



DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2017.5.9>

УДК 538.915, 538.935

ББК 22.37

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИМЕСИ НА ТУННЕЛЬНЫЙ ТОК КОНТАКТА ПОЛИМЕРА С КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ И МЕТАЛЛОМ¹

Наталья Николаевна Конобеева

Кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры информационных систем и компьютерного моделирования,
Волгоградский государственный университет
yana_nn@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Аннотация. Целью настоящей работы является изучение влияния примеси на проводящие свойства полимера на примере полиацетилена. На основании гамильтониана для электронов полимера была получена плотность состояний, которая в дальнейшем была пересчитана в туннельный ток между полимером и металлом, а также квантовыми точками. Выявлено влияние примеси на характеристики туннельного тока в контакте.

Ключевые слова: примеси, полиацетилен, туннельный ток, проводимость, полимеры.

Как известно, полимеры обладают особыми механическими свойствами. Например, способность к высоким обратимым деформациям при относительно небольшой нагрузке, малая хрупкость, способность макромолекул к ориентации под действием направленного механического поля. Данные свойства обуславливаются в первую очередь цепным строением макромолекул и их гибкостью. Все эти особенности оказываются востребованными в связи с изучением свойств наноразмерных материалов, таких как графен [3; 7; 8]. Актуальным вопросом в последнее время становится применение графена для создания гибких прозрачных проводников. Для изучения и использования уникальных особенностей графена необходимо перенести его на непроводящую прозрачную подложку. Подходящими кандидатами на роль подложки для графена в применении к прозрачным проводникам являются различные полимеры, которые наряду с гибкостью обладают также высокой прозрачностью в видимом спектре излучения. Именно поэтому необходимо исследовать проводящие свойства полимеров, чему и посвящена данная работа. Важность исследований в данной научной области дополнительно подтверждается присуждением Нобелевской премии по химии в 2000 г. А. Хиигеру, А. Мак Диармиду и Х. Ширакава за открытие и создание проводящих полимеров.

Другим интересным вопросом остается исследование туннельных характеристик контактов наноструктур с другими материалами (металлом, квантовыми точками). Данные исследования позволяют оценить пригодность использования различного рода структур в качестве высокочувствительных детекторов газов, а также тяжелых металлов [6]. В работах [4; 5] была предложена методика расчета туннельного тока контакта графеновых нанолент различной формы с металлом и квантовыми точками, в том числе с учетом внешнего запирающего электрического поля. Плотность состояний была рассчитана с помощью предварительной диагонализации гамильтониана для электронов графена. Очевидным образом возникает задача изучения туннель-

ных характеристик полимеров, поскольку именно они все чаще используются в качестве подложек для графена, а также в составе композиционных материалов.

В данной работе в качестве полимерной структуры выберем полиацетилен (ПА), возможные формы которого приведены на рисунке 1. Наиболее привлекательной с точки зрения практических приложений формой являются пленки полиацетилена (цис-формы).

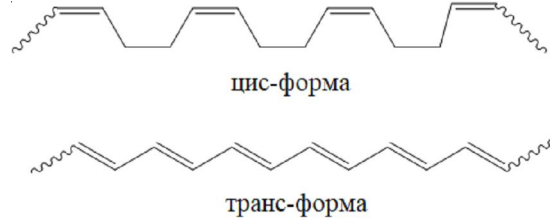


Рис. 1. Структура полиацетилена

Данные ядерного магнитного резонанса и рентгеновской дифракции показывают, что длины связей между атомами C различаются на $0,03-0,04 \text{ \AA}$ (двойная связь оказывается короче). Такое незначительное отличие длин оказывает существенное влияние на электронные свойства ПА, его зонную структуру.

Закон дисперсии для полиацетилена имеет вид:

$$E_{1,2}(q) = \pm \sqrt{(\Delta_0 \sin(qa_0))^2 + (2t_0 \cos(qa_0))^2},$$

$$qa_0 = \frac{2\pi n}{N}, n = 0, \pm 1, \dots, \pm \frac{N}{4} \quad (1)$$

здесь $\Delta_0 = 4\alpha y = 0,7 \text{ eV}$; $t_0 = 2,5 \text{ eV}$; N – число атомов в решетке.

Из формулы (1) очевидно, что на уровне Ферми открывается зонная щель, при этом валентная зона заполнена полностью, а зона проводимости оказывается пустой.

Одномерный решеточный гамильтониан для рассматриваемого полимера может быть записан в виде [2]:

$$H_p = -\sum_{n,s} t_{n,n+1} (c_{n+1,s}^+ c_{n,s} + c.c.) + 0.5K \sum_n (y_{n+1} - y_n)^2 + 0.5M \sum_n y_n^2$$

$$t_{n,n+1} = t_0 - \alpha(y_{n+1} - y_n), y_n = (-1)^n \cdot y, \quad (2)$$

где s – спин; n – номер (СН)-группы; y_n – конфигурационные координаты для каждой (СН)-группы, описывающие трансляцию вдоль линейного остова цепочки; M – масса группы (СН); K – упругая постоянная. Отметим, что $K = 21 \text{ eV/\AA}^2$, $\alpha = 4,1 \text{ eV/\AA}$, $y = 0,04 \text{ \AA}$.

Последним слагаемым в уравнении (2) можно пренебречь в силу того, что мы рассматриваем близкий к статическому случай. А для него это слагаемое можно учесть с помощью перенормировки.

Для 5 групп (СН) гамильтониан в матричной форме будет выглядеть следующим образом:

$$H_p = \begin{matrix} n & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 2Ky^2 & -t_{1,2} & 0 & 0 & 0 \\ -t_{1,2} & 2Ky^2 & -t_{2,3} & 0 & 0 \\ 0 & -t_{2,3} & 2Ky^2 & -t_{3,4} & 0 \\ 0 & 0 & -t_{3,4} & 2Ky^2 & -t_{4,5} \\ 0 & 0 & 0 & -t_{4,5} & 2Ky^2 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (3)$$

Учет влияния примеси в матричном виде демонстрируется в формуле (4):

$$H = \begin{pmatrix} H_p & H_{int} \\ H_{int}^* & E_{imp} \end{pmatrix} \quad (4)$$

здесь E_{imp} – матрица, на диагонали которой энергетические уровни примеси; H_{int} – матрица, содержащая энергии переходов между определенным уровнем примеси и (СН)-группой.

Далее на основе собственных значений матрицы нами рассчитывалась плотность состояний для полиацетилена ν_A путем прямого подсчета количества энергетических уровней в заданном интервале энергий. Плотность тока контакта вычислялась в рамках теории Кубо [1]:

$$J_{tun} = 4\pi e|T|^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \nu_A(\varepsilon + eU) \nu_B(\varepsilon) (n_f(\varepsilon) - n_f(\varepsilon + eU))$$

$$\nu_A(\varepsilon) = \sum_p \delta(\varepsilon - \varepsilon_p^A); \nu_B(\varepsilon) = \sum_q \delta(\varepsilon - \varepsilon_q^B); \quad (5)$$

где $\delta(x)$ – дельта функция Дирака, $\nu_{A(B)}(\varepsilon)$ – туннельная плотность состояний; $n_f(\varepsilon)$ – равновесное число фермионов с энергией ε ; U – разность потенциалов между контактами. Здесь и далее используется приближение «шероховатого» контакта T (матричный элемент оператора туннелирования между состояниями p и q): $T_{pq} = T$ (плоскость графена перпендикулярна к поверхности контактного материала).

В качестве материалов, с которыми полиацетилен вступает в контакт, выберем металл (6) и квантовые точки (7). Электронный спектр для них можно записать в следующем виде:

$$\varepsilon_q^A = \frac{p^2}{2m}, \quad (6)$$

здесь p – импульс; m – эффективная масса электрона.

$$\varepsilon_q^A = \varepsilon_0 - \Delta \cos(p), \quad (7)$$

ε_0 – энергия электронов квантовой ямы; Δ – интеграл туннелирования, определяемый перекрыванием электронных волновых функций в соседних ямах; p – квазиимпульс.

После вычисления интегралов, входящих в (5), с учетом свойств дельта-функции легко получить вольтамперную характеристику контакта.

Зависимость плотности туннельного тока (контакт с металлом и квантовыми точками) для полиацетилена от напряжения представлена на рисунках 2 и 3.

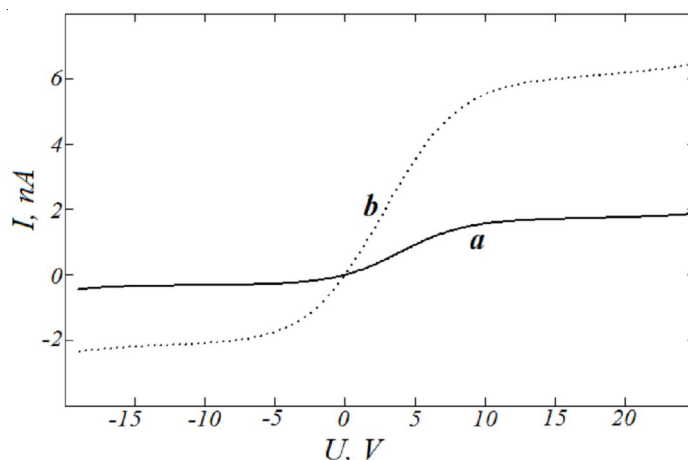


Рис. 2. Зависимость туннельного тока от напряжения для контакта полимера с металлом:
 а – без примеси; б – с учетом примеси

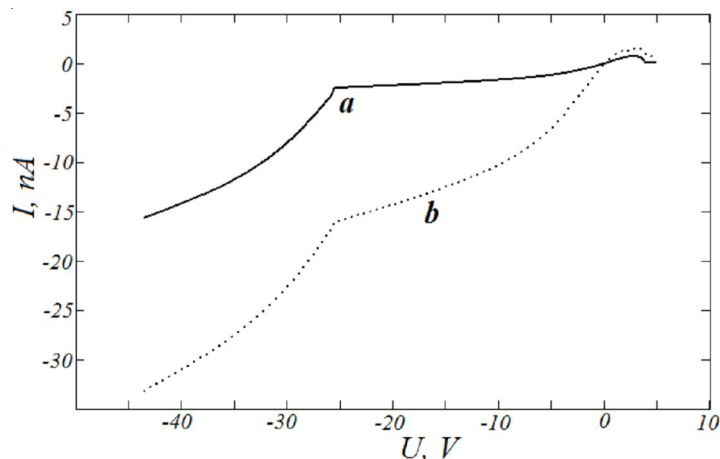


Рис. 3. Зависимость туннельного тока от напряжения для контакта полимера с квантовыми точками:
a – без примеси; *b* – с учетом примеси

Как видно из рисунка 2, введение примеси существенно влияет на форму ВАХ для контакта с металлом, что проявляется в увеличении тока в положительной по напряжению области, и в его уменьшении – в отрицательной.

Что касается контакта полимера с квантовыми точками (рис. 3), то здесь характер ВАХ практически не изменяется в случае введения примеси, уменьшается только величина электрического тока.

Из полученных результатов можно заключить, что введение примеси позволяет контролировать величину туннельного тока в системе, в том числе добиваться его увеличения. Это обстоятельство может оказаться полезным при разработке устройств, основанных на туннельном эффекте (диоды, транзисторы).

В дополнение к вышесказанному можно сделать вывод о возможности применения данной полимерной структуры при обнаружении примесных молекул как самостоятельно, так и в качестве подложки, например, для графена, который себя уже хорошо зарекомендовал как высокочувствительный сенсор.

ПРИМЕЧАНИЕ

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках гранта № 16-32-00230 мол_а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Левитов, Л. С. Функции Грина. Задачи с решениями / Л. С. Левитов, А. В. Шитов. – М. : Физматлит, 2003. – 392 с.
2. Осипов, В. А. Полиацетилен и двумерные модели квантовой теории поля (лекции для молодых ученых) / В. А. Осипов, В. К. Федянин. – Дубна : Объединен. ин-т ядер. исследований, 1985. – 81 с.
3. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene / Y. Zhang, Y. W. Tan, H. L. Stormer, P. Kim // Nature. – 2005. – Vol. 438. – P. 201–204. – DOI: 10.1038/nature04235.
4. Konobeeva, N. N. Conductivity of impurity graphene nanoribbons and gate electric field / N. N. Konobeeva, M. B. Belonenko // Modern Physics Letters B. – 2017. – Vol. 31. – P. 1750340. – DOI: 10.1142/S0217984917503407.
5. Konobeeva, N. N. Sensitivity of graphene flakes and nanorings to impurities / N. N. Konobeeva, M. B. Belonenko // Physica B: Condensed Matter. – 2017. – Vol. 514. – P. 51–53. – DOI: 10.1016/j.physb.2017.03.029.
6. On the interaction of toxic Heavy Metals (Cd, Hg, Pb) with graphene quantum dots and infinite graphene / I. Shteplyuk, N. M. Caffrey, T. Iakimov, V. Khranovsky, I. A. Abrikosov, R. Yakimova // Scientific Reports. – 2017. – Vol. 7, art. no. 3934. – DOI: 10.1038/s41598-017-04339-8.

7. Papageorgiou, D. G. Mechanical properties of graphene and graphene-based nanocomposites / D. G. Papageorgiou, I. A. Kinloch, R. J. Young // *Progress in Materials Science*. – 2017. – Vol. 90. – P. 75–127. – DOI: 10.1016/j.pmatsci.2017.07.004.
8. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov [et al.] // *Nature*. – 2005. – Vol. 438. – P. 197–200. – DOI: 10.1038/nature04233.

REFERENCES

1. Levitov L.S., Shitov A.V. *Funktsii Grina. Zadachi s resheniyami* [Green's Functions. Problems with Solutions]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2003. 392 p.
2. Osipov V.A., Fedyanin V.K. *Poliatsetlen i dvumernye modeli kvantovoy teorii polya (leksii dlya molodykh uchenykh)* [Polyacetylene and Two-Dimensional Models of Quantum Field Theory (Lectures for Young Scientists)]. Dubna, Obyedinen. in-t yader. issledovaniy, 1985. 81 p.
3. Zhang Y., Tan Y.W., Stormer H.L., Kim P. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. *Nature*, 2005, vol. 438, pp. 201-204. DOI: 10.1038/nature04235.
4. Konobeeva N.N., Belonenko M.B. Conductivity of impurity graphene nanoribbons and gate electric field. *Modern Physics Letters B*, 2017, vol. 31, p. 1750340. DOI: 10.1142/S0217984917503407.
5. Konobeeva N.N., Belonenko M.B. Sensitivity of graphene flakes and nanorings to impurities. *Physica B: Condensed Matter*, 2017, vol. 514, pp. 51-53. DOI: 10.1016/j.physb.2017.03.029.
6. Shteplyuk I., Caffrey N.M., Iakimov T., Khranovskyy V., Abrikosov I.A., Yakimova R. On the interaction of toxic Heavy Metals (Cd, Hg, Pb) with graphene quantum dots and infinite graphene. *Scientific Reports*, 2017, vol. 7, no. 3934. DOI: 10.1038/s41598-017-04339-8.
7. Papageorgiou D.G., Kinloch I.A., Young R.J. Mechanical properties of graphene and graphene-based nanocomposites. *Progress in Materials Science*, 2017, vol. 90, pp. 75-127. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2017.07.004.
8. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Katsnelson M.I., Grigorieva I.V., Dubonos S.V., Firsov A.A. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*, 2005, vol. 438, pp. 197-200. DOI: 10.1038/nature04233.

MODELING OF IMPURITY INFLUENCE ON TUNNELING CURRENT IN THE CONTACT OF POLYMER WITH QUANTUM DOTS AND METAL

Nataliya Nikolaevna Konobeeva

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor,
Department of Information Systems and Computer Simulation,
Volgograd State University
yana_nn@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Abstract. In this paper we study an influence of an impurity on conductive properties of a polymer, for example polyacetylene. Based on the Hamiltonian for polymer electrons, we obtain the density of states, which is subsequently recalculated into a tunneling current between the polymer and the metal, as well as quantum dots. We analyze the effect of the impurity on the characteristic properties of the tunneling current.

Key words: impurities, polyacetylene, tunneling current, conductivity, polymers.