

Кондактанс однослойной углеродной нанотрубки в однопараметрической модели сильной связи

© С.С. Савинский, А.В. Белослудцев

Удмуртский государственный университет,
426034 Ижевск, Россия

(Поступила в Редакцию 23 июля 2003 г.
В окончательной редакции 4 декабря 2003 г.)

Проведено теоретическое исследование вольт-амперных характеристик однослойных нанотрубок в зависимости от их радиуса и хиральности. Показано, что кондактанс однослойной нанотрубки при малых напряжениях может принимать дискретные значения, равные нулю для диэлектрической и $4(e^2/h)$ для проводящей трубки (e — заряд электрона, h — постоянная Планка). На вольт-амперной характеристике нанотрубки имеются изломы, связанные с дискретностью электронного спектра. Исследовано поведение кондактанса нанотрубки при нулевой температуре в квантующем продольном магнитном поле, меняющем тип проводимости трубки. В магнитном поле кондактанс диэлектрической трубки при малом напряжении может принять значение $2(e^2/h)$, когда трубка становится проводящей. Проводящая трубка в слабом магнитном поле становится диэлектрической с шириной запрещенной щели, зависящей от величины магнитного поля. Проведены расчеты кондактанса углеродной нанотрубки в зависимости от температуры и продольного магнитного поля.

Известно, что кондактанс квантового провода может принимать дискретные значения, определяемые числом занятых электронами поперечных мод, играющих роль квантовых каналов для протекания тока. Экспериментальное наблюдение этих каналов возможно в том случае, когда длина волны электрона сравнима с поперечным размером провода при значениях eV (e — заряд электрона, V — разность потенциалов на концах провода), сравнимых с расстояниями между дискретными энергетическими уровнями электрона (см., например, [1]). Если в качестве квантового провода рассматривать однослойную нанотрубку, то аналогом поперечных мод в ней являются дискретные состояния электронов с различными значениями магнитного квантового числа. Соответственно кондактанс нанотрубки также может принимать дискретные значения, но для экспериментального обнаружения этого необходимо исследовать трубку достаточно малого радиуса, так как расстояние по энергии между квантовыми состояниями электронов обратно пропорционально квадрату радиуса трубки.

Геометрически идеальную углеродную трубку можно представить в виде цилиндрической поверхности, составленной из плотно упакованных углеродных „бензольных колец“ (у которых отсутствуют атомы водорода). В экспериментах наблюдаются трубки длиной до одного микрона и диаметром в сотни раз меньше. Оказалось, что от геометрической ориентации углеродных колец на поверхности трубки зависит, является ли данный объект диэлектриком или проводником. Это важное свойство позволяет надеяться на возможность использования трубок в наноэлектронике. В предлагаемой работе проведено теоретическое исследование вольт-амперных характеристик произволь-

ных идеальных однослойных углеродных нанотрубок в приближении равновесного термодинамического состояния системы. Предложена простая геометрическая схема для расчета кондактанса углеродной нанотрубки с использованием зоны неэквивалентных квантовых состояний электрона, которая для кристаллических твердых тел является аналогом зоны Бриллюэна. Для численного расчета вольт-амперной характеристики трубки мы используем баллистическое приближение, в котором предполагается, что длина свободного пробега электрона гораздо больше размеров трубки. Аналогичные расчеты были проведены для углеродных нанотрубок с наиболее простой симметрией „zigzag“ и „armchair“ в теоретической работе [2], где показано, что при нулевой температуре и малых напряжениях кондактанс трубки может принимать дискретные значения, кратные величине e^2/h (h — постоянная Планка).

Интерес к изучению углеродных нанотрубок обусловлен рядом причин: во-первых, их высокой прочностью и большими значениями модулей упругости, фактически равными модулям упругости графитовой плоскости; во-вторых, значительным интервалом изменения ширины запрещенной щели в спектре π -электронов (от нуля до нескольких электрон-вольт в зависимости от радиуса и хиральности трубки); в-третьих, высокими капиллярными и адсорбционными характеристиками трубки. Это позволяет предполагать, что углеродные нанотрубки могут найти применение в наноэлектронике и наномеханических устройствах, а также использоваться в качестве избирательных молекулярных адсорбентов. Проводимые теоретические и экспериментальные исследования свойств углеродных нанотрубок описаны в работах [3–6].

1. Геометрическое строение и электронный спектр π -электронов углеродной трубки

Углеродную нанотрубку можно представить как результат склейки графитового листа в цилиндрическую поверхность. Для этого на графитовом листе выберем два перпендикулярных вектора \mathbf{C} и \mathbf{L} (рис. 1). Вектор \mathbf{C} соединяет два узла решетки, определяемой базисными векторами \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 , вектор \mathbf{L} задает длину углеродной нанотрубки. Векторы \mathbf{C} и \mathbf{L} на графитовой плоскости задают прямоугольник. Процедура склейки этого прямоугольника состоит в отождествлении точек на противоположных сторонах прямоугольника, отстоящих друг от друга на вектор \mathbf{C} . В результате склейки прямоугольник переходит в конечную цилиндрическую поверхность, базисные векторы \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 — в винтовые трансляции на цилиндре радиуса $R = \frac{|\mathbf{C}|}{2\pi}$ (радиус нанотрубки).

Заметим, что базисные векторы на графитовом листе определяют элементарную ячейку с двумя атомами углерода и имеют одинаковую длину $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \sqrt{3}a_0$, где $a_0 = 1.42 \text{ \AA}$ — расстояние между двумя ближайшими атомами углерода в графите. После склейки цилиндрической поверхности с длиной образующей, равной бесконечности, базисные векторы преобразуются в операторы винтовых поворотов, которые характеризуются величиной сдвига вдоль цилиндрической поверхности и значением угла поворота; например, для вектора \mathbf{a}_1 они вычисляются по формулам $\Delta\varphi_1 = \frac{(\mathbf{a}_1\mathbf{C})}{R}$ и $\Delta z_1 = \frac{(\mathbf{a}_1\mathbf{L})}{|\mathbf{L}|}$. Аналогичные формулы можно записать и для второго базисного вектора. Таким образом, два оператора винтовых поворотов на углеродной нанотрубке являются образующими группы симметрии трубки, в элементарной ячейке трубки находятся два углеродных атома.

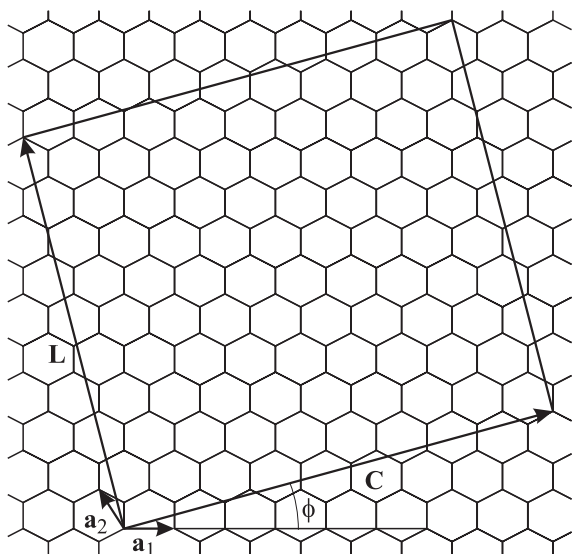


Рис. 1. Фрагмент графитовой плоскости. \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 — базисные векторы элементарной ячейки, \mathbf{C} — образующий нанотрубку вектор, \mathbf{L} задает длину трубки, ϕ — угол хиральности.

Вектор \mathbf{C} на графитовом листе задается парой чисел (i_1 и i_2): $\mathbf{C} = i_1\mathbf{a}_1 + i_2\mathbf{a}_2$. Эти целые числа называются индексами хиральности углеродной нанотрубки (i_1, i_2), так как они задают угол сворачивания графитового листа (на рис. 1 этот угол обозначен через ϕ). Легко получить формулы для вычисления радиуса и угла хиральности через индексы хиральности:

$$R = \frac{\sqrt{3}a_0}{2\pi} \sqrt{i_1^2 - i_1i_2 + i_2^2}, \quad \text{tg } \phi = \frac{\sqrt{3}i_2}{2i_1 - i_2},$$

а также параметры двух операторов винтового поворота

$$\Delta\varphi_1 = \frac{\sqrt{3}a_0}{R} \cos \phi,$$

$$\Delta\varphi_2 = \frac{\sqrt{3}a_0}{R} \left(\cos \frac{\pi}{6} \sin \phi - \sin \frac{\pi}{6} \cos \phi \right),$$

$$\Delta z_1 = -\sqrt{3}a_0 \sin \phi,$$

$$\Delta z_2 = \sqrt{3}a_0 \left(\cos \frac{\pi}{6} \cos \phi + \sin \frac{\pi}{6} \sin \phi \right). \quad (1)$$

Параметры операторов (1) входят в формулу для спектра квантовых состояний π -электронов углеродной трубки, зависящего от двух квантовых чисел (m, k): $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ — магнитное квантовое число, $\hbar k$ — квазиимпульс электрона в направлении оси нанотрубки. Энергия π -электронов в состоянии с квантовыми числами (m, k) может быть вычислена в приближении сильной связи, в котором она (без учета спина) определяется по формуле

$$E_{m,k}^{\pm} = E^0 \pm |H_{m,k}|,$$

$$H_{m,k} = \beta \left(1 + \exp(-im\Delta\varphi_2 - ik\Delta z_2) \right) \times \left(1 + \exp(-im\Delta\varphi_1 - ik\Delta z_1) \right), \quad (2)$$

где $(\Delta\varphi_1, \Delta z_1)$ и $(\Delta\varphi_2, \Delta z_2)$ определяются по формуле (1); β — параметр, равный матричному элементу оператора Гамильтона и рассчитываемый через волновые функции электронов атомов ближайших соседей (в дальнейшем мы полагаем $\beta = 2.2 \text{ eV}$); знаки \pm в формуле относятся к двум энергетическим зонам; E^0 — энергия связи π -электрона со свободным атомом углерода, значение которой не влияет на приводимые далее расчеты, в дальнейшем эта энергия связи будет полагаться равной нулю.

В литературе используются и иные варианты записи формулы (2) [3], а также варьируется выбор значения параметра β от 2 до 3 eV (см., например, [7,8]). Заметим, что более корректная формула спектра электронов в приближении сильной связи вместо одного параметра β должна содержать три различных параметра, которые равны матричным элементам, рассчитываемым между тремя ближайшими к выбранному атому соседями. Значения этих параметров должны зависеть от радиуса трубки и хиральности [9]. Фактически, формула (2) справедлива для нанотрубки большого радиуса.

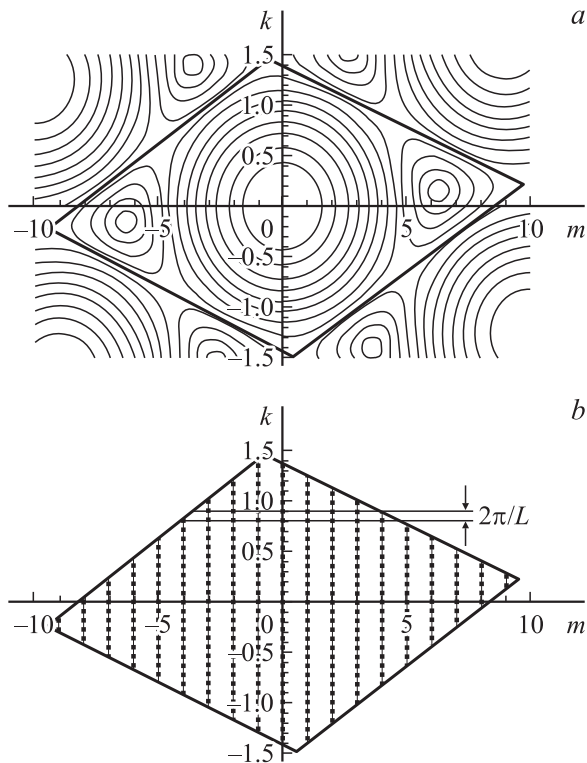


Рис. 2. Неэквивалентные квантовые состояния и изолинии энергий π -электронов углеродной нанотрубки (10,9). *a* — изолинии энергии на плоскости m, k ; *b* — дискретные квантовые состояния углеродной нанотрубки конечной длины.

В литературе обсуждаются также и феноменологические параметрические модели для расчета электронного спектра π -электронов на цилиндрической поверхности трубки с учетом спин-орбитального взаимодействия [10], однако в этих моделях не учитывается зависимость электронного спектра от симметрии нанотрубки. По-видимому, окончательный выбор наиболее адекватной модели энергетического спектра π -электронов и численного значения параметров спектра можно будет сделать после накопления экспериментальных количественных данных по электронным характеристикам однослойных нанотрубок произвольной хиральности.

Таким образом, однопараметрическая формула для спектра π -электронов однослойной углеродной нанотрубки (2) позволяет наиболее просто учесть симметрию нанотрубки.

Энергия электрона в модели спектра (2) является дьякопериодической функцией по квантовым числам m и k , неэквивалентные значения которых должны удовлетворять неравенствам

$$\begin{aligned} |m\Delta\varphi_1 + k\Delta z_1| &\leq \pi, \\ |m\Delta\varphi_2 + k\Delta z_2| &\leq \pi. \end{aligned} \quad (3)$$

Множество квантовых состояний (m, k) , для которых выполняются неравенства (3), лежит внутри четырехугольника на плоскости m, k . Этот четырехугольник

играет роль своеобразной зоны Бриллюэна, которая используется при описании электронных спектров кристаллов. На рис. 2, *a* приведены изолинии энергии (2) нанотрубки (10,9) на плоскости m, k , где построена также соответствующая зона неэквивалентных состояний. Максимальное значение энергии достигается в центре зоны; в особых точках зоны (m_*, k_*) энергия каждой ветви спектра (2) обращается в нуль.

Выбор зоны не является однозначным; как это следует из рис. 2, *a*, она может быть выбрана либо в виде другого эквивалентного четырехугольника, либо в виде шестиугольника, вершины которого будут расположены в точках, где энергия (2) принимает нулевые значения.

При рассмотрении нанотрубки конечных размеров квантовое число k принимает дискретные значения, кратные $2\pi/L$. В качестве примера на рис. 2, *b* показана зона для конечной трубки (10,9), точками отмечены разрешенные квантовые состояния (m, k) внутри этой зоны.

При нулевой температуре π -электроны заполняют все разрешенные состояния зоны с энергиями, соответствующими нижней ветви спектра (2), поэтому значение химического потенциала равно значению энергии E^0 , которая положена нами равной нулю.

Особые точки зоны (m_*, k_*) могут быть найдены из следующих соображений. Из (2) следует, что энергия электрона равна произведению параметра β на модуль комплексного числа, которое представляет собой сумму трех комплексных чисел (первое из них единица, модули второго и третьего чисел равны также единице). Эта сумма может обратиться в нуль, если фазы второго и третьего комплексных чисел равны $\pm 2\pi/3$; соответствующие условия запишутся в виде двух систем линейных уравнений относительно m и k

$$\begin{cases} m\Delta\varphi_1 + k\Delta z_1 = \pm \frac{2}{3}\pi, \\ m\Delta\varphi_2 + k\Delta z_2 = \pm \frac{2}{3}\pi. \end{cases} \quad (4)$$

Заметим, что две системы уравнений, различающиеся знаком в правых частях (+ или -) могут быть получены заменой $m \rightarrow -m$ и $k \rightarrow -k$. Решения системы (4), удовлетворяющие неравенствам (3), симметричны относительно начала координат и равны

$$\begin{aligned} m_* &= \pm \frac{2\pi}{3} \frac{\Delta z_1 - \Delta z_2}{\Delta\varphi_2\Delta z_1 - \Delta\varphi_1\Delta z_2}, \\ k_* &= \pm \frac{2\pi}{3} \frac{-\Delta\varphi_1 + \Delta\varphi_2}{\Delta\varphi_2\Delta z_1 - \Delta\varphi_1\Delta z_2}. \end{aligned} \quad (5)$$

Если подставить в формулу (5) значения координат операторов винтовых поворотов (1), от (5) можно перейти к формулам для m_* и k_* , в которых фигурируют индексы хиральности нанотрубки,

$$m_* = \pm \frac{i_1 + i_2}{3}, \quad k_* = \pm \frac{2\pi}{3} \frac{i_1 - i_2}{a_0 \sqrt{i_1^2 - i_1 i_2 + i_2^2}}. \quad (6)$$

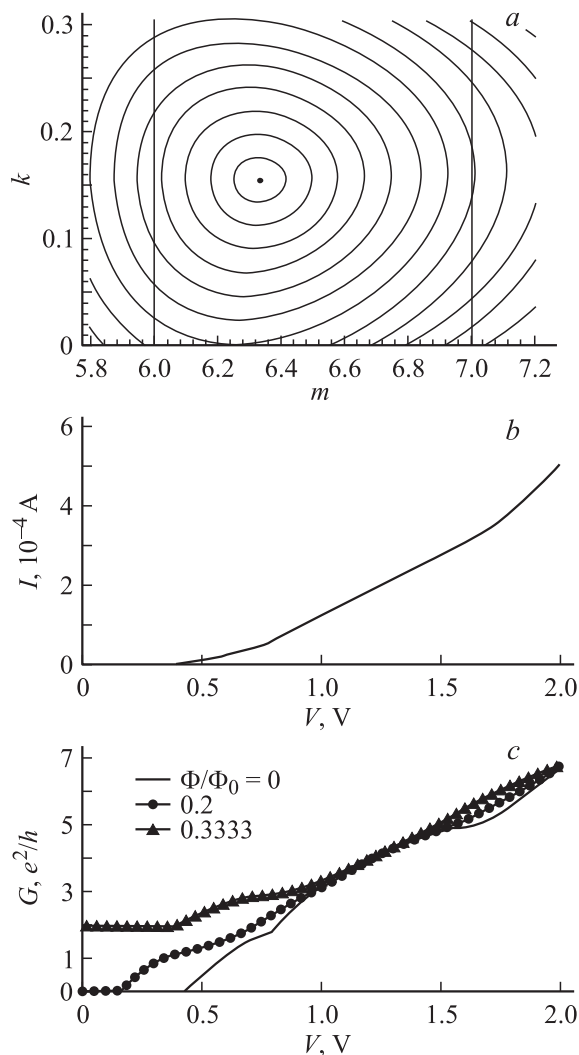


Рис. 3. Теоретический расчет вольт-амперной характеристики и кондактанса углеродной нанотрубки (10,9). *a* — изолинии энергий вблизи состояния (m_*, k_*) , шаг по энергии 0.1 eV; *b* — вольт-амперная характеристика; *c* — зависимость кондактанса от напряжения при различных значениях магнитного потока через сечение трубки.

Из (2) можно оценить также ширину запрещенной щели нанотрубки в зависимости от ее радиуса и индексов хиральности. Для этого необходимо вычислить производную от энергии электрона по магнитному квантовому числу в точке зоны (m_*, k_*) и в приближении линейной интерполяции энергии электрона в окрестности точки m_* оценить кратчайшее расстояние по энергии от этой точки до ближайшей линии (рис. 3, *a*) с целым значением магнитного квантового числа m . В результате можно получить следующую оценочную формулу для ширины запрещенной щели:

$$\Delta = 2 \left| \frac{\partial H_{m,k}}{\partial m} \right| \cdot |m_* - m| = 2\beta |\Delta\varphi_1 + (\Delta\varphi_1 + \Delta\varphi_2) \times \exp(-im_*\Delta\varphi_1 - ik\Delta z_1)| \cdot |m_* - m|. \quad (7)$$

Ширина запрещенной щели Δ (7) обращается в нуль, если m_* является целым числом, и в результате соответствующая трубка будет проводником. Как следует из формулы (6), это возможно, если сумма индексов трубки кратна трем; для суммы индексов, не делящихся на три без остатка, величина $|m_* - m|$ в формуле (7) принимает значение, равное 1/3. Таким образом, формула (6) позволяет по индексам хиральности углеродной нанотрубки определить, будет ли выбранная трубка проводящей или диэлектрической. По формуле (7) для диэлектрической трубки можно приблизительно оценить ширину запрещенной щели, которая пропорциональна угловым параметрам операторов винтовых поворотов и, согласно (1), обратно пропорциональна радиусу трубки. В литературе обсуждалась грубая формула для оценки ширины запрещенной щели нанотрубки $\Delta \approx \beta \frac{a_0}{R}$ [2], которая является следствием (7).

2. Кондактанс идеальной нанотрубки

Пусть к левому и правому концам трубки присоединены контакты, к которым подведено напряжение V . Предположим, что длина свободного пробега электрона гораздо больше размеров нанотрубки. В этом случае электрон без рассеяния переходит от одного конца трубки к другому. В случае термодинамического равновесия системы можно предположить, что значения химических потенциалов левого и правого концов трубки будут различаться на значение eV , в результате потоки электронов от левого и правого концов трубки будут различными, что приведет к возникновению электрического тока. Заметим, что химический потенциал углеродной нанотрубки не зависит от температуры вследствие симметрии ветвей энергетического спектра (2).

Электронный поток, проходящий через произвольное сечение от каждого из концов трубки, может быть вычислен по формуле

$$J = \frac{2e}{\hbar L} \sum_{m,k} \frac{\partial E_{m,k}}{\partial k} f_{m,k}, \quad (8)$$

где $f_{m,k} = (1 + e^{\frac{\mu - E_{m,k}}{k_B T}})^{-1}$ — функция Ферми–Дирака, k_B — постоянная Больцмана, μ — химический потенциал, который для одного конца трубки нужно положить равным нулю, а для другого конца — равным eV ; суммирование проводится по двум ветвям спектра электронов (2) для всех m, k , лежащих внутри зоны разрешенных состояний, с учетом тех электронных состояний, скорости которых направлены в одной сторону (например, для потока, идущего от левого конца трубки, нужно учитывать электроны, скорости которых направлены к ее правому концу); множитель два перед суммой учитывает спин электрона. Формула (8) допускает простую физическую интерпретацию. Выберем произвольное сечение трубки и произвольное квантовое состояние электрона. За единицу времени

через выбранное сечение перейдет электрон заданного квантового состояния, который мог находиться в любом сечении трубки, отстоящем от выделенного на расстояние, численно равное скорости электрона, поэтому вероятность обнаружить электрон на данном расстоянии от выбранного сечения равна отношению скорости электрона к общей длине трубки. Функция Ферми–Дирака в (8) задает вероятность заполнения данного квантового состояния. В пределе $L \rightarrow \infty$ квантовое число k принимает непрерывные значения, поэтому суммирование по этому числу может быть заменено интегрированием по k , пределы интегрирования при каждом фиксированном дискретном квантовом числе m могут быть определены геометрически по положению линии разрешенных состояний на плоскости m, k относительно границ зоны (рис. 2, а). В результате формула (8) может быть преобразована следующим образом:

$$J = \frac{2e}{h} \sum_{m,k} \frac{\partial E_{m,k}}{\partial k} \frac{2\pi}{L} f_{m,k} = \frac{2e}{h} \sum_m \int \frac{\partial E_{m,k}}{\partial k} f_{m,k} dk.$$

Выражение (8) для потока электронов принимает наиболее простой вид при температуре трубки, равной нулю ($T = 0$). В этом случае функция Ферми–Дирака может быть представлена как „ступенчатая“ функция $f_{m,k} = \Theta(\mu - E_{m,k})$, и формула для возникающего электрического тока, равного разности электронных потоков от левого и правого концов трубки, примет следующий вид:

$$I = J_L - J_R = \frac{2e}{h} \sum_m (eV - E_{\min}^m) \Theta(eV - E_{\min}^m), \quad (9)$$

где E_{\min}^m — минимум энергии положительной ветви спектра (2) для данного значения магнитного квантового числа m ; суммирование в (9) распространяется на состояния с различными значениями магнитных квантовых чисел положительной ветви спектра (2), для которых $E_{m,k} \leq eV$. Для проводящей трубки одно из значений E_{\min}^m при $m = m_*$ равно нулю, соответственно для диэлектрической трубки $E_{\min}^m \geq \Delta/2$. Это означает, что в проводящей трубке ток возникает при любом малом напряжении на концах трубки, а в диэлектрической трубке он возникает только при напряжении, удовлетворяющем неравенству $eV \geq \Delta/2$. Согласно (9), число слагаемых в сумме зависит от приложенного к концам трубки напряжения: для проводящей трубки оно больше или равно двум, для диэлектрической трубки больше либо равно нулю.

В диэлектрической трубке число слагаемых в формуле (9) будет равно нулю до тех пор, пока не выполнится условие $eV \geq \Delta/2$. Появление в сумме (9) новых слагаемых, связанное с изменением напряжения V на трубке, изменяет угол наклона вольт-амперной характеристики нанотрубки (рис. 3, б).

Увеличение радиуса трубки приводит к уменьшению расстояния между минимальными энергиями E_{\min}^m с

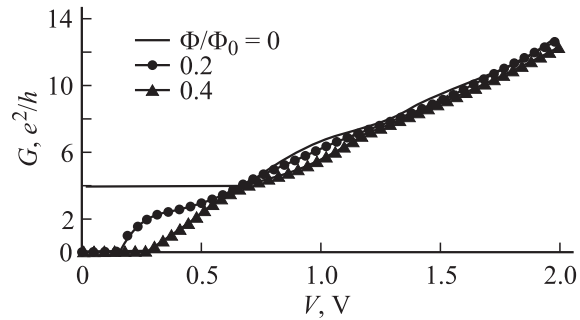


Рис. 4. Зависимость кондактанса углеродной нанотрубки (20,10) от напряжения при различных значениях магнитного потока через сечение трубки.

различными значениями m , что в свою очередь сгущает на вольт-амперной характеристике точки, в которых изменяется угол наклона. В пределе трубки большого радиуса вольт-амперная характеристика нанотрубки имеет вид параболы.

Приведенные нами соображения относительно правил суммирования в формуле (9) демонстрируются на рис. 3, а, где представлены энергетические изолинии во фрагменте зоны неэквивалентных значений квантовых чисел для углеродной нанотрубки (10,9). Энергетический шаг для изолиний выбран равным 0.1 eV; точке на рисунке соответствует значение (m_*, k_*) , при котором энергия электрона равна нулю; две прямые линии определяют разрешенные квантовые состояния бесконечно длинной нанотрубки с $m = 6$ и 7. Как следует из рис. 3, а, линия разрешенных значений с $m = 6$ касается изолинии энергии со значением 0.42 eV, линия с $m = 7$ касается изолинии энергии 0.78 eV. Это означает, что при температуре, равной нулю, трубка начинает проводить электрический ток только при напряжении $V \geq 0.42$ В; при этих условиях открывается первый канал с $m = 6$, при напряжении $V = 0.78$ В открывается второй канал с $m = 7$. Соответственно на вольт-амперной характеристике нанотрубки (10,9) при температуре $T = 0$ будут наблюдаться изломы при напряжениях $V = 0.42$ и 0.78 В. На рис. 3, б приведена численно рассчитанная по формуле (9) вольт-амперная характеристика углеродной нанотрубки (10,9), на которой видны изломы при напряжениях $V = 0.42$ и 0.78 В.

Из (9) легко получить формулу для кондактанса углеродной нанотрубки при температуре, равной нулю,

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h} \sum_m \left(1 - \frac{E_{\min}^m}{eV}\right) \Theta(eV - E_{\min}^m), \quad (10)$$

для которой выполняются те же правила суммирования, что и в (9). Для проводящей нанотрубки одно из значений E_{\min}^m при $m = m_*$ равно нулю, поэтому в сумме (10) при малом напряжении V будет только два слагаемых, каждое из которых равно единице, в результате кондактанс проводящей трубки равен $4(e^2/h)$ (рис. 4), на что

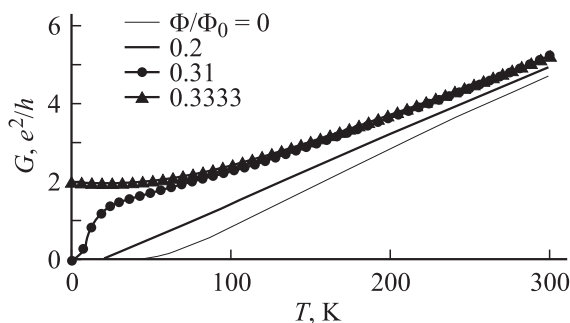


Рис. 5. Зависимость кондактанса углеродной нанотрубки (210,10) от температуры и величины магнитного потока при напряжении, стремящемся к нулю.

указывалось в работе [2]. Соответственно для диэлектрической трубки при малых напряжениях число слагаемых в формуле (10) равно нулю, поэтому кондактанс трубки равен нулю; для напряжений $eV \geq \Delta/2$ трубка становится проводящей и в сумме (10) появляются отличные от нуля слагаемые.

Включение магнитного поля, параллельного оси углеродной нанотрубки, оставляет формулу для спектра (2) неизменной, но в ней нужно заменить квантовое число m на $m + \Phi/\Phi_0$, где $\Phi = \pi R^2 B$ — магнитный поток, пронизывающий сечение нанотрубки, $\Phi_0 = \frac{c\hbar}{e}$ — элементарный квант магнитного потока, c — скорость света в вакууме, B — магнитная индукция. Соответственно в магнитном поле сместится значение m_* на плоскости m, k , в которой энергия (2) обращается в нуль. Для проводящей трубки это будет означать появление запрещенной щели в энергетическом спектре. Величину появляющейся щели в нанотрубке можно оценить по формуле (7), согласно которой ширина щели будет пропорциональной значению магнитного поля.

На рис. 3, с показана зависимость кондактанса трубки (10,9) от напряжения при различных магнитных потоках, вычисленная по формуле (10). При нулевом магнитном потоке трубка (10,9) является диэлектриком с шириной запрещенной щели, равной $2 \cdot 0.42$ eV; при значении магнитного потока $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{1}{3}$ щель смыкается и трубка становится проводящей. При дальнейшем увеличении магнитного поля снова появляется щель, которая при $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{1}{2}$ достигает экстремального значения. Дальнейшее увеличение магнитного поля приводит к симметричному относительно магнитного потока $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{1}{2}$ изменению ширины щели.

На рис. 4 приведены результаты численного расчета при нулевой температуре кондактанса проводящей углеродной нанотрубки (20,10) по формуле (10) в зависимости от напряжения при различных значениях магнитного потока через сечение трубки. Трубка (20,10) (рис. 4) при включении магнитного поля становится диэлектриком, ширина ее запрещенной щели растет с увеличением магнитного потока $\frac{\Phi}{\Phi_0}$, принимая максимальное значение

при $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{1}{2}$, при дальнейшем возрастании магнитного потока щель уменьшается до нуля при $\frac{\Phi}{\Phi_0} = 1$.

При температуре, отличной от нуля, диэлектрические трубки начинают проводить электрический ток при выполнении условия $k_B T \sim \Delta$. На рис. 5 приведены результаты численного расчета кондактанса углеродной нанотрубки (210,10), являющейся диэлектрической с малой запрещенной щелью. Расчет проводился при малом напряжении для различных температур и магнитных полей. Кондактанс численно рассчитывался по формуле (8) для электронных потоков, идущих от левого и правого концов трубки. Как следует из рис. 5, в области температур ~ 200 К имеется слабая зависимость кондактанса от магнитного поля, при этом кондактанс является растущей функцией температуры.

Все численные расчеты, представленные на рис. 3–5, проводились для конечных трубок длиной $L = 10^5$ Å.

Проведенные нами теоретические расчеты кондактанса однослойных углеродных нанотрубок в зависимости от температуры находятся в качественном согласии с экспериментальными данными по измерению температурной зависимости сопротивления жгута из многослойных нанотрубок, приведенными в обзоре [3].

Список литературы

- [1] В.Я. Демиховский, Г.А. Вугалтер. Физика квантовых низкоразмерных структур. Логос, М. (2000). 248 с.
- [2] M.F. Lin, K.W.-K. Shung. Phys. Rev. B **51**, 3, 7592 (1995).
- [3] А.В. Елецкий. УФН **167**, 9, 945 (1997).
- [4] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C. Eklund. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes. Academic Press, N.Y. (1996)
- [5] А.В. Елецкий. УФН **170**, 2, 113 (2000); Р.Е. Смолли. УФН **168**, 3, 323 (1998).
- [6] P. Avouris. Acc. Chem. Res. **35**, 1026 (2002).
- [7] А.В. Котосонов, В.В. Атражев. Письма в ЖЭТФ **72**, 2, 76 (2000).
- [8] А.А. Овчинников, В.В. Атражев. ФТТ **40**, 10, 1950 (1998).
- [9] D.J. Klein, W.A. Seitz, T.G. Schmalz. J. Phys. Chem. **97**, 1231 (1993).
- [10] Л.И. Магарил, Д.А. Романов, А.В. Чаплик. ЖЭТФ **113**, 4, 1411 (1998).