

卷曲效应对单壁碳纳米管电子结构的影响*

秦威 张振华[†] 刘新海

(长沙理工大学物理与电子科学学院, 长沙 410004)

(2011年2月26日收到; 2011年6月30日收到修改稿)

利用计入卷曲效应的单壁碳纳米管(SWCNT)的能量色散关系, 计算最低导带的电子速度及有效质量, 并不计入卷曲效应的结果进行了比较. 计算结果表明: 卷曲效应对电子速度及有效质量的影响与SWCNT的类型密切相关, 金属锯齿型SWCNT对卷曲效应最为敏感, 其次是扶手椅型SWCNT, 最不敏感的是半导体锯齿型SWCNT. 由此可以推断, 卷曲效应对金属锯齿型SWCNT电子结构及低偏压输运特性影响最大, 其次是扶手椅型SWCNT, 影响不明显的是半导体锯齿型SWCNT. 这些结果与实验测量及密度泛函理论计算结果完全一致.

关键词: 单壁碳纳米管, 卷曲效应, 电子速度, 电子有效质量

PACS: 73.22.-f, 73.63.-b, 73.23.-b

1. 引言

由于光刻技术、热效应及电子波动性等方面的限制, 传统的硅基电子器件将很快达到尺寸极限, 所以发展纳米分子器件是突破这一极限的有效方法. 目前, 人们已对纳米分子器件进行了大量而深入的研究^[1-13]. 理论和实验均已表明^[4,5,14], 单壁碳纳米管(SWCNT)作为一维体系, 具有许多优异的电学性质, 是制备纳米分子器件的优质材料. SWCNT是由石墨烯卷曲而成, 对于二维石墨平面, 每个碳原子有4个价电子, 共计4个波函数, 其中3个波函数参与 sp^2 杂化形成 σ 键, 剩下1个电子波函数构成 $2p_z$ 态, 即 π 键. 当石墨卷曲成SWCNT时, π 轨道不再与石墨平面垂直, 导致 σ - π 轨道再杂化, 使得在不同方向上的键长不再相等而产生卷曲效应.

目前, 对SWCNT的研究大多忽略了卷曲效应的影响, 将不同键方向的转移积分简化为相同的值进行计算, 事实上, 这种近似是有偏差的. 本文利用计入卷曲效应的SWCNT能量色散关系, 计算电子速度及有效质量, 探讨卷曲效应对SWCNT电子结构的影响, 重点讨论SWCNT种类及大小与卷曲效应的关系.

2. 理论模型

在紧束缚模型(TB模型)中, 图1所示的石墨平面的 π 电子波函数 $\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ 可用布洛赫函数 $\{\phi_j\}$ 展开^[14,15]

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_j C_j(\mathbf{k}) \phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (j = A, B), \quad (1)$$

其中 $\{C_j\}$ 为组合系数, A, B 为不等价的两个碳原子. 设布洛赫函数 $\{\phi_j\}$ 由原子轨道波函数 $\{\phi_j^a\}$ 线性组合而成, 即

$$\phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\lambda_n} \exp(i\mathbf{k} \cdot \lambda_n) \phi_j^a(\mathbf{r} - \lambda_n), \quad (2)$$

其中 N 为石墨平面原胞个数, λ_n 为格矢, 即碳原子的位置矢量.

设电子的Hamilton量 \hat{H} 为

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad (3)$$

电子的波函数满足薛定谔方程

$$\hat{H}\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = E(\mathbf{k})\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (4)$$

将(1)式代入(4)式, 并与 $\phi_i(\mathbf{k}', \mathbf{r})$ 作内积, 得

$$\begin{aligned} & \sum_j C_j \langle \phi_i(\mathbf{k}', \mathbf{r}) | \hat{H} | \phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \rangle \\ & = E(\mathbf{k}) \sum_j C_j \langle \phi_i(\mathbf{k}', \mathbf{r}) | \phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

定义

* 国家自然科学基金(批准号:61071015, 60771059)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: cscuzzh@163.com

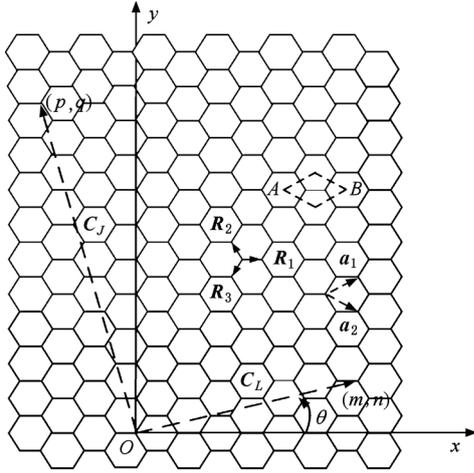


图1 石墨平面的蜂窝晶体结构及 SWCNT 构成 C_L 和 C_j 分别对应 SWCNT 的管口周长和长度, θ 为手性角, A 和 B 为不等价的两个碳原子, a_1 和 a_2 为基矢, (m, n) 为 SWCNT 指数

$$H_{ij} = \langle \phi_i(\mathbf{k}', \mathbf{r}) | \hat{H} | \phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \rangle, \quad (6)$$

$$S_{ij} = \langle \phi_i(\mathbf{k}', \mathbf{r}) | \phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \rangle, \quad (7)$$

由(5)式可得

$$\sum_j C_j (H_{ij} - E(\mathbf{k}) S_{ij}) = 0.$$

要使 $\{C_j\}$ 有非零解, 上式的系数行列式应为零, 由此可得石墨平面的 TB 模型的久期方程为

$$\det[H - E(\mathbf{k})S] = 0. \quad (8)$$

将(2)式代入(6)和(7)式, 并分别计

$$\gamma_{\lambda_m \lambda_n} = \langle \phi^{\text{at}}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\lambda}_m) | \hat{H} | \phi^{\text{at}}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\lambda}_n) \rangle, \quad (9)$$

$$\beta_{\lambda_m \lambda_n} = \langle \phi^{\text{at}}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\lambda}_m) | \phi^{\text{at}}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\lambda}_n) \rangle,$$

考虑正交归一化条件后, 则 H_{ij}, S_{ij} 可化为

$$H_{ij} = \sum_{\lambda_m} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\lambda}_n - \boldsymbol{\lambda}_m)] \gamma_{\lambda_m \lambda_n}, \quad (10)$$

$$S_{ij} = \sum_{\lambda_m} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\lambda}_n - \boldsymbol{\lambda}_m)] \beta_{\lambda_m \lambda_n}. \quad (11)$$

由(9)–(11)式可知

$$H_{AA} = \gamma_0 = H_{BB} \quad (12)$$

$$H_{AB} = H_{BA}^*;$$

$$S_{AA} = S_{BB} = 1, \quad (13)$$

$$S_{AB} = S_{BA}^*.$$

所以, \mathbf{H} 及 \mathbf{S} 可写为矩阵形式, 即

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \gamma_0 & H_{AB} \\ H_{AB}^* & \gamma_0 \end{pmatrix}, \quad (14)$$

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & S_{AB} \\ S_{AB}^* & 1 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

将(14), (15)式代入(8)式, 同时为简单起见, 令 γ_0

$= 0$, 且取 A 原子与 B 原子间的重叠积分 $\beta_{\lambda_m \lambda_n} = 0$, 由此可解得

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{|H_{AB}|^2}, \quad (16)$$

即

$$E(\mathbf{k}) = \pm \left\{ \sum_{\rho=1}^3 \gamma_{\rho} + 2\gamma_1 \gamma_2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + 2\gamma_1 \gamma_3 \mathbf{k} \cdot \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + 2\gamma_2 \gamma_3 \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)] \right\}^{1/2}, \quad (17)$$

其中 \mathbf{a}_1 和 \mathbf{a}_2 为石墨平面的基矢. 考虑石墨形成 SWCNT 时的卷曲效应, 不同方向上的转移积分 γ_{ρ} 不同, 理论上满足下列关系^[16,17]:

$$\gamma_1 = t_0 [1 - b^2 \sin^2 \theta / (8r^2)],$$

$$\gamma_2 = t_0 [1 - b^2 (\sin \theta + \sqrt{3} \cos \theta)^2 / (32r^2)], \quad (18)$$

$$\gamma_3 = t_0 [1 - b^2 (\sin \theta - \sqrt{3} \cos \theta)^2 / (32r^2)].$$

这里 t_0 为无卷曲时石墨平面的转移积分, 一般取 $t_0 = 2.66$ eV. 手性角 θ 与 SWCNT 指数 (m, n) 满足下列关系:

$$\sin \theta = \sqrt{3}n / (2\sqrt{m^2 + n^2 + mn}), \quad (19)$$

$$\cos \theta = (2m + n) / (2\sqrt{m^2 + n^2 + mn}).$$

SWCNT 半径 r 可表示为

$$r = a \sqrt{m^2 + n^2 + mn} / (2\pi). \quad (20)$$

可以证明, SWCNT 单胞的倒格矢 \mathbf{K}_1 和 \mathbf{K}_2 分别为^[14]

$$\mathbf{K}_1 = \frac{2\pi}{2a(m^2 + n^2 + mn)} \times (\sqrt{3}(m+n), m-n), \quad (21)$$

$$\mathbf{K}_2 = \frac{2\pi d_R}{2a(m^2 + n^2 + mn)} \times \left(-\frac{m-n}{\sqrt{3}}, (m+n) \right). \quad (22)$$

这里 d_R 是 $(2n+m)$ 和 $(2m+n)$ 的最大公约数, 且满足下列关系^[14]:

$$d_R = \begin{cases} d & (m-n \neq 3Id), \\ 3d & (m-n = 3Id), \end{cases} \quad (23)$$

式中 d 是 (m, n) 的最大公约数, I 为任意整数.

利用周期性边界条件

$$\mathbf{k}_x = J\mathbf{K}_1, \quad (24)$$

显然有

$$\mathbf{k} = J\mathbf{K}_1 + k_y \frac{\mathbf{K}_2}{|\mathbf{K}_2|}. \quad (25)$$

这里 J 为能带指数, $J = 1, 2, \dots, N$, 且 $N =$

$2\sqrt{m^2 + n^2 + mn} / d_R$. 将(21)–(25)式代入(17)式,可得扶手椅型 SWCNT 的能量色散关系 $E_J(k_y)$ 为

$$E_J(k_y) = \pm \left[\sum_{\rho=1}^3 \gamma_{\rho}^2 + 2\gamma_1\gamma_2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x - \frac{a}{2}k_y\right) + 2\gamma_1\gamma_3 \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x + \frac{a}{2}k_y\right) + 2\gamma_2\gamma_3 \cos(ak_y) \right]^{1/2}. \quad (26)$$

同样可得锯齿型 SWCNT 的能量色散关系 $E_J(k_y)$ 为

$$E_J(k_y) = \pm \left[\sum_{\rho=1}^3 \gamma_{\rho}^2 + 2\gamma_1\gamma_2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y - \frac{a}{2}k_x\right) + 2\gamma_1\gamma_3 \cos(ak_x) + 2\gamma_2\gamma_3 \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y + \frac{a}{2}k_x\right) \right]^{1/2}. \quad (27)$$

这里

$$k_x = \frac{2\pi J}{\sqrt{m^2 + n^2 + mn}}.$$

因只考虑在第一 Brillouin 区内的情况,故限定 $|k_y| \leq \Gamma W$, 其中 $\Gamma W = |\mathbf{K}_2|/2$, 可求得

$$\Gamma W = \frac{\pi d_R}{\sqrt{m^2 + n^2 + mn}}.$$

对于未计卷曲效应的金属 SWCNT,最低导带与 Fermi 能级 $E_F = 0$ 相交,所以根据能量色散关系很容易解出最低导带的能带指数 J . 对于未计卷曲效应的 $m = n$ 的扶手椅型 SWCNT(金属管),可以确定最低导带指数满足 $J = m$;对于未计卷曲效应的金属锯齿型 SWCNT,最低导带指数满足 $J = 2m/3$ 或 $J = 4m/3$;而对于未计卷曲效应的半导体锯齿型 SWCNT, $J = 2m/3$ 或 $J = 4m/3$ 都不是整数,此时满足 $J = 2m/3 \pm 1/3$ 或 $J = 4m/3 \pm 1/3$ 为整数的子能带则为最靠近费米能级的子能带.

3. SWCNT 的电子速度及有效质量

在固体物理中,晶体的电子速度及有效质量分别定义为

$$v_J(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_J(\mathbf{k}), \quad (28)$$

$$(m^*)^{-1}_J = \frac{1}{\hbar^2} \nabla_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} E_J(\mathbf{k}). \quad (29)$$

(29)式为张量表示.在一维情况下,(28),(29)式

退化为

$$v_J(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_J(k)}{dk}, \quad (30)$$

$$(m^*)^{-1}_J = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E_J(k)}{dk^2}, \quad (31)$$

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

3.1. 扶手椅型 SWCNT 的电子速度和有效质量

扶手椅型 SWCNT(m, m)在未计卷曲效应前为理想金属管.对未计曲卷效应和计入卷曲效应两种情况,我们分别利用(30)式计算出扶手椅型 SWCNT 最低导带的电子速度 v 随波矢 k_y 的变化关系,结果如图2所示.从图2可以看出,对于管径不同的各种扶手椅型 SWCNT,在不计卷曲效应时电子速度随波矢的变化规律完全相同,而计入卷曲效应后电子速度随波矢的变化规律存在一定的差异.各

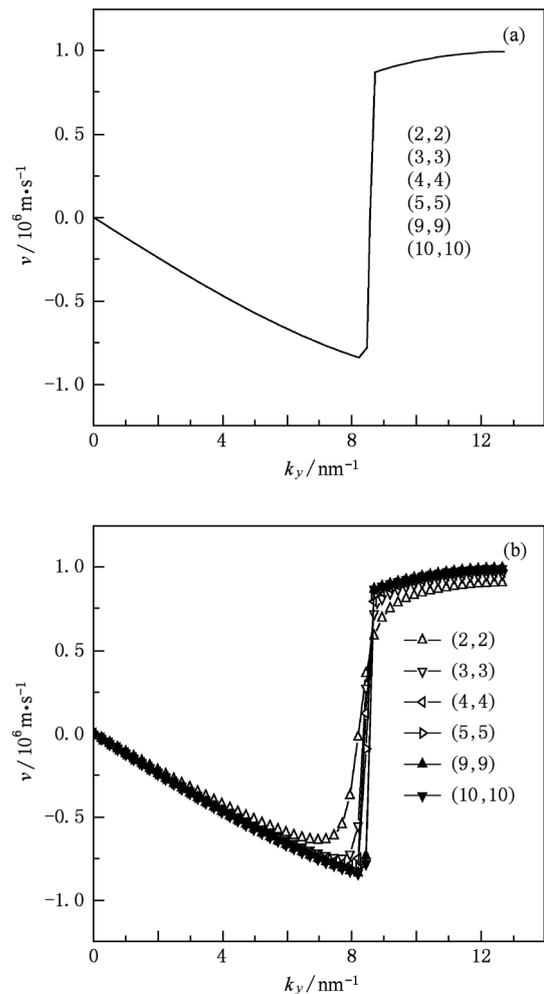


图2 扶手椅型 SWCNT 最低导带的电子速度 v 随波矢 k_y 的变化 (a)未计卷曲效应,(b)计入卷曲效应

种扶手椅型 SWCNT 最低导带的平均电子速度 v_{mean} 列于表 1. 由表 1 可知, 随着管径的增大, 卷曲效应对电子速度的影响逐渐减小, 对于 $m > 4$ 的扶手椅

型 SWCNT (直径 $d \geq 0.55$ nm), 卷曲效应对电子速度的影响基本可以忽略 (其电子速度相对改变量不超过 2%).

表 1 扶手椅型 SWCNT 最低导带的平均电子速度 v_{mean} (单位为 10^6 m/s)

SWCNT	(2,2)	(3,3)	(4,4)	(5,5)	(6,6)	(9,9)	(10,10)
v_{mean} (未计卷曲效应)	0.9971	0.9971	0.9971	0.9971	0.9971	0.9971	0.9971
v_{mean} (计入卷曲效应)	0.9064	0.9581	0.9754	0.9833	0.9875	0.9929	0.9937
v_{mean} 相对改变量	-9.09%	-3.91%	-2.00%	-1.38%	-0.96%	-0.42%	-0.34%

在未计卷曲效应和计入卷曲效应的两种情况下, 我们利用 (31) 式分别计算了各种扶手椅型 SWCNT 最低导带的电子有效质量 m^* 随波矢 k_y 的变化关系, 结果如图 3 所示. 从图 3 可以看出: 在不计卷曲效应时, 不同扶手椅型 SWCNT (m 取不同值) 的电子有效质量随波矢的变化规律完全相同, 其平均有效质量 $m_{\text{mean}}^* = 2.795 \times 10^{-31}$ kg.

计入卷曲效应后, 管径不同的扶手椅型 SWCNT, 其电子有效质量随波矢的变化规律存在一定的差异. 通过计算得到的各种扶手椅型 SWCNT 的最低导带的平均电子有效质量 m_{mean}^* 列于表 2. 由表 2 可知, 对于 $m \geq 4$ 的扶手椅型 SWCNT, 卷曲效应对电子有效质量的影响很小 (其相对改变量不超过 2%).

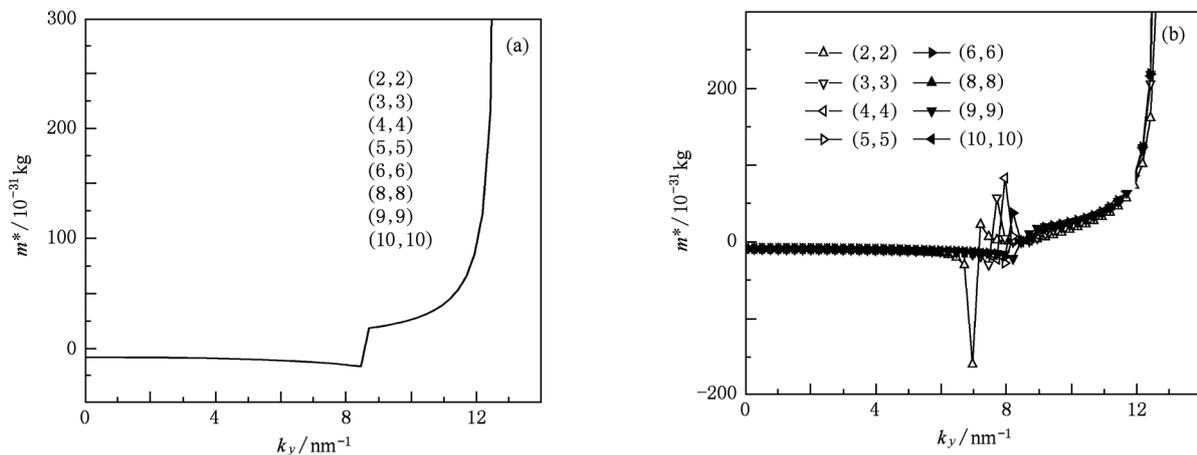


图 3 扶手椅型 SWCNT 最低导带的电子有效质量 m^* 随波矢 k_y 的变化 (a) 未计卷曲效应, (b) 计入卷曲效应

表 2 扶手椅型 SWCNT 最低导带电子的平均有效质量 m_{mean}^* (单位为 10^{-31} kg)

SWCNT	(2,2)	(3,3)	(4,4)	(5,5)	(6,6)	(8,8)	(9,9)	(10,10)
m_{mean}^* (未计卷曲效应)	27.9589	27.9589	27.9589	27.9589	27.9589	27.9589	27.9589	27.9589
m_{mean}^* (计入卷曲效应)	10.5294	23.5182	27.7406	27.7837	27.8707	27.8050	28.0156	28.1219
m_{mean}^* 相对改变量	-62.34%	-15.88%	-0.78%	-0.63%	-0.32%	-0.55%	0.20%	0.58%

综上所述可知, 卷曲效应对小管径 ($m < 4$) 扶手椅型 SWCNT 的电子速度及有效质量有明显影响, 但对管径稍大的扶手椅型 SWCNT ($m \geq 4$, 直径 $d \geq 0.55$ nm) 的电子速度及有效质量的影响很小 (其相对改变量不超过 2%), 所以卷曲效应对管径稍大的扶手椅型 SWCNT 的电子结构及输运性质的影响可以忽略.

3.2. 金属锯齿型 SWCNT 的电子速度和有效质量

对于锯齿型 SWCNT ($m, 0$), 在不计卷曲效应时若 $m = 3l$ (l 为整数), 则为金属管, 否则为半导体管. 我们利用 (30) 式计算出各种不计卷曲效应的金属锯齿型 SWCNT 最低导带的电子速度 v 随波矢 k_y 的变化关系, 结果如图 4(a) 所示. 从图 4(a) 可以看

出,对于管径不相同的金属锯齿型 SWCNT,电子速度随波矢变化规律完全相同,平均电子速度 $v_{\text{mean}} = 0.7759 \times 10^5 \text{ m/s}$. 计入卷曲效应后,不同管径的金属锯齿型 SWCNT 最低导带的电子速度 v 随波矢 k_y 的变化关系如 4(b) 所示,平均电子速度如

表 3 所列. 从表 3 可知,卷曲效应对电子速度的影响随管径的增大而减小,对于 $m \geq 6$ 的金属锯齿型 SWCNT(直径 $d \geq 0.475 \text{ nm}$),卷曲效应对电子速度的影响几乎可以忽略(其相对改变量不超过 0.4%).

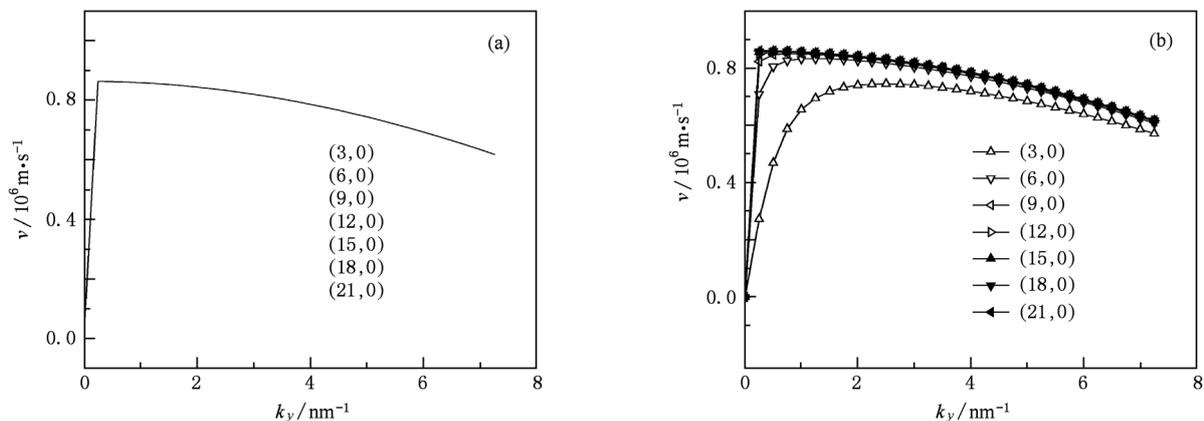


图 4 金属锯齿型 SWCNT 最低导带的电子速度 v 随波矢 k_y 的变化 (a) 未计卷曲效应,(b) 计入卷曲效应

表 3 金属锯齿型 SWCNT 最低导带的平均电子速度 v_{mean} (单位为 10^6 m/s)

SWCNT	(3,0)	(6,0)	(9,0)	(12,0)	(15,0)	(18,0)	(21,0)
v_{mean} (未计卷曲效应)	0.7759	0.7759	0.7759	0.7759	0.7759	0.7759	0.7759
v_{mean} (计入卷曲效应)	0.6611	0.7736	0.7743	0.7748	0.7645	0.7718	0.7753
v_{mean} 相对改变量	-14.79%	-0.31%	-0.18%	-0.15%	-0.14%	-0.52%	-0.07%

利用(31)式,我们计算得出各种金属锯齿型 SWCNT 最低导带的电子有效质量 m^* 随波矢 k_y 的变化关系,结果如图 5 所示. 由图 5(a) 可以看出,在不计卷曲效应时,电子有效质量随波矢的变化规律完全相同,其平均有效质量 $m_{\text{mean}}^* = -5.736 \times 10^{-30} \text{ kg}$. 计入卷曲效应后,不同管径的金属锯齿型

SWCNT 最低导带的电子有效质量 m^* 随波矢 k_y 的变化关系如图 5(b) 所示. 平均电子有效质量如表 4 所列. 从表 4 可知:卷曲效应对金属锯齿型 SWCNT 电子有效质量的影响是非常明显的,即使管径较大的 SWCNT,如(12,0)管(直径 $d = 0.951 \text{ nm}$),其平均电子有效质量的相对改变量也可达 -39.09%.

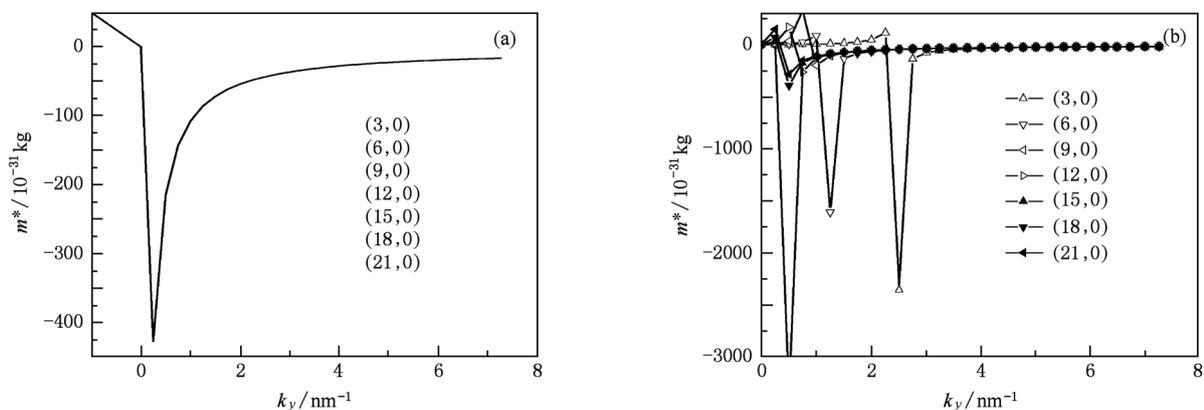


图 5 金属锯齿型 SWCNT 最低导带电子有效质量 m^* 随波矢 k_y 的变化 (a) 未计卷曲效应,(b) 计入卷曲效应

表4 金属锯齿型 SWCNT 最低导带的平均电子有效质量 m_{mean}^* (单位为 10^{-31} kg)

SWCNT	(3,0)	(6,0)	(9,0)	(12,0)	(15,0)	(18,0)	(21,0)
m_{mean}^* (未计卷曲效应)	-57.3670	-57.3670	-57.3670	-57.3670	-57.3670	-57.3670	-57.3670
m_{mean}^* (计入卷曲效应)	-94.1148	-78.3691	-22.9914	-22.9914	-34.9445	-18.5879	-21.8930
m_{mean}^* 相对改变量	64.06%	36.61%	-59.92%	-59.92%	-39.09%	-67.59%	-61.83%

总之,卷曲效应对金属锯齿型 SWCNT 的有效质量的影响较大,进而对输运性质的影响也较大,即使对管径较大(直径 $d > 0.951$ nm)的管,卷曲效应也不能忽略。

3.3. 半导体锯齿型 SWCNT 的电子速度和有效质量

利用(30)式,计算得出的各种半导体锯齿型 SWCNT 在不计卷曲效应和计入卷曲效应时的最低

导带电子速度 v 随波矢 k_y 的变化关系如图6所示。从图6可以明显看出:即使计入卷曲效应,对于 $(3l+1,0)$ 管,最大电子速度几乎不变,且比 $(3l-1,0)$ 管最大电子速度大。对于 $(3l-1,0)$ 管,随管径的增加(即 m 增大),最大电子速度增大。半导体锯齿型 SWCNT 的平均电子速度如表5所列。从表5可知,无论管径的大小,卷曲效应对最低导带的电子速度的影响都是非常小。

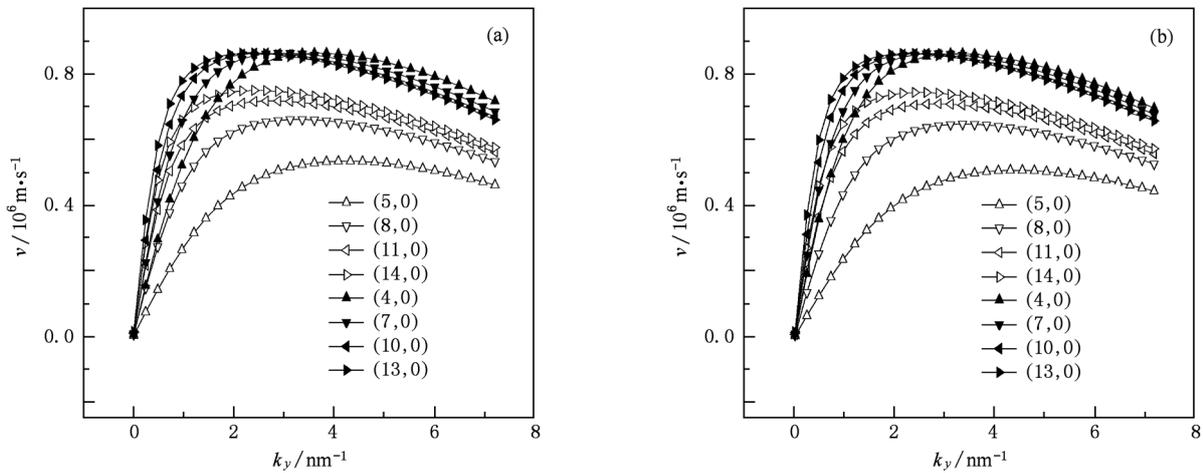


图6 半导体锯齿型 SWCNT 最低导带的电子速度 v 随波矢 k_y 的变化 (a) 未计卷曲效应, (b) 计入卷曲效应

表5 半导体锯齿型 SWCNT 最低导带的平均电子速度 v_{mean} (单位为 10^6 m/s)

SWCNT	(5,0)	(8,0)	(11,0)	(14,0)	(4,0)	(7,0)	(10,0)	(13,0)
v_{mean} (未计卷曲效应)	0.4296	0.5549	0.6125	0.6454	0.7136	0.7319	0.7408	0.7459
v_{mean} (计入卷曲效应)	0.4045	0.5471	0.6050	0.6405	0.7252	0.7357	0.7426	0.7470
v_{mean} 相对改变量	-5.84%	-1.45%	-1.23%	-0.76%	1.62%	0.52%	0.25%	0.15%

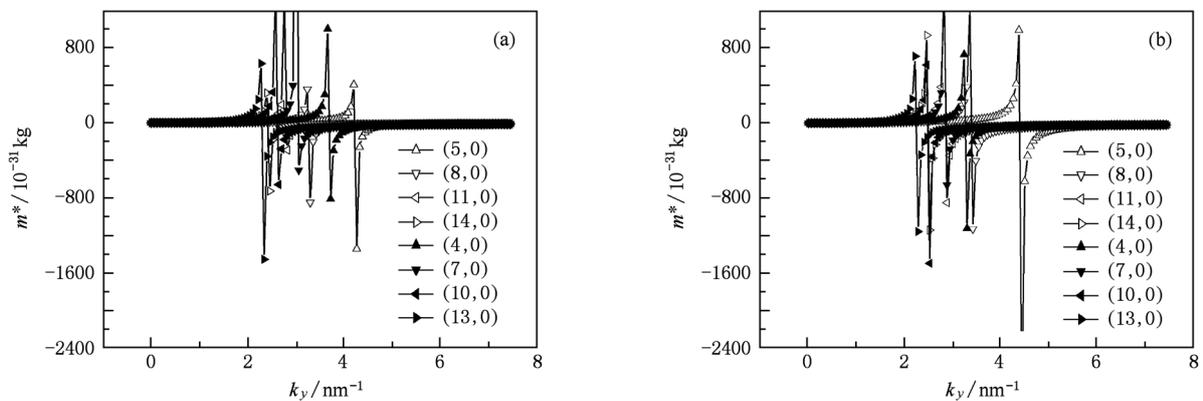


图7 半导体锯齿型 SWCNT 最低导带的电子有效质量 m^* 随波矢 k_y 的变化 (a) 未计卷曲效应, (b) 计入卷曲效应

利用(31)式,我们计算得出各种半导体锯齿型 SWCNT 最低导带的电子有效质量 m^* 随波矢 k_y 的变化关系,结果如图 7 所示.从图 7 可以看出:即使不计卷曲效应,不同管径的半导体锯齿型 SWCNT 的电子有效质量 m^* 随波矢 k_y 的变化规律也有明显区别,这与金属锯齿型 SWCNT 迥然不同.考虑卷

曲效应后,电子有效质量随波矢的变化规律与不计卷曲效应时基本相同.平均电子有效质量如表 6 所列.从表 6 可以看出,对于所有半导体锯齿型 SWCNT,卷曲效应对有效质量的影响都很小,其相对改变量不超过 2%.

简言之,卷曲效应对半导体锯齿型 SWCNT 电

表 6 半导体锯齿型 SWCNT 最低导带的平均电子有效质量 m_{mean}^* (单位为 10^{-31}kg)

SWCNT	(5,0)	(8,0)	(11,0)	(14,0)	(4,0)	(7,0)	(10,0)	(13,0)
m_{mean}^* (未计卷曲效应)	-27.25	-11.19	-8.406	-18.89	-13.74	-5.017	-22.89	-20.50
m_{mean}^* (计入卷曲效应)	-26.99	-11.04	-8.254	-18.63	-13.60	-4.922	-22.64	-20.23
m_{mean}^* 相对改变量	-0.93%	-1.35%	-1.82%	-1.37%	1.02%	1.89%	1.13%	0.29%

子结构及输运特性的影响非常小.

4. 结 论

本文利用计入卷曲效应的 SWCNT 能量色散关系,计算得到了其电子速度和有效质量,并与不计卷曲效应的情况进行了比较,重点讨论 SWCNT 种类与卷曲效应的关系.分析表明:对于扶手椅型 SWCNT(m, m),管径较小时卷曲效应对电子速度及有效质量影响较大,管径较大(直径 $d \geq 0.55\text{nm}$)时(对应 $m = 4$)卷曲效应基本可忽略(电子速度及有效质量的改变量不超过 2%);对于金属锯齿型 SWCNT,其卷曲效应对有效质量的影响非常明显,

即使对管径较大($d > 0.951\text{nm}$)的管,卷曲效应也不能忽略(电子平均有效质量的相对改变量可达 -39.09%);对于锯齿型半导体 SWCNT,其卷曲效应对电子速度及有效质量影响都较小.由此可以推断,卷曲效应对 SWCNT 电子结构及低偏压输运特性影响最大的是金属锯齿型 SWCNT,其次是扶手椅型 SWCNT,影响最不明显的是半导体锯齿型 SWCNT.由此我们就不难理解实验测量及密度泛函方法得出的重要结论:小管径的扶手椅型 SWCNT 是半导体型的,金属锯齿型 SWCNT 是准金属型的,而非真金属型的.从本文的研究结果可知,这是因它们的电子结构特性被卷曲效应所调制.

- [1] Long M Q, Wang L L 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 233512
- [2] Fan Z Q, Chen K Q, Wan Q, Zou B S, Duan W H, Shuani Z 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 263304
- [3] Fan Z Q, Chen K Q 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 053509
- [4] 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]
- [5] Li H H, Li Y D, Wang C K 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1239 (in Chinese) [李红海,李英德,王传奎 2002 物理学报 51 1239]
- [6] Deng X Q, Zhou J C, Zhang Z H 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2714 (in Chinese) [邓小清,周继承,张振华 2010 物理学报 59 2714]
- [7] Deng X Q, Zhou J C, Zhang Z H, Tang G P, Qiu M 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 103113
- [8] Deng X Q, Zhou J C, Zhang Z H, Qiu M, Tang G P 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 163109
- [9] Pan J B, Zhang Z H, Deng X Q, Qiu M, Guo C 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 203104
- [10] Pan J B, Zhang Z H, Deng X Q, Qiu M, Guo C 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 013503
- [11] Zhang Z H, Deng X Q, Tan X Q, Qiu M, Pan J B 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 183105
- [12] Zhang Z H, Yang Z, Yuan J H, Zhang H, Deng X Q, Qiu M 2008 *J. Chem. Phys.* **129** 094702
- [13] Zhang Z H, Qiu M, Zhang H, Deng X Q 2009 *J. Chem. Phys.* **130** 184703
- [14] Saito R, Dresselhaus G, Dresselhaus M S 1998 *Physical Properties of Carbon Nanotubes* (London: Imperial College Press) pp35—136
- [15] Xie X D, Lu D 1998 *Energy Band Theory of Solids* (Shanghai: Fudan University Press) pp27,28
- [16] Chen H B, Xu N, Ding J W 2008 *Solid State Commun.* **146** 12
- [17] Shyu F L 2010 *J. Phys. : Condens. Matter* **22** 7156

Effects of curvature on the electronic structures of single-walled carbon nanotubes^{*}

Qin Wei Zhang Zhen-Hua[†] Liu Xin-Hai

(School of Physics and Electronic Science, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410004, China)

(Received 26 February 2011; revised manuscript received 30 June 2011)

Abstract

Based on the energy dispersion relation involving curvature effects for the single-walled carbon nanotube (SWCNT), the electronic velocity and the effective mass of the lowest conduction band for the SWCNT are computed and they are compared with the results without consideration of the curvature effects. The analysis shows that the influences of the curvature effect on the electronic velocity and effective mass depend on type of SWCNT, that is, the metallic zigzag-SWCNT is most sensitive to curvature effect, armchair-SWCNT is second most sensitive to curvature effect, and the semiconducting zigzag-SWCNT is poorly sensitive to curvature effect. These findings suggest that curvature effects have the largest effect on the electronic structure and the low-bias transport behaviors of the metallic zigzag-SWCNT, a moderate effect on those of the armchair-SWCNT, and the smallest effect on those of the semiconducting zigzag-SWCNT, which are in good agreement with experimental measurements and the calculated results from the density-functional theory.

Keywords: single-walled carbon nanotube, curvature effect, electronic velocity, electronic effective mass

PACS: 73.22.-f, 73.63.-b, 73.23.-b

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61071015, 60771059).

[†] Corresponding author. E-mail: cscuzzh@163.com