

外加轴向磁场下碳纳米管场效应晶体管的电学性质*

刘 红 印海建

(南京师范大学物理科学与技术学院, 南京 210097)
(2008 年 6 月 25 日收到, 2008 年 11 月 20 日收到修改稿)

在紧束缚理论的基础上推导出轴向磁场下碳纳米管的能带公式, 研究外加磁场下碳纳米管场效应晶体管的电学特性. 说明磁场可使碳管的导电性质在金属型和半导体型之间转变, 转变的磁场周期为 $0.5\phi_0$. 进一步应用场效应晶体管 Natori 理论模拟计算了外加磁场对碳纳米管场效应晶体管的电流-电压特性的影响, 研究结果显示 zigzag 管和 armchair 管的电流随外电压和磁场都有振荡行为, 而且两类管的振荡行为有明显差别.

关键词: 碳纳米管, 紧束缚理论, 费米能, 能带结构

PACC: 6148, 7125X, 7155, 7360T

1. 引 言

碳纳米管(CNT)是一种纳米微粒, 它是由石墨层卷成的无缝圆柱. 自从 1991 年碳纳米管被发现以来^[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. 我们应用 Natori 电子电导理论^[2]研究碳管作为场效应晶体管的电学性质, 并在前人工作的基础上考虑外加磁场时, 碳纳米管 $I-V$ 特性的变化.

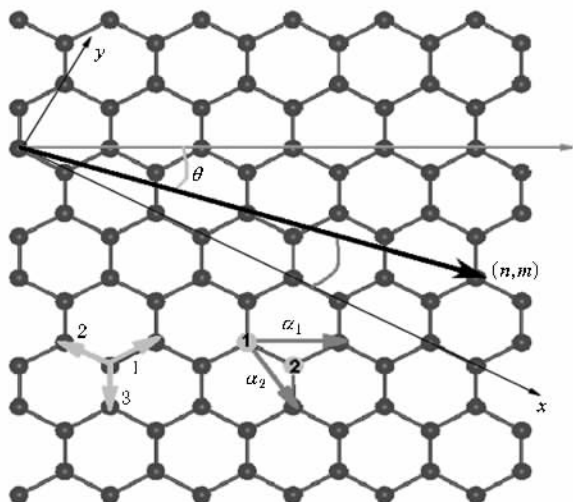


图 1 碳管结构

石墨结构如图 1 所示, 碳管 (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 $|a_1| = |a_2| = a = \sqrt{3}$ 键长) 首尾相重合卷曲而成, 圆周长即为 R 的长度 $c_h a = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}$; 半径 $r = |R|/2\pi = c_h a/2\pi$. 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. $\theta = 0^\circ, 30^\circ$ 的碳管分别称之为 zigzag, armchair 管.

在固定 $x-y$ 坐标系下, 石墨原胞基矢为 $a_1 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}i + \frac{1}{2}j\right)$, $a_2 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}i - \frac{1}{2}j\right)$. 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. 碳管沿管轴方向具有平移对称性, 即周期性. 碳管半径约在 1 nm, 但是管的长度可达到微米量级, 因此碳管是一个准一维材料. 管轴方向的周期长度 L_T ,

$$L_T = \frac{\sqrt{3}ac_h}{\text{gcd}(2n + m, n + 2m)}, \quad (1)$$

式中 gcd 表示括号内两个数的最大公约数.

2. 能带理论和公式推导

下面我们将采用紧束缚的方法推导出在外加轴向磁场情况下碳管的能带公式. 磁场与管轴方向平行, 即与 e_T 方向平行或反平行.

根据规范不变性, 近邻原子 i 和 j 之间的跃迁

* 江苏省自然科学基金(批准号: BK2008427)和教育部博士点基金(批准号: 200803190004)资助的课题.



图 2 轴向外磁场 B 示意图

系数为

$$t_{ij} = t_0 \exp\left(\frac{i2\pi}{\phi_0} \int_i^j \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}\right), \quad (2)$$

其中 $\phi_0 = h/e$, $\mathbf{A} = \mathbf{B} \times \mathbf{R}/2$. 令 $k_H = \phi/\phi_0 = BS/(h/e)$, 其中 B 为磁感应强度, S 为碳管的横截面积.

对于 armchair 管, 根据图 1 可知, 三个最近邻的矢量对应的跃迁系数为

$$\begin{aligned} t_1 &= t_3 = t_0 e^{ik_H \pi (\sqrt{3} c_h)}, \\ t_2 &= t_0 e^{-i2k_H \pi (\sqrt{3} c_h)}. \end{aligned} \quad (3)$$

得到磁场穿过碳管横截面的磁通量为 $k_H \phi_0$ 时的能带公式如下:

$$\begin{aligned} E^2 &= 3t_0^2 + 4t_0^2 \cos\left[\frac{\sqrt{3}n}{2c_h} ak_T\right] \\ &\times \cos\left[\frac{\pi(l+k_H)}{c_h^2} 3n + \frac{\sqrt{3}k_H \pi}{c_h}\right] \\ &+ 2t_0^2 \cos\left[\frac{\sqrt{3}n}{c_h} ak_T\right]. \end{aligned} \quad (4)$$

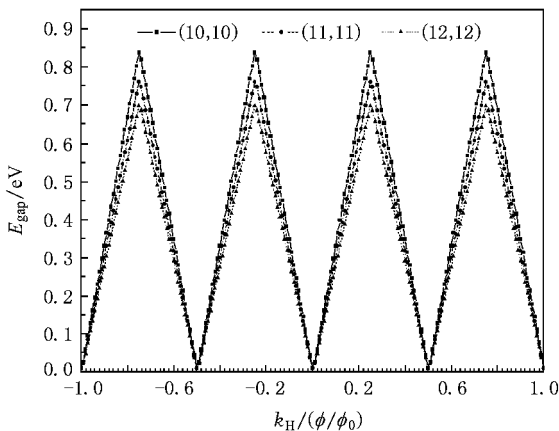


图 3 碳管 (10,10) (11,11) 和 (12,12) 能隙 gap 随磁通量变化图

对于 armchair 型碳管, 在外加轴向磁场情况下能带出现了微小简并分裂现象. 费米波矢总是在 $k_T^F = \pm \frac{2\pi}{3T}$, $k_c^F = \frac{2\pi}{c_h a} (l + k_H)$, $(l = \frac{N_h}{2})$, 其中在 $k_H = \pm i/2 (i = 0, 1, 2, \dots)$ 时碳管总为金属性的.

对于 zigzag 管, 三个最近邻的矢量对应的跃迁

系数为

$$\begin{aligned} t_1 &= e^{ik_H \pi c_h}, \\ t_2 &= t_0 e^{-ik_H \pi c_h}, \\ t_3 &= t_0, \end{aligned} \quad (5)$$

能带公式为

$$\begin{aligned} E^2 &= t_0^2 + 4t_0^2 \cos\left(\frac{\pi(l+k_H)}{c_h^2} n + \frac{k_H \pi}{c_h}\right) \\ &\times \left[\cos\left(\frac{\pi(l+k_H)}{c_h^2} n + \frac{k_H \pi}{c_h}\right) \right. \\ &\left. + \cos\left(\frac{\sqrt{3}n}{2c_h} ak_T\right) \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

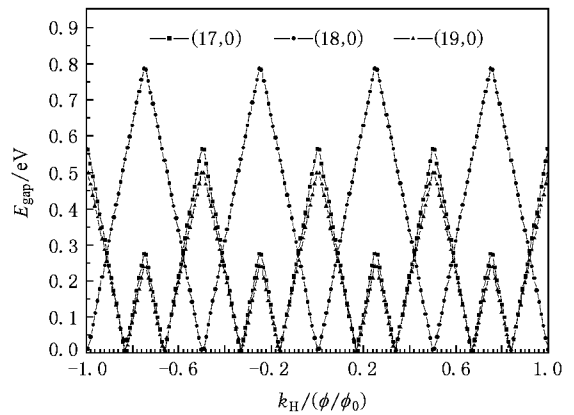


图 4 碳管 (19,0) (18,0) 和 (17,0) 能隙随磁通量变化图

对于 zigzag 型碳管, 外加轴向磁场情况下 Fermi 能附近的两个能带出现明显分立现象. 费米波矢所在位置

$$\begin{aligned} k_T^F &= 0, \quad k_c^F = \frac{2\pi}{c_h a} (l + k_H), \\ l &= \begin{cases} N_h/3, & n = 3s + 0, \\ (N_h + 1)/3, & n = 3s + 1, \\ (2N_h + 1)/3, & n = 3s + 2, \end{cases} \end{aligned}$$

其中在

$$k_H = \begin{cases} \pm i/2 (i = 0, 1, 2, \dots), & n = 3s + 0, \\ [-0.16 \pm i/2], & n = 3s + 1, \\ [-0.16 \pm i/2], & n = 3s + 2, \end{cases}$$

时碳管均为金属性的.

由图 3 和图 4 可知, 随着磁场 B 的增加, 原金属性碳管由金属性转化为半导体性再转化到金属性一直以 $0.5\phi_0$ 为周期变化, 原半导体性碳管则由半导体性转化到金属性再转化到半导体性, 也是以 $0.5\phi_0$ 为周期变化. 对于 zigzag 管不同的 $n - m$ 差值, 能隙的变化幅度不同, 当 $n - m$ 为 3 的倍数时,

能隙变化幅度较大 ; 其中 (18, 0) 管的变化曲线与 armchair 管相同 . 而对于 armchair 管 , 当 n 是 3 的倍数时 , 能隙变化幅度相对于其他两种类型反而是较小的 .

3. Natori 电子电导理论及计算结果

由于 Tans 小组证实单壁 CN 中电子的局域化长度可以达到微米 (μm) 以上^[3] , Bockrath 小组证实单壁纳米管是好的量子导线^[4] . 在碳管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的恒定 . 图 5 是一维碳纳米管场效应管中电子流动通道的侧面图 , 它描绘了源极和漏极的势能分布情况 . 我们采用 Natori 理论 , 电流可表达为大量一维电子流通道构成的集合^[2,5] , 表达式如下 :

$$I = q \sum_{\text{subband}(i)} \int_{E_{\text{imin}}}^{E_{\text{imax}}} \{vD(E)\}(\mu_{\text{FS}}, E) \times [1 - f(\mu_{\text{FD}}, E)]T(E) dE - q \sum_{\text{subband}(i)} \int_{E_{\text{imin}}}^{E_{\text{imax}}} \{vD(E)\}(\mu_{\text{FD}}, E) \times [1 - f(\mu_{\text{FS}}, E)]T(E) dE, \quad (7)$$

其中 v 和 $D(E)$ 分别表示由源极向漏极的电荷速度和态密度 , 而 v 和 $D(E)$ 则表示由漏极向源极的电荷速度和态密度 .

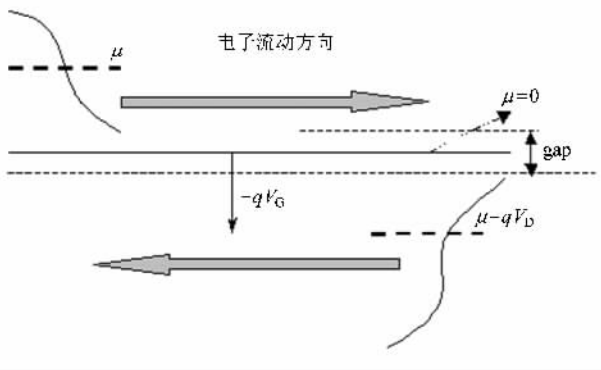


图 5 电子流动通道的侧面图

这是一个具有普遍意义的方程 , 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 $T(E) = 1$. 一维的情形下 , v 和 $D(E)$ 的乘积是一个常数 $1/(\pi\hbar)$, E_{imin} , E_{imax} 为不同波矢量方向每个子带的极值 , μ_{FS} 和 μ_{FD} 是源极和漏极的化学势 . 于是上面的方程就可以简写为

$$I = \frac{q}{\pi\hbar} \sum_{\text{subband}(i)} \int_{E_{\text{imin}}}^{E_{\text{imax}}} \{f(\mu_{\text{FS}}, E) [1 - f(\mu_{\text{FD}}, E)]\} dE - \frac{q}{\pi\hbar} \sum_{\text{subband}(i)} \int_{E_{\text{imin}}}^{E_{\text{imax}}} \{f(\mu_{\text{FD}}, E) [1 - f(\mu_{\text{FS}}, E)]\} dE. \quad (8)$$

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解决 . 在下面的计算中 , 我们用 μ 来代替 μ_{FS} , 且令 $\mu_{\text{FD}} = \mu - qV_D$, 而对于门电压 V_G 来自两个方面 : 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引起的 ,

$$V_G - V_{\text{FB}} = \frac{\mu - \mu_0}{q} + \frac{1}{C_i} \frac{Q}{q}, \quad (9)$$

其中 V_{FB} 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 , 与能隙的中心相近 , 在这里我们设定 $V_{\text{FB}} = 0$. 因此有

$$C_i [(V_G - V_{\text{FB}}) - (\mu - \mu_0)/q] = 2q \sum_i \left[\int_{E_{\text{imin}}^+}^{E_{\text{imax}}^+} D_{i+}(E) f(\mu, E) dE + \int_{E_{\text{imin}}^-}^{E_{\text{imax}}^-} D_{i-}(E) f(\mu - qV_D, E) dE \right], \quad (10)$$

这里电容可以看作是由一个平面和一个圆柱组成 ,

$$C_i = \frac{2\pi\epsilon}{\ln \frac{\sqrt{t+d} + \sqrt{t}}{\sqrt{t+d} - \sqrt{t}}}, \quad (11)$$

其中 d 为碳管的直径 , t 是碳管与基底的距离 , 取为 2 nm .

由 (10) 式自洽求出 μ 值 , 然后把它代入方程 (8) 中 , 就可以计算电流 I_D . 没有外磁场时 , 对于 armchair 型碳管 (n, n) 和 zigzag 型碳管 ($n, 0$) , 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 增大及半径的增大 , 参与导电的子能带的数目增加 , 能参与导电的电子增多 (详细结论参见文献 [5,6]) .

有外加磁场时 , 在 V_G 和 V_D 相同时 , 研究电流的差值 $\Delta I = I_{k_H} - I_0$ 随磁场和外电压的关系 . 对于 zigzag 型碳管 ($n, 0$) 和 armchair 管 , 图 6 和图 7 中 ΔI 表示为碳管在加轴向磁场 $k_H = 0.7$ 与不加磁场 $k_H = 0$ 时两者电流差值 , 即 $\Delta I = I_{0.7} - I_0$. 门电压 V_G 一定 (或漏电压 V_D 一定) , 随着漏电压 V_D 增加 (或门电压 V_G 增加) ΔI 都具有一定的振荡性 . 这种振荡

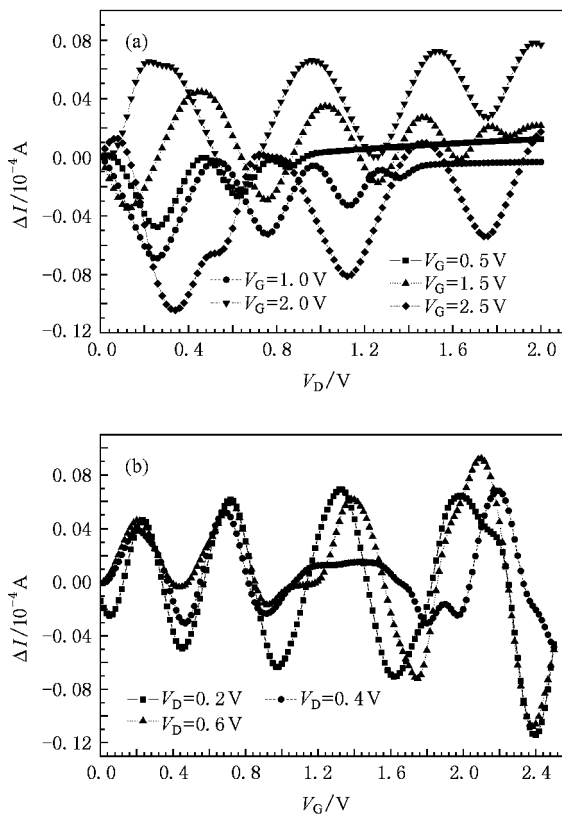


图6 SWNT(19,0) $\Delta I_{0,7}$ 与门电压 V_G 和漏电压 V_D 变化的关系

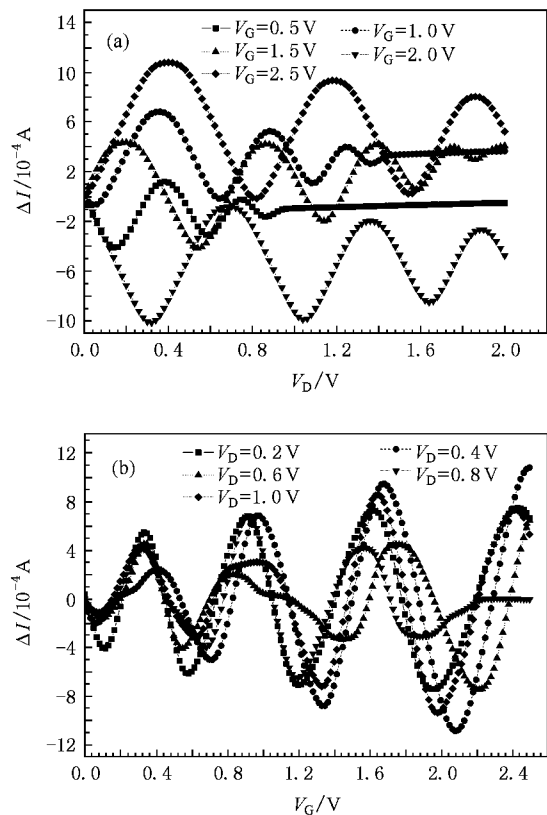


图7 SWNT(10,10) $\Delta I_{0,7}$ 随门电压 V_G 和漏电压 V_D 变化关系

反映出,加入磁场后碳管能带结构发生较大变化,由于磁场的作用,在形成一系列高度简并的 Landaur 能级同时,从能带结构上^[6]我们还看到由跃迁系数不同造成原来结构对称简并性的分裂,使得电子系统能带结构随磁场强度 B 发生变化,产生哈斯-阿尔芬效应^[7],因而电导率不仅随磁场变化而且随外加电压都呈现出振荡.不同门电压 V_G , ΔI 随 V_D 振荡的峰值不同而且峰位相差较大;不同门电压 V_D , ΔI 随 V_G 振荡的峰值虽不同但峰位基本相同.这是因为电流主要是由平衡化学势附近的能带电子提供,门电压 V_G 控制平衡化学势 μ 的位置,从而影响电流,峰的位置和高度主要反映出化学势 μ 附近带的信息,因此虽然漏电压变化,但峰的位置基本保持不变.

图8和图9描绘了在 $V_G = 1.5 \text{ V}$, $V_D = 0.5 \text{ V}$ 时,碳管电流 I 随磁通量的变化图.结果显示电流 I 随着磁通量改变发生的变化是周期性的,周期为 $0.5\phi_0$.对于 zigzag 管,由图8可看出, n 的取值有三种情形:对于 $n = 3s$ 即为3的倍数时,图8中(18,0)磁场加入电流是增加的,并在峰值处有一较宽的平台,而 $n = 3s + 1$ 的(19,0)却恰好相反(19,0)碳

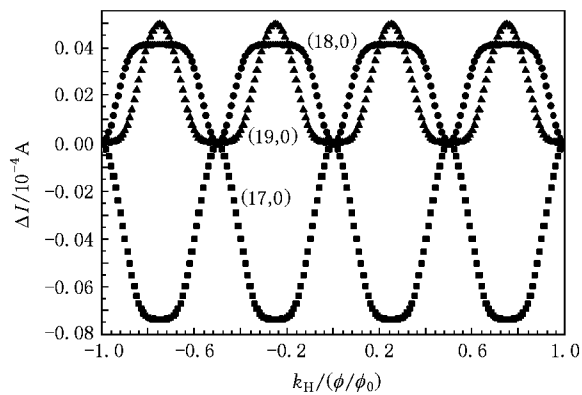


图8 $V_G = 1.5 \text{ V}$ 和 $V_D = 0.5 \text{ V}$ 时(19,0)(18,0)和(17,0)中电流随磁通量变化

管的峰比较尖锐,而谷底平缓,对于 $n = 3s + 2$ 的(17,0)管来说磁场导致电流变小,峰的位置恰好在(19,0)和(18,0)谷底的位置.对于 armchair 型碳管 (n, n) , n 的取值也有三种情形:对于 $n = 3s$ 即为3的倍数时,图9中(12,0)和 $n = 3s + 1$ 的(10,10),磁场加入电流是减小,并在谷底处有一较宽的平台,两个的峰位和峰的高度相同,只是(10,10)的峰谷比(12,12)低. $n = 3s + 2$ 的(11,11)碳管与(10,10)和

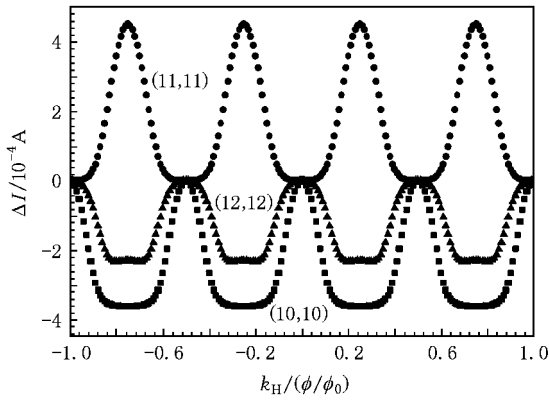


图9 $V_G = 1.5 \text{ V}$ 和 $V_D = 0.5 \text{ V}$ 时 (10,10) (11,11) 和 (12,12) 电流随磁通量变化图

(12,12) 相反, 磁场加入电流是增加的, 峰的位置恰好在 (12,12) 和 (10,10) 谷底的位置, 谷底与 (12,12) 和 (10,10) 的峰相交。

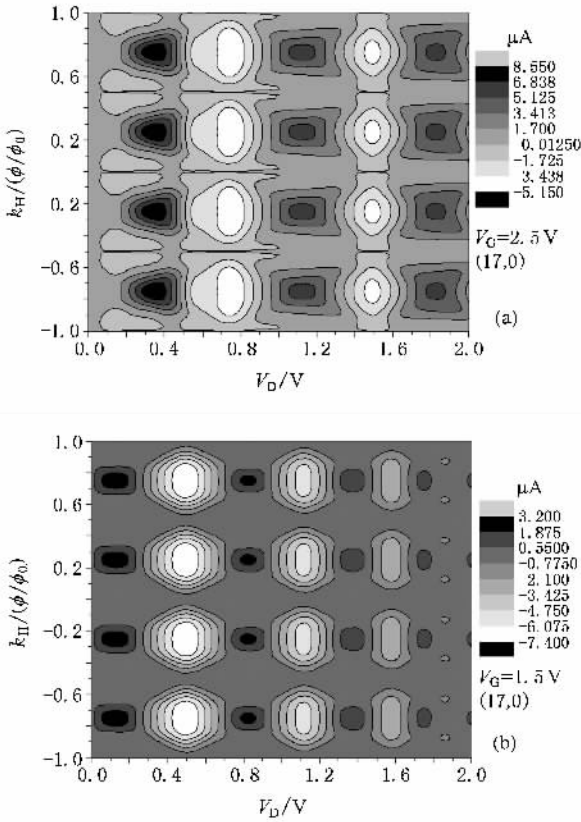


图10 碳管(17,0)分别在 $V_G = 2.5 \text{ V}$ 和 $V_G = 1.5 \text{ V}$ 时 ΔI 关于 V_D 和 k_H 的二维图

如果 V_G 和 V_D 取不同值时, 碳管电流 I 随磁通量的变化将不同于图 8 和图 9. 为此我们将 V_G 取某

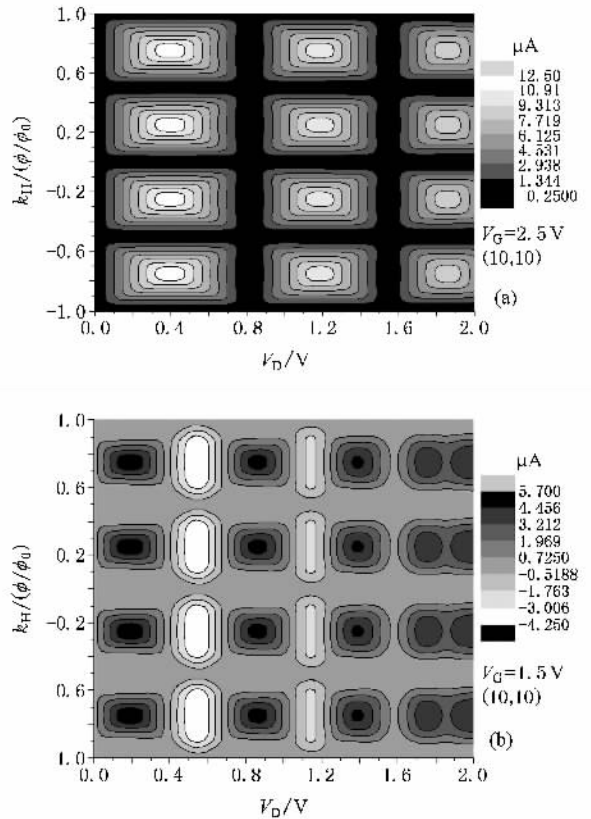


图11 碳管(10,10)分别在 $V_G = 2.5 \text{ V}$ 和 $V_G = 1.5 \text{ V}$ 时 ΔI 关于 V_D 和 k_H 的二维图

些定值, 绘出电流 I 随磁通量和 V_D 变化的二维投影图. 图 10 和图 11 描述了 (17,0) 和 (10,10) 碳管分别在 $V_G = 1.5 \text{ V}$ 和 $V_G = 2.5 \text{ V}$ 时 ΔI 关于 V_D 和 k_H 的二维图, 其中 ΔI 采用了灰度来表示它的值. 由此图也可看出, V_G, V_D 一定, ΔI 随着磁通量变化是具有一定的周期性. V_G, k_H 一定, ΔI 随着 V_D 变化也是具有一定的振荡性. zigzag 管和 armchair 管的电导率随外电压和磁场振荡行为有明显差别。

4. 结 论

能带计算结果显示, 禁带宽度随磁场强度的变化周期性地变为零, 说明磁场可改变碳管的导电性质, 在金属型和半导体型之间转变, 转变的磁场周期为 $0.5\phi_0$. 应用 Natori 理论计算理想碳管的电流, zigzag 管和 armchair 管的电流随外电压和磁场都有振荡行为, 进一步计算结果显示两类管的振荡行为有明显差别。

- [1] Iijima S 1991 *Nature* **354** 56
- [2] Natori K 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 034306
- [3] Tans S J , Devoret M H , Dai H *et al* 1997 *Nature* (London) **386** 474
- [4] Bockrath M , Cobden D H , McEuen P L *et al* 1997 *Science* **275** 1922
- [5] Zhao X , Wang Y , Yu Z P 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 1327
- [6] Yin H J 2008 *Documentary for Baster Degree* (Nanjing Normal University) (in Chinese) [印海建 2008 本科毕业论文(南京师范大学)]
- [7] Huang K , Han R Q 2005 *Physics in Solid* (Higher Education Press) (in Chinese) [黄 昆、韩汝琦 2005 固体物理(高等教育出版社)]

Electrical properties of carbon nanotube field-effect transistors in applied axial magnetic field^{*}

Liu Hong Yin Hai-Jian

(*School of Physical Science and Technology , Nanjing Normal University , Nanjing 210097 , China*)

(Received 25 June 2008 ; revised manuscript received 20 November 2008)

Abstract

On the basis of the tight-binding theory , we derived the band structure formula of carbon nanotube field-effect transistors with/without a magnetic field. The results show that the band gap becomes zero periodically with increasing strength of the magnetic field , which indicates that the magnetic field can change the nature of the conductivity of carbon between the metal-type and semiconductor-type with $0.5\phi_0$ for the period. Furthermore , by using Natori theory on the field-effect transistor , we studied the influence of applied magnetic field on the current-voltage characteristics of carbon nanotube field-effect transistors. The results show that in the two types of zigzag and armchair carbon tubes the conductivity oscillates with the voltage and the magnetic field and the oscillation behaviors are obviously different for these two types of carbon nanotubes .

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 Doctorate Foundation of Education Ministry of China (Grant No. 200803190004) .