效质量随形变变化较大,且对于前者,电子平均有效质量有跃变。

综上所述,对于各种金属锯齿型碳纳米管,只有管口周长方向和管轴方向同时发生形变(取  $\epsilon_L = \epsilon_J$ )时,且处于低形变( $\epsilon \leq 0.02$ )区时,电子平均速度  $v_{mean}$  及电子平均有效质量  $m^*$  随形变改变都很小(相对改变量  $\leq 2\%$ );而其他形变情形,电子平均速度  $v_{mean}$  或电子平均有效质量  $m^*$  或两者随形变变化明显,甚至有跃变。这意味着对于金属锯齿型碳纳米管,只有周长方向和管轴方向同时发生形变(取  $\epsilon_L = \epsilon_J$ )时,且处于低形变( $\epsilon \leq 0.02$ )区时,其低偏压电子输运性能是基本稳定的,否则是不稳定的,甚至极不稳定。

### 3.3 半导体锯齿型碳纳米管

利用(14)式,我们计算出半导体锯齿型碳纳米管最低导带的电子速度  $v$  随形变的变化曲线,计算发现:对不同半导体锯齿型碳纳米管其计算结果有所区别,这里我们选择(4,0)管作为例子,其计算结果如图6所示。从图6(a)可以看出,管口周长方向形变  $\epsilon_L$  发生后,电子速度曲线随波矢  $k_y$  变化先增后减。图6(b)所示为管轴方向形变  $\epsilon_J$  发生后,电子速度随形变增加而变小。图6(c)所示为管口周长方向和管轴方向同时发生形变、且大小取  $\epsilon_L = \epsilon_J$  时的

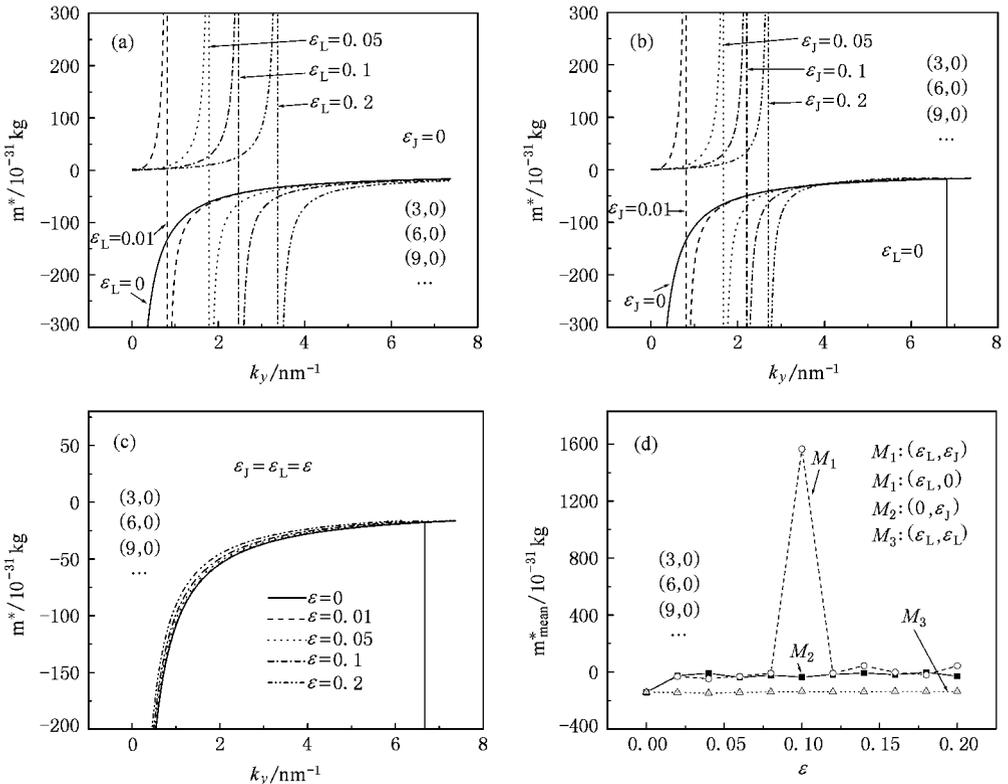


图5 金属锯齿型碳纳米管电子有效质量随形变变化曲线

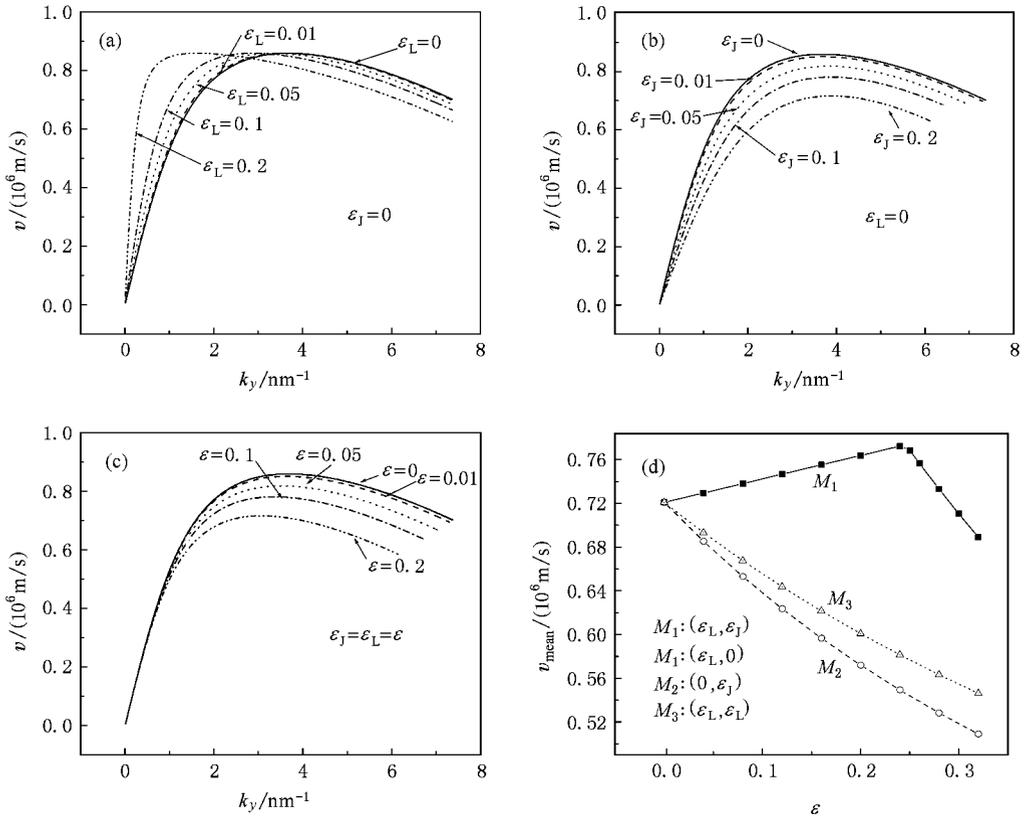


图 6 半导体锯齿型碳纳米管(4,0)电子速度随形变变化曲线

电子速度随形变的变化曲线,可以看出形变增大时,电子速度也是变小.图 6(d)所示为第一 Brillouin 区电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  随形变的变化曲线,显然有:1)只有管口周长方向发生形变  $\epsilon_L$  时,电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  随形变先增大后减小,而管轴方向发生形变  $\epsilon_j$  或管轴方向与管口周长方向同时发生形变(取  $\epsilon_L = \epsilon_j$ )时电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  随形变增大而变小;2)在低形变( $\epsilon \leq 0.02$ )区,电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  变化很小(相对改变量  $\leq 2\%$ ),在高形变时,电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  变化较大,在整过计算区间,电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  随形变几乎线性变化.

利用(15)式,我们计算半导体锯齿型碳纳米管(4,0)最低导带的电子有效质量  $m^*$  随形变的变化曲线,如图 7 所示.从图 7(a)或(b)或(c)可以看出,管口周长方向发生形变  $\epsilon_L$  或管轴方向发生形变  $\epsilon_j$  或管口周长方向和管轴方向同时发生形变、且取  $\epsilon_L = \epsilon_j$  时发生时,电子有效质量随波矢  $k_y$  变化曲线均发生移动.图 7(d)所示为第一 Brillouin 区电子平均有效质量随形变的变化曲线,不难看出:1)若只有管轴方向发生形变  $\epsilon_j$  时,电子平均有效质量随形变

增加几乎不变;2)若只有管口周长方向发生形变  $\epsilon_L$  或周长方向和管轴方向同时发生形变(取  $\epsilon_L = \epsilon_j$ )时,电子平均有效质量随形变增大而有跃变.

综上所述,对于半导体锯齿型碳纳米管(4,0),若只有管轴方向发生形变  $\epsilon_j$ ,且处于低形变( $\epsilon \leq 0.02$ )区时,电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  及电子平均有效质量  $m^*$  随形变改变都很小(相对改变量  $\leq 2\%$ );而其他形变情形,电子平均速度  $v_{\text{mean}}$  或电子平均有效质量  $m^*$  或两者随形变变化明显,甚至有跃变.这意味着对于半导体锯齿型碳纳米管(4,0),若只有管轴方向发生形变  $\epsilon_j$ ,且处于低形变( $\epsilon \leq 0.02$ )区时,其低偏压电子输运性能是基本稳定的,否则是不稳定的,甚至极不稳定.

### 4. 结 论

本文基于我们推导出的计入变形效应的单壁碳纳米管能量色散关系,计算了最低导带的电子速度和有效质量,进而讨论了低偏压电子输运性能的稳定性问题.主要结论是:对于各种椅型碳纳米管或各

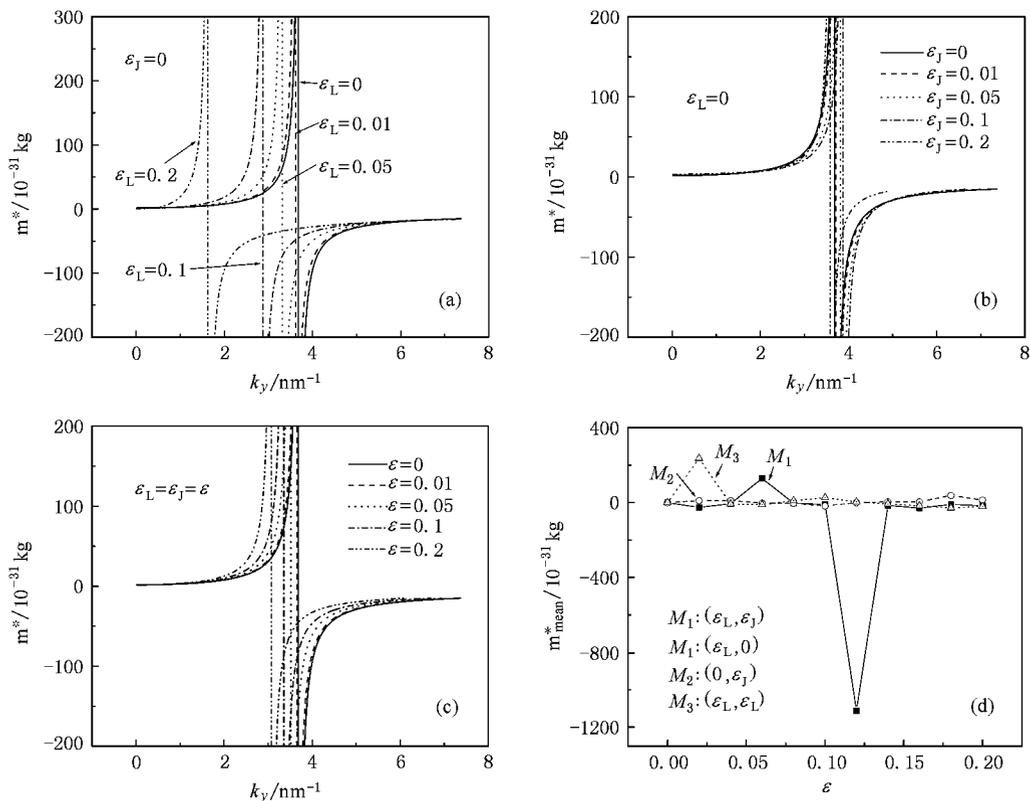


图 7 半导体锯齿型碳纳米管(4  $\rho$ ) 电子有效质量随形变变化曲线

种金属锯齿型碳纳米管或半导体锯齿型碳纳米管(4  $\rho$ )若分别只有管口周长方向发生形变  $\epsilon_L$  或只有管轴方向发生形变  $\epsilon_j$  或只有管口周长方向和管轴方向同时发生形变且取形变系数  $\epsilon_L = \epsilon_j$  时,第一 Brillouin 区电子平均有效质量随形变增加几乎不变,但其电子平均速度  $v_{mean}$  随形变几乎都是线性变化.如果我们定义电子平均速度相对改变量  $\leq 2\%$  为

电子输运性能稳定输运区,则碳纳米管形变系数  $\epsilon$  不能超过 0.02,即对于上述三种纳米管沿特定方向发生形变,且处于低形变(形变系数  $\epsilon \leq 0.02$ )区时,电子输运性能是基本稳定的.而其他形变情形,电子平均速度  $v_{mean}$  或电子平均有效质量  $m_{mean}^*$  或两者随形变变化明显,甚至有跃变,这意味着其低偏压是不稳定的,甚至极不稳定.

[ 1 ] Saito R 1998 *Physical Properties of Carbon Nanotubes* ( London : Imperial College Press )  
 [ 2 ] Meninder S P , Byung H H 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 186808  
 [ 3 ] Zhou T , Wu J 2007 *Phys. Rev. B* **75** 205410  
 [ 4 ] Alain R 1999 *J. Phys. Chem. B* **103** 641  
 [ 5 ] Teri W O 2000 *J. Phys. Chem. B* **104** 2794  
 [ 6 ] Guo W L , Guo Y F 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 115501  
 [ 7 ] Zhang Z H , Peng J C , Zhang H 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 3515  
 [ 8 ] Zhang Z H , Peng J C , Huang X Y , Zhang H 2002 *Phys. Rev. B* **66** 085405  
 [ 9 ] Baughman R H 2002 *Science* **297** 787  
 [ 10 ] Zhang Z H , Peng J C , Chen X H 2001 *Acta. Phys. Sin.* **50** 1150 ( in Chinese ) [ 张振华、彭景翠、陈小华 2001 物理学报 **50** 1150 ]

[ 11 ] Ou Y Y , Peng J C , Wang H , Yi S P 2008 *Acta. Phys. Sin.* **57** 615 ( in Chinese ) [ 欧阳玉、彭景翠、王 慧、易双萍 2008 物理学报 **57** 615 ]  
 [ 12 ] Tans S J , Devoret M H , Dai H 1997 *Nature* **386** 474  
 [ 13 ] Bockrath M , Cobden D H , McEuen P L 1997 *Science* **275** 1922  
 [ 14 ] Tans S J , Verschueren A R M , Dekker C 1998 *Nature* **393** 49  
 [ 15 ] Tsukagoshi K , Alphenaar B W , Ago H 1999 *Nature* **401** 572  
 [ 16 ] Collins P G , Zettl A , Bando H , Thess A , Smalley R E 1997 *Science* **278** 100  
 [ 17 ] Fuhrer M S , Nygard J , Shih L 2000 *Science* 288 494  
 [ 18 ] Wallance P R 1947 *Phys. Rev.* **71** 622  
 [ 19 ] Roche S , Dresselhaus G , Dresselhaus M S 2000 *Phys. Rev. B* **62** 16092

- [ 20 ] Yang L , Anantram M P , Han J , Lu J P 1999 *Phys. Rev. B* **60** 13874
- [ 21 ] Latil S , Roche S , Rubio A 2003 *Phys. Rev. B* **67** 165420
- [ 22 ] Chico L , Crespi V H , Benedict L X 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 971
- [ 23 ] Froyen S , Harrison W A 1979 *Phys. Rev. B* **20** 240

## Analysis on the stability of the electronic transport properties of single-walled carbon nanotubes<sup>\*</sup>

Mei Long-Wei Zhang Zhen-Hua<sup>†</sup> Ding Kai-He

( *School of Physics and Electronic Science , Changsha University of Science and Technology , Changsha 410076 , China* )

( Received 13 July 2008 ; revised manuscript received 15 August 2008 )

### Abstract

Based on energy dispersion relation of the deformed single-walled carbon nanotubes ( SWCNTs ) , various curves of the electronic velocity and effective mass of the lowest conduction band versus deformation parameters for SWCNTs are computed. It is found that only when a deformation occurs in the special direction( s ) and is limited to a region of low deformation ( the deformation parameter  $\epsilon \leq 0.02$  ) , the variations of the electronic average velocity  $v_{\text{mean}}$  and average effective mass  $m_{\text{mean}}^*$  of different types of SWCNTs are very small ( the relative variation  $\leq 2\%$  ) , which suggests that in these cases the electronic transport properties for SWCNTs under a low bias are basically stable. Whereas in other cases the electronic average velocity , or electronic average effective mass , or both of them vary significantly , even change in a dramatic way. This means that the electronic transport properties for SWCNTs under a low bias are unstable , even extremely unstable.

**Keywords** : deformed single-walled carbon nanotubes , electronic velocity , electronic effective mass , stability of the electronic transport properties

**PACC** : 7320D , 7210

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China( Grant No. 60771059 ) , the Natural Science Foundation of Hunan Province( Grant No. 08JJ4002 ) , the Foundation of Excellent Ph. D. Thesis of Hunan Province( Grant No. 200526 ) and the Scientific Research Fund of Hunan Provincial Education Department( Grant No. 08A005 ) .

<sup>†</sup> Correspondent author : E-mail : cscuzh@163.com