

Компьютерное моделирование электрических характеристик углеродных нанопечочек

Д.М. Сергеев^{1,2*}, К.Ш. Шункеев¹

¹ Актюбинский региональный государственный университет им. К. Жубанова, пр. Молдагуловой, 34, 030000 Актюбе, Казахстан

² Военный институт Сил воздушной обороны им. Т.Я. Бегельдинова, пр. Молдагуловой, 39, 030012 Актюбе, Казахстан

(Получено 12.08.2017; в отредактированной форме – 15.11.2017; опубликовано online 24.11.2017)

В рамках теории функционала электронной плотности с применением метода неравновесных гриновских функций в приближении локальной плотности исследованы электрические характеристики наноструктур, полученные методом постепенного построчного удаления атомов углерода из графена. Расчет реализован в программе Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab. Рассчитаны спектры пропускания наноструктур при различных значениях напряжения смещения, плотности состояния наноструктур, вольтамперные характеристики и дифференциальная проводимость. Показано, что вольтамперные характеристики рассматриваемых наноструктур имеют участок с отрицательным дифференциальным сопротивлением, возможно обусловленный резонансным туннелированием квазичастиц. Эти же изменения наблюдаются и на dI/dV -характеристике. Полученные результаты могут быть полезными для расчетов новых перспективных электронных приборов нанoeлектроники.

Ключевые слова: Графен, Углеродная атомная цепочка, Наноконтакт, Спектр пропускания, Плотность состояний, Вольтамперная характеристика, Дифференциальная проводимость.

DOI: [10.21272/jnep.9\(6\).06019](https://doi.org/10.21272/jnep.9(6).06019)

PACS numbers: 81.07.Lk, 81.07._b

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время в связи с миниатюризацией электронных компонентов микро- и нанoeлектроники интенсивно исследуются электрофизические свойства различных наноразмерных контактов (см. например [1-3]). В этом плане одним из широко используемых материалов для создания подобных электрических наноконтактов является аллотропная модификация углерода в виде двумерного одноатомного слоя – графен (см. например [4-7]).

В настоящее время активно ведется поиск новых углеродных наноконтактов на основе графена. Особый интерес представляют электрические свойства углеродных атомных цепочек, полученных при расщеплении графена. Из-за отсутствия эффективных способов синтеза многие годы не удавалось экспериментально получить такие нанобъекты. В работе [5] с помощью электронной микроскопии экспериментально удалось получить стабильные и жесткие одномерные углеродные атомные цепочки путем построчного удаления атомов углерода из графена (рис. 1). При этом просвечивающий электронный микроскоп высокого разрешения показывает, что в результате построчного удаления атомов углерода образуется атомная цепочка с шириной в один или два атома. Такие одномерные углеродные цепочки могут быть применены для создания одноатомных и молекулярных электронных устройств нанoeлектроники, а также в качестве соединительного элемента в графеновых наносхемах.

В данной работе предпринята попытка с помощью компьютерного моделирования в программе Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab определить электрические характеристики углеродных нанопечочек, полученных при постепенном удалении атомов углерода из графеновой ленты.

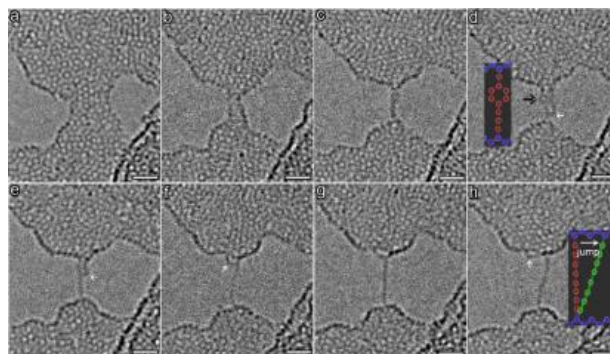


Рис. 1 – Одномерные углеродные цепочки (Scale bar = 1 nm) (взято из [5])

2. ОПИСАНИЕ ОБЪЕКТА И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Геометрия исследуемых наноструктур приведена на рис. 2а-е. Длина графеновых электродов по оси C составляет $\sim 8,525 \text{ \AA}$, а длина центральной области составляет $\sim 28,42 \text{ \AA}$. Для удобства далее рассматриваемые наноразмерные цепочки, полученные построчным удалением атомов углерода из графена, обозначим буквами a, b, c, d, e, как показано на рис. 2. Наноструктуры оптимизированы с помощью потенциалов Brenner [8] и Tersoff_C_2012 [9].

Компьютерное моделирование наноконтакта производилось в рамках теории функционала плотности (DFT – Density Functional Theory) с применением метода неравновесных гриновских функций (NEGF – Non-Equilibrium Green's Functions) в приближении локальной плотности (LDA – local-density approximation) [10].

Моделирование электрических характеристик

* serdau@rambler.ru

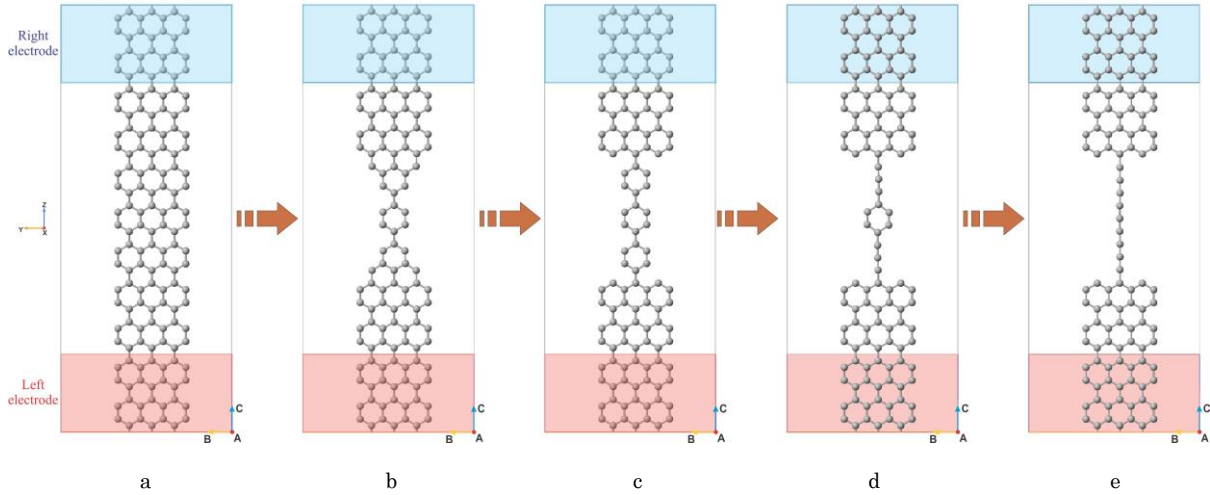


Рис. 2 – Геометрия углеродных нанопечочек, полученных методом построчного удаления атомов углерода из графена

графеновых нанопечочек с помощью программы Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab осуществляется на основе нижеприведенных уравнений (1-13) [11].

Для расчета электрических характеристик рассматриваемых нанопечочек составляется матрица плотности состояний левого и правого электродов:

$$D = D^L + D^R, \quad (1)$$

где D^L , D^R – матрица плотности левого и правого электродов, соответственно.

$$D^L = \int \rho^L(\varepsilon) f\left(\frac{\varepsilon - \mu_L}{k_B T_L}\right) d\varepsilon, \quad (2)$$

где ε – энергия, $\rho^L(\varepsilon)$ – спектральная матрица, $f(\varepsilon)$ – фермиевская функция распределения квазичастиц по энергиям, k_B – постоянная Больцмана, μ_L – электрохимический потенциал, T_L – текущая температура левого электрода. Матрица плотности для правого электрода D^R находится аналогичным уравнением. Спектральная матрица определяется с применением гриновских функций:

$$\rho^L(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} G(\varepsilon) \Gamma^L(\varepsilon) G^\dagger(\varepsilon), \quad (3)$$

где $\Gamma^L(\varepsilon)$ – матрица уширения (функция уширения), $G(\varepsilon)$, $G^\dagger(\varepsilon)$ – запаздывающая и опережающая функции Грина. Матрица уширения левого электрода описывается следующим уравнением:

$$\Gamma^L(\varepsilon) = \frac{1}{i} \left(\Sigma^L - (\Sigma^L)^\dagger \right), \quad (4)$$

$$I(V_L, V_R, T_L, T_R) = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(\varepsilon) \left[f\left(\frac{\varepsilon - \mu_R}{k_B T_R}\right) - f\left(\frac{\varepsilon - \mu_L}{k_B T_L}\right) \right] d\varepsilon, \quad (9)$$

где T_R , T_L – текущие температуры правого и левого электрода, μ_R , μ_L – химические потенциалы правого и левого электрода.

где i – мнимая единица, Σ^L – собственная энергия левого электрода. Аналогичное уравнение существует для матрицы плотности правого электрода. Запаздывающая функция Грина представлена в виде

$$G(\varepsilon) = \frac{1}{(\varepsilon + i\delta_+)S - H}, \quad (5)$$

или

$$G(\varepsilon) = \left[(\varepsilon + i\delta_+)S - H - \Sigma^L(\varepsilon) - \Sigma^R(\varepsilon) \right]^{-1}, \quad (6)$$

где δ_+ – бесконечно малое положительное число, S – матрица интегралов перекрытия, H – гамильтонова матрица.

Для расчета вольтамперной характеристики (ВАХ) и дифференциальной проводимости сначала в рамках DFT определяется функция пропускания нанопечочек. Расчет зависимости функции пропускания барьера от энергии производится на основе уравнения:

$$T(\varepsilon) = \sum_k t_k^\dagger t_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \quad (7)$$

или

$$T(\varepsilon) = \text{tr}[\Gamma^L A^R] = \text{tr}[\Gamma^R A^L] = \text{tr}[\Gamma^L G \Gamma^R G^\dagger] = \text{tr}[\Gamma^R G \Gamma^L G^\dagger], \quad (8)$$

где t_k – амплитуда пропускания, $\delta(\varepsilon)$ – дельта функция, A – спектральная функция.

ВАХ наноструктуры рассчитывается на основе известного уравнения Ландауэра, указывающее фундаментальную связь электрического тока со спектром пропускания:

Дифференциальная проводимость наноструктуры определяется с помощью уравнения:

$$\sigma(V_L, V_R, T_L, T_R, \alpha_L, \alpha_R) = \lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{I(V_L + \alpha_L \delta V, V_R - \alpha_L \delta V, T_L, T_R)}{\delta V}, \quad (10)$$

где α_L, α_R – константы связи, причем $\alpha_L + \alpha_R = 1$.

Для определения плотности состояния наноструктуры сначала вычислим ее локальную плотность состояний (local density of states (LDOS)):

$$D(\varepsilon, r) = \sum_{ij} \rho_{ij}(\varepsilon) \phi_i(r) \phi_j(r), \quad (11)$$

где $\rho(\varepsilon) = \rho^L(\varepsilon) + \rho^R(\varepsilon)$, $\phi(r)$ – базисные орбитали. Плотность состояний устройства получается путем интегрирования LDOS по всему пространству:

$$D(\varepsilon) = \int dr D(\varepsilon, r) = \sum_{ij} \rho_{ij}(\varepsilon) S_{ij}, \quad (12)$$

где $S_{ij} = \int \phi_i(r) \phi_j(r) dr$ – матрица перекрытия (the overlap matrix). Принимая, что $M_i(\varepsilon) = \sum_j \rho_{ij}(\varepsilon) S_{ij}$, уравнение (12) можно представить в следующем виде:

$$D(\varepsilon) = \sum_i M_i(\varepsilon). \quad (13)$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

В данной работе электрические характеристики наноструктур определялись на методе коэффициентов пропускания (см. уравнение (9, 10)), поэтому рассмотрим поведение функции пропускания при различных значениях напряжения. На рис. 3 приведена эволюция спектра пропускания графеновых нанопочек (a, b, c, d, e) с увеличением напряжения смещения от 0 до 2 В при температуре 10 К. Расчет спектра пропускания производился на основе уравнений (7, 8).

Спектр пропускания b-наноструктуры при нулевом напряжении смещения приведен на рис. 3b. Он имеет три острых резонансных пика 1,934; 1,976; 0,955 усл. ед. при положительной энергии 0,52 эВ, 0,36 эВ, 0,16 эВ и четыре резонансных максимума 0,691; 1,911; 1,9; 1,998 усл. ед. при отрицательной энергии – 0,64 эВ, – 1,2 эВ, – 1,28 эВ, – 2 эВ соответственно. Минимальные значения спектра b-наноструктуры 1,71; 0,24; 0,08; 0,047 усл. ед. наблюдаются при энергии 0,44 эВ, 0,2 эВ, – 1,24 эВ, – 1,32 эВ, а в интервале энергии 1,88÷0,76 эВ, 0,04÷– 0,52 эВ, – 0,76÷– 0,76 эВ наблюдается пауза функции пропускания ($T(\varepsilon) \rightarrow 0$).

Спектр пропускания c-наноструктуры при нулевом напряжении смещения имеет 6 заметных резонансных максимумов 1,713; 0,687; 0,815; 1,99; 2,97; 2,45 усл. ед. при энергии 0,48 эВ, 0,08 эВ, – 0,12 эВ, – 0,44 эВ, – 1,24 эВ, – 1,44 эВ, а минимумы – 0,13; 0,235; 0,446; 0,534; 1,444; 1,425 усл. ед. наблюдаются при энергии 0,24 эВ, 0,04 эВ, – 0,16 эВ, – 0,92 эВ, – 1,28 эВ, – 1,72 эВ. В интервале энергии 1,56÷0,56 эВ наблюдается пауза функции пропускания (рис. 3c).

На рис. 3d приведены результаты расчета функции пропускания одномерной углеродной цепочки с

одним гексагональным элементом (d-наноструктура) при $V_{bias} = 0$. Для d-наноструктуры максимальное значение функции пропускания $\approx 2,837$ усл. ед. наблюдается при энергии 0,08 эВ.

При положительных значениях энергии наблюдаются особенности функции пропускания. Они проявляются в значении $\approx 0,322$ усл. ед. при 2 эВ и $\approx 0,092$ усл. ед. при 0,48 эВ. При этом в интервале 1,56÷0,6 эВ возникает пауза функции пропускания.

При отрицательных значениях энергии наблюдаются следующие экстремумы: максимумы – 2 усл. ед. и 1,9 усл. ед. проявляются при значениях энергии – 0,48 эВ и при – 2 эВ, а минимумы – ≈ 1 усл. ед. и 0,065 усл. ед. при значениях энергии – 0,08 эВ и – 1,32 эВ. Отметим, что при $\varepsilon_F = 0$ функция пропускания составляет $\approx 1,05374$ усл. ед.

Функция пропускания одноатомной углеродной цепочки (e-наноструктуры) имеет заметное отличие от функции пропускания углеродной цепочки с одним гексагональным элементом. Функция пропускания e-наноструктуры имеет резонансный пик – $\approx 1,998$ усл. ед. при 1,88 эВ и паузу в интервале 1,56÷0,48 эВ. Второй резонансный пик – 1,97 усл. ед. расположен при 0,16 эВ. При отрицательном значении энергии наблюдается два максимума 1,99 и 1,96 усл. ед. при энергии – 0,2 эВ и – 1,32 эВ, и два минимума $\approx 0,278$ и 0,536 усл. ед. при энергии – 0,84 эВ и – 1,8 эВ, соответственно. При $\varepsilon_F = 0$ значение $T(\varepsilon)$ составляет 0,76 усл. ед.

Особенности спектра пропускания наблюдаются и в плотности состояний устройства (DDOS – Device Density of States) (рис. 4), так как эти величины прямопропорциональны $T(\varepsilon) = D(\varepsilon - U)2\pi\gamma^2/\gamma$ (здесь U – самосогласованный потенциал, γ – параметр Латинжера). Расчет DDOS производился на основе уравнений (11-13).

Спектры пропускания a-, c-, d-, e-наноструктур с отчетливыми максимумами и минимумами напоминают спектр резонансных туннельных структур [12].

На наш взгляд возможное возникновение резонансного туннелирования в таких структурах обусловлено низкой размерностью центральной области наноконтакта (рис. 2). Именно этот интересный квантовый эффект (резонансное туннелирование) определяет электронный транспорт рассматриваемых наноструктур.

На рис. 5 представлены результаты моделирования ВАХ и дифференциальной проводимости нанопочек при температуре 10 К. Расчеты этих характеристик производились на основе уравнений (9, 10).

Как видно, ВАХ a,c,d,e-наноструктур демонстрируют эффект отрицательного дифференциального сопротивления, и этим наноструктурам присущи полупроводниковые свойства. Электрические свойства b-структуры сильно отличаются от других и черз нее практически не течет ток, т.е. структуре присуще диэлектрические свойства.

Отметим, что при удалении из графеновой ленты 20 атомов углерода (b-структура, рис. 2b) электрические

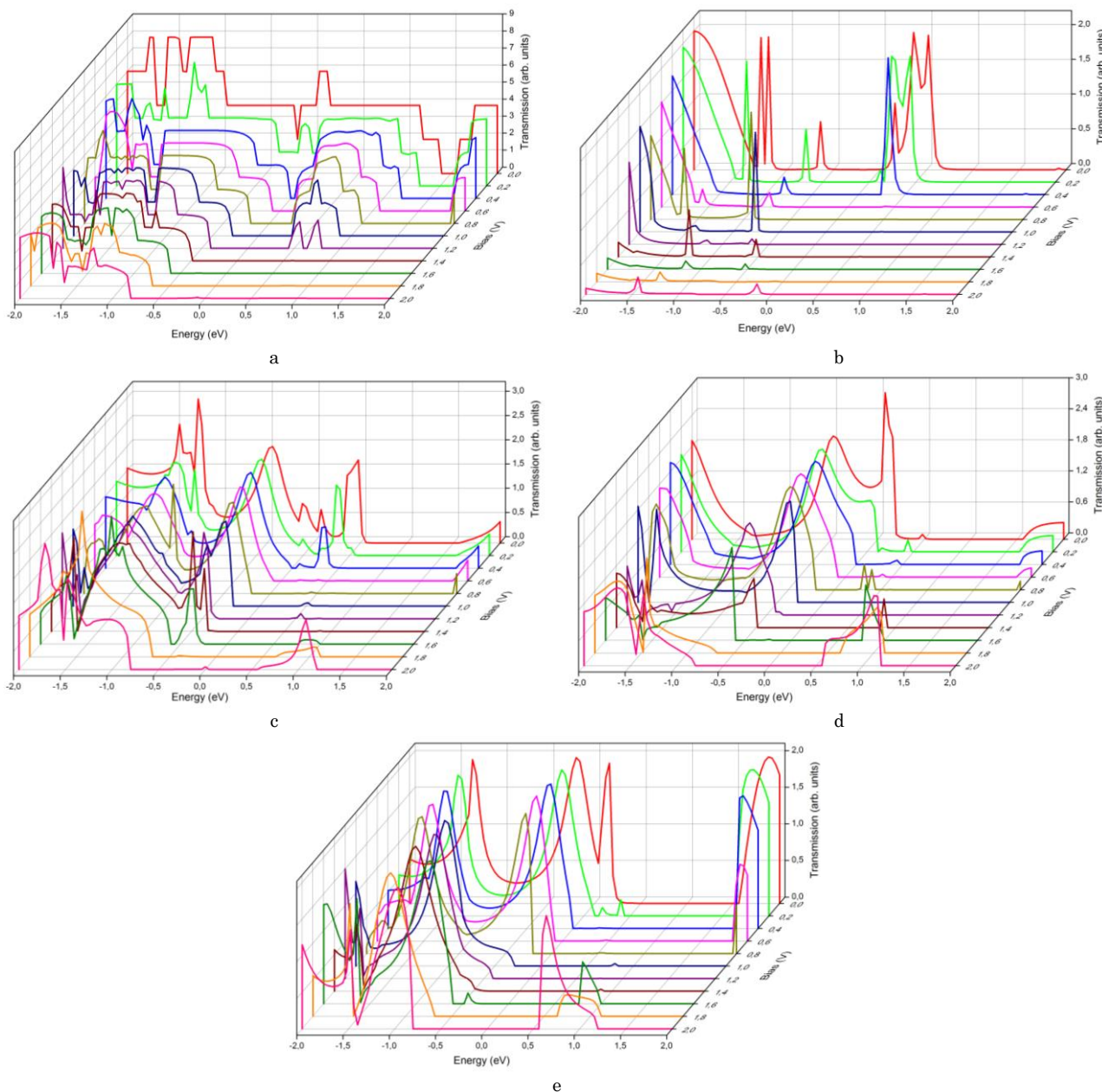


Рис. 3 – Эволюция спектра пропускания углеродных нанотроек с увеличением напряжения смещения V_{bias} ($0 \div 2$ В) при температуре 10 К (спектры соответствуют структурам, представленным на рис. 2)

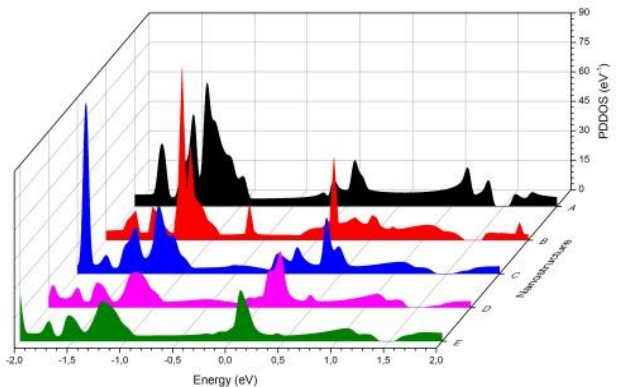


Рис. 4 – Плотность состояний a, b, c, d, e-наноструктур

характеристики наноструктуры ухудшаются и при дальнейшем расщеплении до 24 атомов (с-структура,

рис. 2с) на ВАХ появляются существенные изменения: в интервале напряжений $0 \div 0,5$ В ток возрастает медленно от 0 до $\approx 2,5$ мкА, а в интервале $\approx 0,5 \div 1,0$ В наблюдается резкое повышение тока до максимального значения $\approx 11,2$ мкА, далее в интервале $\approx 1,0 \div 1,2$ В ток уменьшается до ≈ 9 мкА, а при 1,45 В возрастает до 1,2 мкА. Падение тока в наноструктуре наблюдается при 1,8 В до 7 мкА. Дальнейшее удаление атомов углерода из графена до формирования одноатомной цепочки (е-структура, рис. 2е) демонстрирует улучшение электрических характеристик. Например, ВАХ d-наноструктуры имеет 4 максимума и 3 минимума, при этом максимальные значения тока 7,5 мкА, 13 мкА, 11 мкА, 11,5 мкА наблюдаются при напряжениях 0,2 В, 1 В, 1,6 В, 2 В, соответственно. А ВАХ одноатомной углеродной цепочки имеет заметное отличие от других

видов рассмотренных структур. В интервале напряжения 0÷0,7 В значение тока умеренно возрастает до 12,5 мкА, затем он мгновенно уменьшается при напряжении 0,7÷1,05 В до значения 1 мкА. В интервале $\approx 1,05\div 1,35$ В ток стабилизируется, принимая значения ≈ 1 мкА, лишь возмущаясь при напряже-

нии 1,2 В. В интервале 1,35÷1,45 В наблюдается быстрое возрастание тока до 8,5 мкА, после чего до напряжения 1,8 В ток убывает, при этом минимальное значение тока достигает 6 мкА. Далее, при 2 В наблюдается резкое возрастание тока до значения 25 мкА.

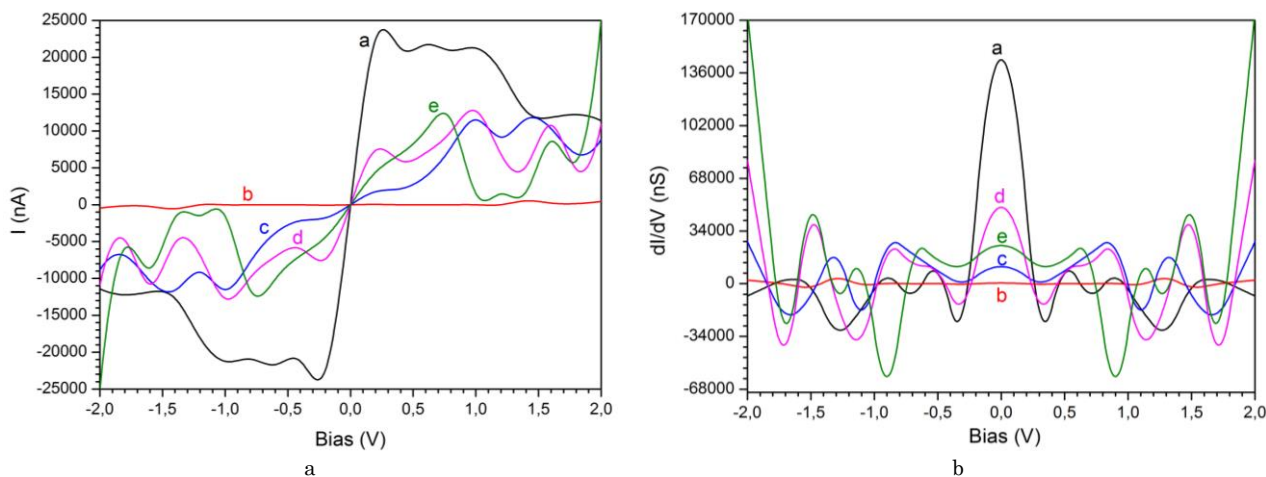


Рис. 5 – Вольтамперные и dI/dV -характеристики углеродных нанопечочек, полученные при постепенном удалении атомов углерода из графеновой ленты (буквенные обозначения соответствует структуре, показанной на рис. 2).

Особенности ВАХ рассмотренных наноструктур отчетливо проявляются и в их дифференциальной проводимости (рис. 5b). При $V_{bias} = 0$ дифференциальная проводимость а-наноструктуры составляет ≈ 143 мкСм, с-наноструктуры ≈ 13 мкСм, d-наноструктуры ≈ 51 мкСм, и е-наноструктуры ≈ 27 мкСм. Отметим, что dI/dV -характеристика b-наноструктуры представляет собой нулевую линию, и только при 1,1÷1,5 В наблюдается незначительная ее осцилляция с амплитудой $\approx 3,4$ мкСм.

В работах [13, 14] на ВАХ наноструктур ТЕМРО (2,2,6,6-tetramethyl-1-piperidinyloxy) экспериментально наблюдали отрицательное дифференциальное сопротивление. Объяснение к появлению отрицательного дифференциального сопротивления в таких структурах дано в работах [12, 15]. Авторы последних работ продемонстрировали, что наличие полупроводникового пограничного слоя может привести к появлению резонансного туннелирования квазичастиц, а также показали, что в p-полупроводниках возникновение отрицательного дифференциального сопротивления определяется высшей занятой молекулярной орбиталью (НОМО), а для полупроводников n-типа нижней свободной молекулярной орбиталью (ЛУМО).

Поэтому особенности ВАХ рассматриваемых наноструктур можно объяснить эффектом резонансного туннелирования квазичастиц. Как видно, электрический ток, проходящий сквозь наноструктуру резко возрастает, достигая максимума при $V = 2\Delta / e$ (здесь Δ – разность между разрешенными в квантово-размерной области энергетическими уровнями). При превышении напряжением указанной величины, туннельный ток, протекающий сквозь наноструктуру, уменьшается. Из спектров пропускания заметно, что величина тока, проходящего через с-наноструктуры существенно увеличивается при напряжении смещения 0,8 и 1,2 В, через d-наноструктуры при 0,2; 1 и

1,6 В, а через е-наноструктуры при 0,8; 1,6 и 2 В, и при этих значениях напряжения на спектре появляются несколько равнозначных резонансных максимумов и минимумов, возможно обусловленных резонансным туннелированием.

4. ВЫВОДЫ

Таким образом, в данной работе в рамках теории функционала плотности исследованы основные электрические характеристики (ВАХ, спектры пропускания контакта при различных значениях напряжения смещения, плотность состояний, дифференциальная проводимость) наноструктур, полученных при построчном удалении атомов углерода из графеновой ленты. Показано, что ВАХ такой структуры имеет особенность резкого возрастания туннельного тока при определенных значениях напряжения, возможно обусловленную резонансным туннелированием квазичастиц. Приведена эволюция спектра пропускания наноструктуры с увеличением напряжения смещения (от 0 до 2 В), при этом поведение спектра пропускания с острыми резонансными пиками является доказательством эффекта резонансного туннелирования в рассматриваемых структурах. ВАХ таких наноструктур имеет заметный участок с отрицательным дифференциальным сопротивлением, который может позволить на основе таких нанопечочек создать новые перспективные электронные приборы.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при частичной поддержке гранта Министерства образования и науки Республики Казахстан (проект №4903/ГФ4).

Computer Simulation of Electrical Characteristics of the Carbon Nanochains

D.M. Sergeyev^{1,2}, K.Sh. Shunkeyev¹

¹ *Zhubanov Aktobe Regional University, 34, Moldagulova Ave., 030000 Aktobe, Kazakhstan*

² *Begeldinov Military Institute of Air Defence Forces, 39, Moldagulova Ave., 030012 Aktobe, Kazakhstan*

In the framework of the theory of the electron density functional using the nonequilibrium Green's function method in the local density approximation, the electric characteristics of nanostructures obtained by the method of gradual progressive removal of carbon atoms from graphene are investigated. The calculation is implemented in the Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab. The transmission spectra of nanostructures at various values of the bias voltage, the density of the state of the nanodevices, the current-voltage characteristics, and the differential conductivity are calculated. It is shown that the current-voltage characteristics of the nanostructures under consideration have a section with a negative differential resistance, possibly due to resonant tunneling of quasiparticles. The same changes are observed in dI/dV -characteristics. Obtained results can be useful for calculating of new promising electronic devices for nanoelectronics.

Keywords: Graphene, Carbon Atomic Chains, Nanocontact, Transmission Spectra, Density of States, Current-Voltage Characteristic, Differential Conductivity.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A.L. Klavsyuk, A.M. Saletsky, *Phys.-Usp.* **58**, 933 (2015).
2. D. Sergeyev, K. Shunkeyev, N. Zhanturina, S. Shunkeyev, *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering* **49**, 012049 (2013).
3. W. Paul, D. Oliver, P. Grutter, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 8201 (2014).
4. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
5. Ch. Jin, H. Lan, L. Peng, K. Suenaga, S. Iijima, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 205501 (2009).
6. I.V. Antonova, *Phys.-Usp.* **60** 204 (2017).
7. M. Tian, Y. Huang, W. Wang, R. Li, P. Liu, C. Liu, Y. Zhang, *J. Mater. Res.* **29** No11, 1288 (2014).
8. D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, *J. Phys.: Condens. Matter.* **14**, 783 (2002).
9. E.P. Bellido, J.M. Seminario, *J. Phys. Chem. C* **116** No6, 4044 (2012).
10. M. Brandbyge, J.-L. Mozos, P. Ordejon, J. Taylor, K. Stokbro, *Phys. Rev. B* **65**, 165401 (2002).
11. *Atomistix ToolKit. Manual Version 2015.1., QuantumWise A/S* (2015).
12. S. Datta, *Nanotechnology* **15**, S433 (2004).
13. N.P. Guisinger, M.E. Greene, R. Basu, A.S. Baluch, M.C. Hersam, *Nano Lett.* **4**, 55 (2004).
14. N.P. Guisinger, R. Basu, M.E. Greene, A.S. Baluch, M.C. Hersam, *Nanotechnology* **15**, S452 (2004).
15. T. Rakshit, G.Ch. Liang, A.W. Ghosh, S. Datta, *Nano Lett.* **4**, 1807 (2004).