

УДК 621.311.25:621.382.2

НАНОАНТЕННА НА ОСНОВЕ ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНОГО ДИОДА

Ю.И. Бохан

Учреждение образования «Витебский государственный университет имени П.М. Машерова»

Исследование посвящено проблеме применения углеродных нанотрубок для генерации/приема электромагнитного излучения терагерцового диапазона.

Цель работы — моделирование углеродной нанотрубки как цилиндрического туннельного барьера.

Материал и методы. Рассматривается решение уравнения Шредингера в цилиндрической системе координат. Углеродная нанотрубка моделируется цилиндрическим туннельным барьером с периодическими граничными условиями.

Результаты и их обсуждение. Получено выражение для тока зарядов в зависимости от радиуса и длины нанотрубки. Показано, что вектор тока имеет радиальную составляющую, меняющую знак для определенных переходов с большими значениями индексов. Появление отрицательных значений компоненты тока указывает на наличие отрицательной дифференциальной проводимости для этих переходов.

Заключение. Результаты исследований согласуются с известными расчетами для погонных индуктивности и емкости нанотрубок. Появление дополнительных пиков протекающего тока служит указанием на возбуждение туннельной системы внешним полем. Это дает возможность дополнительной настройки в резонанс, которая может быть осуществлена подстройкой «продольной» составляющей тока, зависящей от длины нанотрубки.

Ключевые слова: углеродная нанотрубка, потенциальный барьер, цилиндрические координаты, энергетические состояния, ток.

NANOANTENNA BASED ON A CYLINDRICAL RESONANCE TUNNEL DIODE

Yu.I. Bokhan

Education Establishment "Vitebsk State P.M. Masherov University"

The article considers the problem of using carbon nanotubes for generating/receiving electromagnetic radiation of terahertz range.

The purpose of the article is modeling of a carbon nanotube as a cylindrical tunnel barrier.

Material and methods. The solution of the Schrödinger equation in a cylindrical coordinate system is considered. The carbon nanotube is modeled by a cylindrical tunnel barrier with periodic boundary conditions.

Findings and their discussion. An expression is obtained for the charge current depending on the radius and length of the nanotube. It is shown that the current vector has a radial component that changes the sign for certain transitions with large index values. The occurrence of negative values of the current component indicates the presence of negative differential conductivity for these transitions.

Conclusion. The results of the studies are consistent with the well-known calculations for linear inductance and nanotube capacity. The appearance of additional current peaks serves as an indication of the excitation of the tunnel system by the external field. This makes it possible to further tune into resonance, which can be carried out by adjusting the "longitudinal" component of the current, which depends on the length of the nanotube.

Key words: carbon nanotube, potential barrier, cylindrical coordinates, energy states, current.

В настоящее время для детектирования слабых потоков электромагнитного излучения применяются элементы, принцип работы которых основывается на возбуждении квантовых состояний в структурных составляющих материалов. В то же время для детектирования электромагнитных полей радиочастотного диапазона используются макроскопические свойства материалов, изменяющие свои параметры под воздействием внешнего поля. Для детектирования слабых полей требуется система усиления сигнала, которая, часто, представляет собой сложную систему полупроводниковых элементов с большим уровнем шума. В этой связи особый интерес вызывает регулярная структура резонансно-туннельных диодов, позволяющая за счет резонансного переноса резко усилить сигнал

без искажения формы. Основной путь решения проблемы состоит в создании многобарьерного наноструктурного материала, работающего по принципу резонансного переноса заряда и имеющего внешнее управление электромагнитным полем.

Цель настоящего исследования — моделирование углеродной нанотрубки как цилиндрического туннельного барьера. Особенностью такой задачи является наличие угловой симметрии в распределении плотности тока и волновых функций внутри барьера.

Материал и методы. Применение углеродных нанотрубок для целей генерации/приема электромагнитного излучения терагерцевого диапазона привлекает все большее внимание ввиду высокой степени миниатюризации и возможности создания высокочувствительных приемных устройств [1–3]. Резонансное туннелирование и эффект отрицательной дифференциальной проводимости в наноструктурах вызваны чисто квантовыми явлениями пространственного квантования, приводящего к возникновению резонансных энергетических уровней. Такие эффекты дают возможность проявления новых свойств наноматериалов [4].

Результаты и их обсуждение. Использование углеродных нанотрубок (УНТ) представляется перспективным для целей детектирования переменных полей в диапазоне терагерц из-за спектральных особенностей УНТ [1]. Это связано с тем фактом, что однослойные УНТ имеют различный вид спектра в зависимости от хиральности трубки. Хиральность УНТ определяет симметрию расположения атомов углерода и структуру УНТ (рис. 1).

Индексы хиральности однослойной нанотрубки (m, n) однозначным образом определяют ее диаметр D :

$$D = \sqrt{3(m^2 + n^2 + nm)} d_0/\pi, \quad (1)$$

где $d_0 = 0,142$ нм — расстояние между соседними атомами углерода в графитовой плоскости.

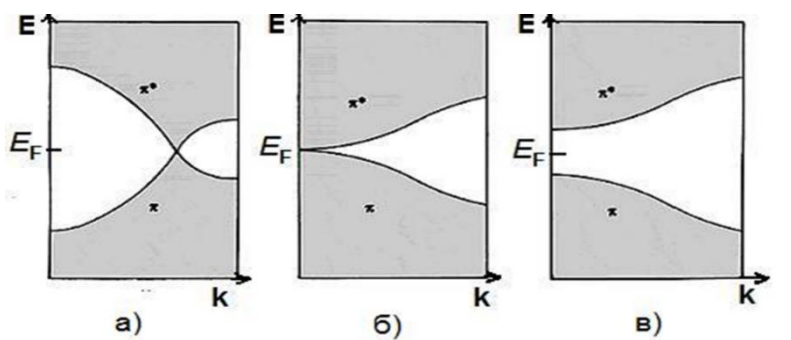


Рис. 1. Зонная структура нанотрубки в зависимости от индекса хиральности:
а) трубки (n, n) металлические; б) трубки $(n, 0)$ металлические, если n кратно 3;
в) полупроводниковые трубки $(n, 0)$, n не кратно 3

Для различных УНТ зонная структура спектра имеет различный вид [1] (рис. 1). Для таких видов спектра показано [5], что УНТ имеют свои особенности в квантовых свойствах.

Известно, что проводимость по постоянному току для узкого проводника (в отсутствие рассеивания по его длине) квантуется с учетом спинового момента электронов в единицах $2e^2/h$ [5]. В пересчете на сопротивление, как отмечено в [5], $h/(2e^2) \approx 12,9$ кОм.

Кинетическая индуктивность для одномерных волноводных систем, канализирующих электронные волны, в пересчете на единицу длины проводника описывается упрощенной квантованной зависимостью [5]:

$$L_k = \frac{h}{2e^2 v_f}, \quad (2)$$

где h — постоянная Планка, v_f — скорость Ферми для носителей заряда, e — заряд электрона. Для углеродных нанотрубок величина $v_f = 8 \times 10^5$ м/с, соответственно, и удельная линейная (погонная) квантовая индуктивность составит $L_k = 16$ нГ/мкм.

Аналогично, применительно к одномерному случаю нанотрубок, квантовая емкость на единицу длины определяется как

$$C_q = \frac{2e^2}{\hbar v_f}. \quad (3)$$

При скорости Ферми для графена и углеродных нанотрубок $v_f = 8 \times 10^5$ м/с удельная квантовая емкость составляет величину порядка 100 аФ/мкм.

Считая, что длина УНТ составляет величину порядка 1 мкм, для резонансной частоты антенны из микроскопических проводников получим [2] значение порядка 1 ТГц.

Следует отметить, что рассчитанная таким образом резонансная частота имеет достаточно условный характер, так как не учитывает другие процессы, происходящие при поглощении внешнего электромагнитного поля. Например, при наличии нескольких, расположенных на определенном расстоянии друг от друга УНТ необходимо учитывать погонную индуктивность и емкость двух и более проводников в линии. Рассматривая две УНТ как модель приемной антенны, следует учитывать и взаимную емкость, которая определяется соотношением длины УНТ к ее диаметру. Поэтому все вышеизложенное дает оценку резонансной частоты по порядку величины.

Кроме того, предложенный механизм запаздывания движения носителей заряда не дает ясного обоснования таких величин индуктивности и емкости, которые пропорциональны скорости Ферми. Приведенные выше выражения позволяют высказать предположение о сложной структуре уровня Ферми в УНТ. Объяснение механизма может стать более прозрачным, если учесть, что УНТ представляет собой цилиндрический барьер, обладающий нетривиальной структурой состояний. Причем эти состояния расположены вблизи углеродных ячеек, составляющих основу УНТ.

Для нахождения спектра внутри потенциального барьера требуется решить уравнение Шредингера в цилиндрической системе координат. Здесь следует отметить, что при рассмотрении процессов туннелирования обычно решается одномерная задача [6], как правило, в декартовой системе координат. Однако, как будет показано ниже, решение в цилиндрической системе координат обладает более богатым спектром состояний. Также отметим, что решение уравнения Шредингера в цилиндрической системе координат известно давно [7], причем в самом общем виде. Для целей анализа условий резонансного туннелирования изложим, в кратком варианте, решение первой краевой задачи в методе разделения переменных.

Запишем уравнение Шредингера в цилиндрической системе координат:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] + U_0 \psi = E \psi. \quad (4)$$

Здесь на величину потенциала наложено условие (U_0 — высота барьера):

$$U = \begin{cases} U_0 & 0 \leq r \leq R; 0 \leq z \leq L. \\ 0 & r > R; z > L. \end{cases} \quad (5)$$

Решение первой краевой задачи, в методе разделения переменных, запишем в виде:

$$\psi(r, \phi, z) = C J_n(kr) e^{i(s\phi + jz)}, \quad (6)$$

где $k^2 = [2M(E - U_0)/\hbar^2]$, $J_n(x)$ — функция Бесселя целого индекса, s, j — целые числа. Спектр состояний внутри барьера:

$$E_{ik} = U_0 - \frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\mu_i^2}{R^2} \right), \quad (7)$$

где μ_i — действительные корни уравнения $J_n(\mu_i R) = 0$, $n = 0, 1, 2, 3 \dots$ Для определения нормировочной константы воспользуемся условной ортогональностью функций Бесселя [7]:

$$\int_0^1 J_m(\mu_i x) J_m(\mu_k x) x dx = \begin{cases} 0, & i \neq k \\ \frac{1}{2} [J_{m+1}(\mu_i)]^2, & i = k \end{cases}.$$

После несложных преобразований получаем: $C = \sqrt{2} / (J_{m+1}(\mu_i R))$. Следует отметить, что нормировочная константа определяется корнями функции Бесселя $m+1$ -го порядка. Кроме того, она зависит от корней функции Бесселя на границе цилиндрического барьера.

Такое выражение для спектра состояний обусловлено выбранным методом разделения переменных. В направлении z волновые функции имеют вид синусов или косинусов, а в плоскости r и ϕ определяются функциями Бесселя, в которые входят s и j , играющие роль «магнитных» квантовых чисел.

Некоторые значения корней уравнения $J_n(kR) = 0$ представлены в табл.

Таблица

Первые пять корней функций Бесселя целого индекса

Корни	$J_0(x)=0$	$J_1(x)=0$	$J_2(x)=0$	$J_3(x)=0$
1	2.405	3.832	5.136	6.380
2	5.520	7.016	8.417	9.761
3	8.654	10.173	11.620	13.015
4	11.791	13.324	14.796	16.223
5	14.931	16.471	17.960	19.409

Вид волновых функций, в зависимости от аргумента и индекса ($s, j = 0$), представлен на рис. 2.

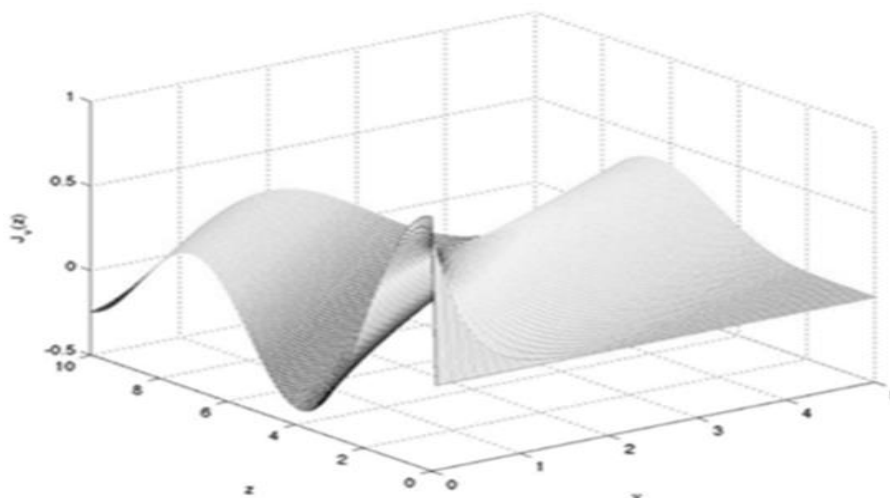


Рис. 2. Вид функции Бесселя в зависимости от аргумента и индекса

Рассмотрим величину тока, обусловленную движением зарядов. Используя стандартное выражение для тока [5]:

$$I_{mn}^a = iC^2(\psi_m^* \nabla \psi_n - \psi_n \nabla \psi_m^*) \quad (8)$$

и проведя несложные, но громоздкие преобразования с использованием представления градиента в цилиндрических координатах и соотношения между функциями Бесселя

$$\frac{d J_n(\rho)}{d \rho} = \frac{1}{2} \{ J_{n-1}(\rho) - J_{n+1}(\rho) \}, \quad (9)$$

получим выражения для компонент вектора тока в состоянии n :

$$I_\rho = 0, \quad (10)$$

$$I_\varphi = e \frac{\hbar}{\mu} C_1^2 \left[\frac{s}{r} J_n(\rho) J_n(\rho) \right], \quad (11)$$

$$I_z = e \frac{\hbar}{\mu} C_1^2 j [J_n(\rho) J_n(\rho)], \quad (12)$$

где $\rho = kr$, $C_1 = [J_{n+1}(kR)J_{n+1}(kR)]^{-1}$.

Исходя из вида волновых функций, следует отметить, что появляется несколько дополнительных слагаемых в выражении для тока через барьер. С учетом гармонической зависимости волновых функций от φ и z возникают дополнительные локальные максимумы, которые подтверждают значительные вероятности переходов через состояния с большими значениями порядка. С учетом близких значений корней функций Бесселя больших порядков появляется возможность переходов между состояниями с энергиями терагерцового диапазона. С изменением величины барьера за счет приложения внешнего электрического поля появляется возможность управления спектром состояний и более точной подстройки к резонансным переходам.

Особенностью структуры выражений для тока по состояниям (8–9) является зависимость от радиальной координаты, хотя радиальная компонента равна нулю. Это приводит к спиральному виду плотности тока (рис. 3). Соответственно и величина магнитного момента будет иметь подобный вид. Все это дает нетривиальную зависимость тока от приложенного внешнего магнитного поля.

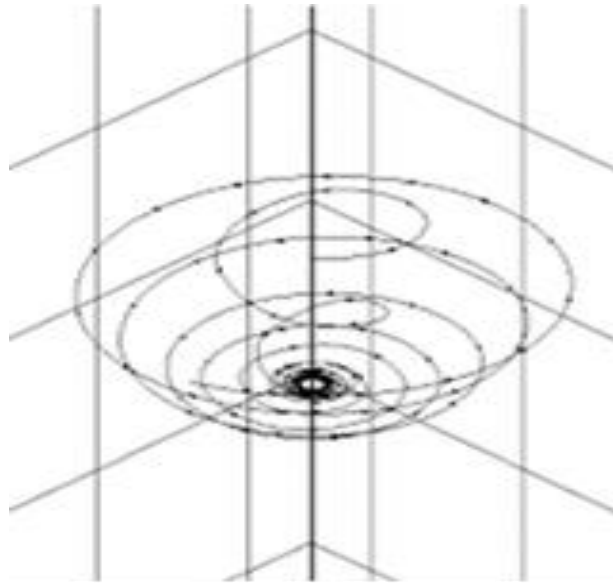


Рис. 3. Спиральное движение зарядов в цилиндрическом барьере ($n = s = j = 1$)

Вычисление тока между состояниями $n \neq m$ приводит к появлению радиальной составляющей, причем мнимой. Это означает, что радиальная составляющая ответственна за поглощение внешнего поля на переходах с разными $n \neq m$.

$$I_p = -ie \frac{\hbar}{\mu} C_2^2 (J_n(p) J_{m-1}(p) - J_n(p) J_{m+1}(p) - J_m(p) J_{n-1}(p) + J_m(p) J_{n+1}(p)), \quad (13)$$

$$I_\varphi = e \frac{\hbar}{\mu} C_2^2 \left[\frac{s}{\rho} J_n(\rho) J_m(\rho) \right], \quad (14)$$

$$I_z = e \frac{\hbar}{\mu} C_2^2 j[J_n(\rho)J_m(\rho)], \quad (15)$$

здесь — $C_2 = [J_{n+1}(kR)J_{m+1}(kR)]^{-1}$.

Необходимо отметить, что радиальная составляющая тока входит только в реактивную часть, а угловая и продольная — в активную.

Характерной особенностью радиальной составляющей «межзонного» тока является изменение ее знака для определенных соотношений $n \neq m$. Это ведет к появлению отрицательной дифференциальной проводимости, которая обеспечивает усиление сигнала.

Таким образом подтверждается предположение о резонансном усилении сигнала на определенных переходах между состояниями $n \neq m$.

Выполняя суммирование по n, m , получим, что радиальная составляющая межзонного тока равна нулю. Это подтверждает компенсацию усиления поглощением на различных переходах внутри барьера. Угловые и продольные компоненты оказываются совпадающими с точностью до постоянного численного множителя.

Кроме того, движение тока через состояния с большими значениями n и m , из-за свойства перемещаемости корней уравнения $J_n(kR) = 0$, дает возможность управления частотной зависимостью тока от внешнего поля. Действительно, разность величин E_{nm} для различных значений n и m неявно, через зависимость корней от высоты потенциального барьера, определяется и величиной приложенного поля. Это предоставляет дополнительную настройку в резонанс, которая может быть осуществлена подстройкой «продольной» составляющей тока, зависящей от длины нанотрубки.

С другой стороны, УНТ как туннельный цилиндрический барьер обладают интересным спектром состояний [8]. Так, спектр состояний определяется корнями функций Бесселя:

$$E_{ik} = U_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\mu_i^2}{R^2} + \frac{k^2}{L^2} \right), \quad (16)$$

где $\mu^2 = [2m(E - U_0)/\hbar^2] - \frac{k^2}{L^2}$, $J_n(x)$ — функция Бесселя целого индекса, μ_i — действительные корни уравнения $J_n(\mu_i R) = 0$, $n, m, k = 0, 1, 2, 3 \dots$, R — радиус УНТ, L — ее длина.

Если определить частоту для разности состояний с большими индексами, то из-за перемещаемости корней функций Бесселя можно найти состояния с частотами порядка нескольких терагерц. Этот факт позволяет высказать предположение, что состояния УНТ как цилиндрического барьера определяют квантовые индуктивность и емкость УНТ.

Заключение. Предложенная интерпретация появления квантовых индуктивности и емкости УНТ носит качественный характер. С другой стороны, она позволяет высказать соображения о физическом механизме появления таких свойств УНТ.

Возникновение дополнительных пиков протекающего тока служит указанием на возбуждение туннельной системы внешним полем. Поэтому, изменяя величину поля, можно осуществлять резонансную настройку системы нанотрубок на определенную частоту внешнего поля.

Такая система является чисто электрической и допускает широкий интервал значений потенциала для настройки в резонанс с внешним полем.

Это тем более необходимо, потому что данная система нанотрубок обладает высокой чувствительностью резонансного туннелирования к величине внешнего поля. Создание регулярной решетки из РТД позволит разработать приборы, отображающие падающие электромагнитные волны с частотой до десятков терагерц. Представленные решетки могут найти широкое применение не только в приемных устройствах, но и для чувствительных сенсоров медицинского назначения.

В то же время немалый интерес вызывает и обратный процесс: квазирезонансное поглощение внешнего поля в такой структуре. Это поглощение приводит к изменению условий прохождения барьера и, соответственно, изменению величины тока и электрического поля [5].

В реальной ситуации появляется потребность учета влияния всегда присутствующего взаимодействия между электронами на процессы квантовой интерференции и резонансного туннелирования.

Последнее следует из того, что сдвиг резонансного уровня за счет взаимодействия на величину малую по сравнению с энергией электрона, но сопоставимую с шириной резонансного уровня резко изменяет резонансный ток. Такой сдвиг может быть обусловлен приложением внешнего поля, причем низкой частоты.

ЛІТЕРАТУРА

1. Handbook of Carbon Nanotubes / Ed. J. Abraham, S. Thomas, N. Kalarikkal. — Switzerland AG: Springer Nature, 2022. — 2112 p. — DOI: 10.1007/978-3-030-91346-5.
2. Schants, H.G. The Art and Science of Ultrawideband Antennas / H.G. Schants. — London: Artech House, 2015. — 593 p.
3. Ultrastrong coupling between electron tunneling and mechanical motion / F. Vigneau, J. Monsel, J. Tabanera [et al.] // Phys. Rev. Research. — 2022. — Vol. 4, iss. 4. — P. 043168. — DOI: 10.1103/PhysRevResearch.4.043168.
4. Chen, A. Nanomaterials based electrochemical sensors for biomedical applications / A. Chen, S. Chatterjee // Chemical Society Reviews. — 2013. — Vol. 42, № 12. — P. 5425–5438. — DOI: 10.1039/C3CS35518G.
5. Burke, P.J. Quantitative Theory of Nanowire and Nanotube Antenna Performance / P.J. Burke, Sh. Li, Z. Yu // IEEE Transactions on Nanotechnology. — 2006. — Vol. 5, № 4. — P. 314–334. — DOI: 10.1109/TNANO.2006.877430.
6. Razavy, M. Quantum Theory of Tunneling / M. Razavy. — 2nd Edition. — World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2014. — 792 p.
7. Watson, G.N. A treatise on the theory of Bessel functions / G.N. Watson. — Cambridge; New York: Cambridge University Press, 1966. — 816 p.
8. Бохан, Ю.И. Система углеродных нанотрубок для приема терагерцового излучения / Ю.И. Бохан // Актуальные проблемы физики твердого тела: сб. докл. X Междунар. науч. конф., Минск, 22–26 мая 2023 г. / НПЦ НАН Беларуси по материаловедению; редкол.: В.М. Федосюк (пред.) [и др.]. — Минск: А.Н. Вараксин, 2023. — С. 494–496.

REFERENCES

1. Handbook of Carbon Nanotubes / Ed. J. Abraham, S. Thomas, N. Kalarikkal. — Switzerland AG: Springer Nature, 2022. — 2112 p. — DOI: 10.1007/978-3-030-91346-5.
2. Schants, H.G. The Art and Science of Ultrawideband Antennas / H.G. Schants. — London: Artech House, 2015. — 593 p.
3. Ultrastrong coupling between electron tunneling and mechanical motion / F. Vigneau, J. Monsel, J. Tabanera [et al.] // Phys. Rev. Research. — 2022. — Vol. 4, iss. 4. — P. 043168. — DOI: 10.1103/PhysRevResearch.4.043168.
4. Chen, A. Nanomaterials based electrochemical sensors for biomedical applications / A. Chen, S. Chatterjee // Chemical Society Reviews. — 2013. — Vol. 42, № 12. — P. 5425–5438. — DOI: 10.1039/C3CS35518G.
5. Burke, P.J. Quantitative Theory of Nanowire and Nanotube Antenna Performance / P.J. Burke, Sh. Li, Z. Yu // IEEE Transactions on Nanotechnology. — 2006. — Vol. 5, № 4. — P. 314–334. — DOI: 10.1109/TNANO.2006.877430.
6. Razavy, M. Quantum Theory of Tunneling / M. Razavy. — 2nd Edition. — World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2014. — 792 p.
7. Watson, G.N. A treatise on the theory of Bessel functions / G.N. Watson. — Cambridge; New York: Cambridge University Press, 1966. — 816 p.
8. Bokhan Yu.I. *Aktualniye problemy fiziki tverdogo tela: sb. dokl. X Mezhdunar. nauch. konf., Minsk, 22–26 maya 2023 g.* [Current Issues of Solid State Physics: Proceedings of the X Intern. Scient. Conf., Minsk, May 22–26, 2023], Minsk: A.N. Varaksin, 2023, pp. 494–496.

Поступила в редакцию 14.07.2025

Адрес для корреспонденции: e-mail: yuibokhan@gmail.com — Бохан Ю.И.