

Квантовый транспорт электронов через осесимметричный контакт зигзагообразной и креслообразной нанотрубок

Ю.А. Клименко

*Институт космических исследований НАН Украины и НКА Украины
пр. акад. Глушкова, 40, г. Киев, 03187, Украина
E-mail: yurkl@ikd.kiev.ua*

Статья поступила в редакцию 19 июля 2010 г., после переработки 30 сентября 2010 г.

В приближении ближайших соседей развит аналитический подход к описанию процессов электронного переноса через осесимметричные контакты зигзагообразной и креслообразной нанотрубок. Предложенный метод приводит к аналитическому выражению для вероятности прохождения электрона и позволяет установить правила отбора, справедливые при его рассеянии. Как функции от диаметра нанотрубки предсказаны осцилляции ширины щели в спектре прохождения электронов и найден минимальный размер щели. Также определены пороги возникновения ступенек в коэффициенте прохождения электронов и показано, что, за исключением своего начального участка, происхождение ступенек связано с электронными характеристиками только креслообразной нанотрубки.

У наближенні найближчих сусідів розвинено аналітичний підхід до опису процесів електронного перенесення через вісесиметричні контакти зигзагоподібної і кріслоподібної нанотрубок. Запропонований метод призводить до аналітичного виразу щодо імовірності проходження електрона і дозволяє встановити правила відбору, які справедливі при його розсіянні. Як функції від діаметру нанотрубки передбачено осциляції ширини щілини в спектрі проходження електронів та знайдено мінімальний розмір щілини. Також визначено пороги виникнення сходинок в коефіцієнті проходження електронів та показано, що, за винятком своєї початкової області, походження сходинок пов'язано з електронними характеристиками тільки кріслоподібної нанотрубки.

PACS: 72.10.Bg Общее описание теории транспорта;
73.22.Dj Одночастичные состояния;
73.63.Fg Нанотрубки;
85.35.Kt Нанотрубочные устройства.

Ключевые слова: Электронный транспорт, коэффициент прохождения, осесимметричный контакт, зигзагообразная и креслообразная нанотрубки.

1. Введение

Современные технологии получения однослойных углеродных нанотрубок (УНТ) в макроскопических количествах положили начало систематическому исследованию электронных свойств этих соединений [1–4]. Длина фазовой когерентности электрона в УНТ составляет несколько микрометров [1–5]. Возникающая за счет этого квантовая интерференция приводит к появлению резонансов, антирезонансов, локальных уровней и прочих явлений, интересных с точки зрения перспективной наноэлектроники. К настоящему моменту времени на однослойных УНТ реализованы многие из

важных элементов наноэлектронных схем: полевые и одноэлектронные транзисторы [6,7], диоды и вентили [8–10], электромеханические датчики [11], химические сенсоры [12] и пр.

Современные экспериментальные методы идентификации однослойных УНТ — сканирующая туннельная микроскопия [13–15], атомная силовая микроскопия, спектроскопия комбинационного рассеяния света [16,17] и пр. — позволяют с высокой степенью точности определить параметры нанотрубки (диаметр и хиральный угол), по которым восстанавливаются индексы ее хиральности [1,3]. Замечательной особенностью однослойных нанотрубок является зависимость элек-

тронных свойств от геометрической структуры нанотрубки, т.е. от индексов хиральности. Точные квантово-механические расчеты, использующие модель сильной связи, предсказывают, что однослойная УНТ с индексами хиральности (m, n) обладает металлическим типом проводимости, если модуль разности этих чисел делится на три. В остальных случаях нанотрубка ведет себя как узкозонный полупроводник [1–4, 18, 19]. Эти теоретические выводы хорошо согласуются с экспериментами по сканирующей туннельной спектроскопии УНТ [13–15], позволяющей — по расстоянию между особенностями Ван Хофа — судить о типе проводимости нанотрубки.

Современные методы синтеза протяженных нанотрубок приводят к топологическим дефектам, которые искажают цилиндрическую форму УНТ и изменяют ее хиральность [4, 6, 20]. В результате по разные стороны от неоднородности могут оказаться нанотрубки с совершенно различным типом электронной проводимости. Одно из таких нанотрубочных соединений представлено на рис. 1, а. Соединение двух нанотрубок с металлическим типом проводимости — зигзагообразной (зНТ) (9, 0) и креслообразной (кНТ) (5, 5) — происходит благодаря наличию одного пентагона и одного гептагона на противоположных сторонах сочленения. Именно такой, локтевой, тип перехода в настоящее время считается перспективным для создания выпрямляющего диода — одного из основных элементов электронных схем [10, 21].

Первые теоретические исследования по электронным свойствам нанотрубочных соединений относятся к 1996 году [20], а первые эксперименты по проводимости

этих соединений были проведены несколькими годами позднее [21, 22].

С появлением новых технологий стал возможен управляемый синтез нанотрубочных сочленений. Как показано в [23], характеристики однослойных УНТ, выращиваемых методом химического осаждения паров этанола, главным образом определяются температурой их синтеза. Скачкообразное увеличение температуры роста приводит к уменьшению диаметра нанотрубок (и наоборот) — этим обеспечивается хорошо воспроизводимое выращивание нанотрубочных соединений с разницей в диаметре до 10%. В работе [24], напротив, предложен метод соединения уже готовых нанотрубок при помощи джоулевого тепла, возникающего при пропускании электрического тока между нанотрубками. Обнаружено, что две нанотрубки с близкими диаметрами «свариваются» при прохождении тока, а пороговые значения напряжения и силы тока демонстрируют очень хорошую воспроизводимость. Эти и другие технологии позволяют надеяться на достаточно скорое получение образцов нанотрубочных соединений заданной геометрии и типа.

С точки зрения теории наибольший интерес представляют собой осесимметричные соединения зигзагообразной (zigzag) и креслообразной (armchair) нанотрубок. Сочленение именно такого типа показано на рис. 1, б и 1, в. Оно обеспечивается кольцом из чередующихся пятиугольников и семиугольников, что возможно лишь для нанотрубок с индексами хиральности $(2N, 0)$ и (N, N) . Отношение диаметров нанотрубок составляет $D^{\text{zig}}/D^{\text{arm}} = 2/\sqrt{3} = 1,1547$, оно не зависит от N и является универсальным параметром осесимметричного перехода. Малость отклонения этого параметра от единицы косвенным образом свидетельствует о возможности получения перехода $(2N, 0)/(N, N)$ методами современной химии и нанотехнологии.

Особенности электронного прохождения через осесимметричные нанотрубочные соединения $(2N, 0)/(N, N)$ впервые были изучены в работе [20]. Именно здесь было теоретически предсказано существование энергетической щели в прохождении электронов через осесимметричные соединения металлического типа (отношение $N/3$ должно быть целым). Существование такой щели, несмотря на наличие проводящих электронных состояний в обеих УНТ, было подтверждено и недавними *ab initio* расчетами [25].

Причину возникновения этой энергетической щели авторы работы [20] связывают с его осевой симметрией. Выяснилось, что собственные волновые функции низкоэнергетических состояний в зНТ и кНТ, которые обеспечивают электронный перенос вблизи энергии Ферми, принадлежат к различным неприводимым представлениям дискретной группы вращений, и это делает невозможной сшивку этих функций на контакте нанотрубок.

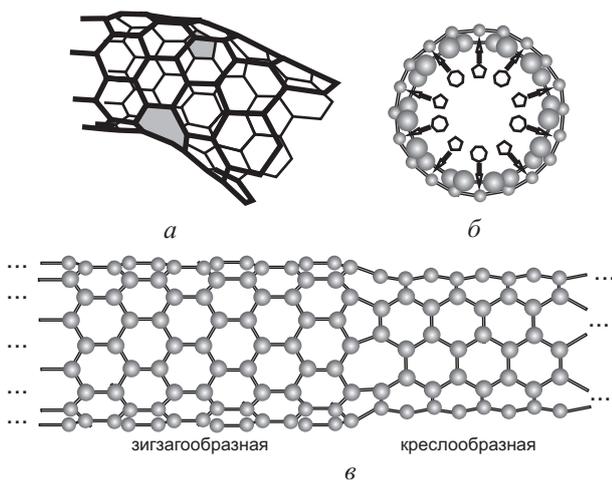


Рис. 1. Локтевое соединение зНТ (9, 0) с кНТ (5, 5), которое образуется с помощью пятиугольника и семиугольника (заштрихованы на рисунке) (а); геометрия кольца из чередующихся пятиугольников и семиугольников, которое осуществляет осесимметричный переход зигзагообразной УНТ (10, 0) в креслообразную УНТ (5, 5) (б); вид сбоку на осесимметричное сочленение из предыдущего рисунка (в).

Существование энергетической щели в прохождении электронов через осесимметричные соединения открывает заманчивые перспективы создания принципиально новых нанoeлектронных приборов. Поскольку низкоэнергетический канал переноса в таких системах блокируется ее осевой симметрией, то нарушение симметрии соединения каким-либо неоднородным воздействием (например, изгибом) приведет к перемешиванию мод на контакте нанотрубок, т.е. к возникновению электрического тока. Как отмечалось в [20] и в ряде других публикаций, на подобном принципе функционирования помимо сенсоров механических напряжений возможно создание датчиков температуры, давления, электромагнитного излучения, химических сенсоров, фотопереключателей и пр.

Впоследствии энергетическая щель, наблюдаемая в коэффициенте прохождения электронов через осесимметричные соединения зНТ/кНТ, получила название симметричной щели. Оказалось, что в неметаллических типах сочленений $(2N,0)/(N,N)$ ее размеры в несколько раз превосходят ширину запрещенной зоны, наблюдаемой в электронном спектре зигзагообразной УНТ [26]. На основе переходов $(2N,0)/(N,N)$ строились и изучались и более сложные классы нанообъектов: квантовые точки [27–29], сверхрешетки [25,30] и пр. Большое внимание уделялось изучению локальных уровней вблизи переходов и возникающим из-за этого аномалиям в коэффициенте электронного прохождения системы [30,31].

В своих исследованиях авторы работ [20,26–32] использовали аппарат неравновесных функций Грина [33], который вполне адекватно описывает транспортные и спектральные характеристики наноразмерных структур. Для объяснения аномалий в коэффициенте прохождения электронов анализировалась локальная плотность электронных состояний (LDOS) либо привлекались симметричные соображения. Необходимо отметить, что метод неравновесных функций Грина в большей части ориентирован на численное моделирование — лишь относительно небольшой класс задач допускает здесь строгое аналитическое решение. К тому же, построенные на его основе алгоритмы позволяют детально изучить электронные характеристики заданной структуры, но затрудняют одновременное изучение всех структур из заданного класса.

В данной работе в рамках модели ближайших соседей предлагается сугубо аналитический метод решения задачи прохождения электронов через осесимметричный переход $(2N,0)/(N,N)$, в котором число N является произвольным. В отличие от работ других авторов, этот метод не предполагает использования аппарата функций Грина и теории симметрии, он основан на точном решении задачи рассеяния в ее «стандартной» постановке. Нами строятся аналитические решения в каждой из УНТ, которые затем сшиваются на контакте

нанотрубок. Учет ортогональности поперечных волновых функций в условиях шивки приводит к правилам отбора, что позволяет получить простую систему линейных уравнений для помодовых амплитуд рассеяния. На основании последних строится и исследуется коэффициент прохождения электронов.

Подобный метод аналитического рассмотрения транспортной задачи был успешно применен автором в недавних работах [34,35], посвященных анализу электронных свойств графеновых полосок, которые, по сути, представляют собой развернутые в плоскость однослойные УНТ.

В отличие от других работ по осесимметричным нанотрубочным переходам, предложенный подход позволяет детально отследить поведение симметричной щели во всем классе соединений $(2N,0)/(N,N)$. Впервые установлено, что ширина щели осциллирует с периодом $(\Delta N)_1 = 6$, огибающая ширины щели — с периодом $(\Delta N)_2 = 55$, а минимальный размер щели равен 2,62 эВ. Также обнаружено, что ширина симметричной щели при числе N , кратном шести, в точности равна модулю резонансного интеграла в модели ближней связи, если $6 \leq N \leq 120$. Показано, что ступенчатый характер поведения транспортной кривой в основном унаследован от характеристик креслообразной нанотрубки, найдены пороги возникновения ступенек на начальном участке кривой прохождения и прояснены причины ее асимметрии.

В разд. 2 работы найдены собственные волновые решения для бесконечных идеальных зНТ и кНТ. Раздел 3 посвящен обсуждению особенностей зонной структуры электронного спектра в каждой из нанотрубок. В разд. 4 определены условия шивки для волновых функций электрона на границе нанотрубок и получены уравнения для амплитуд рассеяния, по которым находится коэффициент прохождения электронов. В разд. 5 обсуждаются основные свойства прохождения электронов через контакт $(2N,0)/(N,N)$. Краткие выводы работы содержатся в разд. 6. В Приложении получены выражения для скорости прохождения электрона в каждой из нанотрубок.

2. Волновые решения для зНТ $(2N, 0)$ и кНТ (N, N)

Геометрии зигзагообразной и креслообразной нанотрубок представлены на рис. 2. Везде далее нанотрубки будут рассматриваться как совокупность элементарных ячеек из двух атомов, $\alpha = A, B$. Координаты $\{n, m\}$ элементарных ячеек могут принимать целые либо полуцелые значения одновременно.

В приближении ближайших соседей компоненты волновой функции электрона $\psi_{n,m,\alpha}^z$ для зигзагообразной УНТ, рис. 2,а, находятся из системы линейных уравнений Шредингера

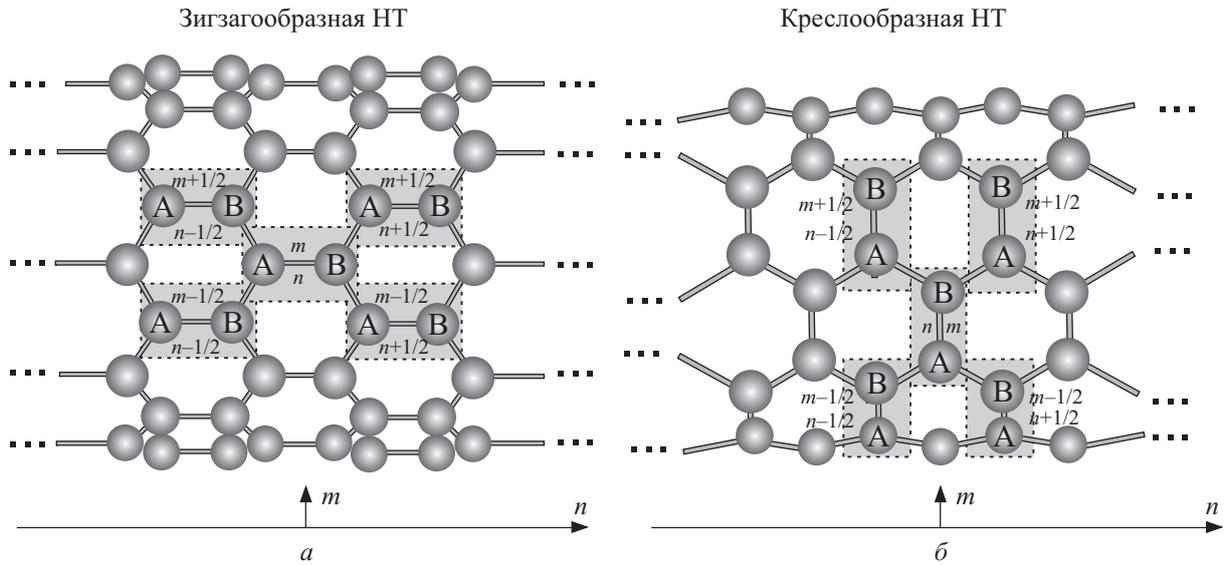


Рис. 2. Схематическое изображение зигзагообразной и креслообразной нанотрубок. Заштрихованные области соответствуют элементарным ячейкам нанотрубок.

$$\begin{cases} -E\Psi_{n,m,A}^z = \Psi_{n,m,B}^z + \Psi_{n-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},B}^z + \Psi_{n-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},B}^z, \\ -E\Psi_{n,m,B}^z = \Psi_{n,m,A}^z + \Psi_{n+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},A}^z + \Psi_{n+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},A}^z, \end{cases} \quad (1)$$

дополненной периодическими граничными условиями в поперечном направлении m . Здесь $E \equiv E/|\beta|$ — безразмерная энергия электрона, $\beta (< 0)$ — резонансный интеграл взаимодействия между соседними атомами в нанотрубке. Координаты элементарных ячеек в зНТ изменяются в пределах $-\infty < n < \infty$ и $1 \leq m \leq 2N$. Собственная энергия электрона на атоме углерода принимается равной нулю.

Нетрудно убедиться (см. [34,35]), что нетривиальная волновая функция электрона в зНТ имеет вид

$$\Psi_{n,m,\alpha}^z(j) = e^{i\sigma k_j n} \chi_j^z(m) \begin{cases} 1, & \alpha = A, \\ e^{i\theta_j}, & \alpha = B. \end{cases} \quad (2)$$

Целочисленный индекс j в (2) задает поперечную моду электрона ($1 \leq j \leq 2N$), $\sigma = \pm 1$, а волновая функция электрона $\chi_j^z(m)$, нормированная в поперечном направлении зНТ, записывается следующим образом:

$$\chi_j^z(m) = \frac{e^{i\xi_j^z m}}{2\sqrt{2N}}, \quad \xi_j^z = \frac{\pi j}{N}. \quad (3)$$

Здесь ξ_j^z — безразмерное волновое число электрона в поперечном направлении нанотрубки.

При заданных значениях энергии E и поперечной моды j электрона его безразмерное продольное волновое число k_j находится из дисперсионного соотношения [1,2,4,19]

$$E^2 = 1 + 4 \cos \frac{\xi_j^z}{2} \cos \frac{k_j}{2} + 4 \cos^2 \frac{\xi_j^z}{2}, \quad (4)$$

а величина θ_j из (2) описывается выражением [34,35]

$$e^{i\theta_j} = -\frac{1 + 2 \cos \frac{\xi_j^z}{2} \exp \frac{i\sigma k_j}{2}}{E}. \quad (5)$$

Вещественные значения продольного волнового числа k_j в (4) определяют области делокализованных состояний электрона в зНТ, здесь $0 \leq k_j / 2 \leq \pi$. Внутри этих энергетических зон функция θ_j является вещественной ($|e^{i\theta_j}| = 1$) и имеет смысл сдвига электронной фазы между атомами A и B в элементарной ячейке.

Направление движения электронной волны (2) определяется знаком ее скорости прохождения. Последняя найдена в Приложении и совпадает с групповой скоростью электрона. Положив в (2)

$$\sigma = s s_j, \quad s = \text{sgn}(E), \quad s_j = \text{sgn}(j - N), \quad (6)$$

мы добиваемся движения электрона слева направо с групповой скоростью

$$v_j^z = \frac{|\sin \theta_j|}{2},$$

см. (П.4). Движение электрона в обратном направлении достигается комплексным сопряжением волнового решения (2).

Волновая функции электрона в креслообразной УНТ (рис. 2,б) находится подобным образом. Ее компоненты удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{cases} -E\Psi_{n,m,A}^a = \Psi_{n,m,B}^a + \Psi_{n-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},B}^a + \Psi_{n+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},B}^a, \\ -E\Psi_{n,m,B}^a = \Psi_{n,m,A}^a + \Psi_{n-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},A}^a + \Psi_{n+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},A}^a, \end{cases} \quad (7)$$

($-\infty < n < \infty$ и $1 \leq m \leq N$) с периодическими граничными условиями поперек нанотрубки. Так как система (7) переходит в (1) одновременной перестановкой индексов $n \leftrightarrow m$, то собственные волновые функции электрона в кНТ могут быть построены из зНТ-решений (2)–(5) заменой поперечных координат и волновых чисел на продольные, и наоборот. В результате дисперсионное соотношение электрона в кНТ приобретает квадратичный вид относительно $\cos(k_j/2)$. Разрешив дисперсию относительно продольных волновых чисел,

$$2\cos\frac{k_j^\pm}{2} = -\cos\frac{\xi_j^a}{2} \pm \sqrt{E^2 - \sin^2\frac{\xi_j^a}{2}}, \quad (8)$$

где

$$\xi_j^a = \frac{2\pi j}{N}, \quad 1 \leq j \leq N, \quad (9)$$

закключаем, что одной и той же поперечной моде j электрона в кНТ отвечают две энергетические ветви дисперсионного соотношения. Собственные волновые функции электрона в каждой из ветвей выглядят следующим образом:

$$\Psi_{n,m,\alpha}^{a+}(j) = e^{-isk_j^+ n} \chi_j^a(m) \begin{cases} 1, & \alpha = A, \\ \exp[i(\xi_j^a/2 + \phi_j)], & \alpha = B, \end{cases}$$

$$\Psi_{n,m,\alpha}^{a-}(j) = e^{isk_j^- n} \chi_j^a(m) \begin{cases} 1, & \alpha = A, \\ -\exp[i(\xi_j^a/2 - \phi_j)], & \alpha = B. \end{cases} \quad (10)$$

Здесь

$$\chi_j^a(m) = \frac{\exp(i\xi_j^a m)}{2\sqrt{N}}, \quad (11)$$

$$e^{i\phi_j} = -\frac{\sqrt{E^2 - \sin^2\frac{\xi_j^a}{2}} - i\sin\frac{\xi_j^a}{2}}{E},$$

а знаковая функция s определяется формулой (6). Если значения E и j отвечают вещественным значениям k_j^\pm , то электронные волны из (10) движутся в направлении слева направо. Групповая скорость такого движения найдена в Приложении и равна

$$v_j^{a\pm} = |\cos\phi_j| \sin\frac{k_j^\pm}{2}.$$

3. Зонная структура энергетического спектра нанотрубок

Зонная структура идеальных зНТ и кНТ определяется из дисперсионных соотношений (4) и (8). Энергетические зоны нанотрубок распадается на подзоны, каждая из которых отвечает своей поперечной моде j . Учитывая симметрию подзон относительно нулевой энергии, опишем их структуру только для положительной области энергетического спектра (зоны проводимости).

Согласно (4) и (8), дно (b) и потолок (t) j -х подзон проводимости в зНТ и кНТ определяются выражениями

$$E_b^z(j) = \min\left|1 \pm 2\cos\frac{\pi j}{2N}\right|, \quad E_t^z(j) = \max\left|1 \pm 2\cos\frac{\pi j}{2N}\right|, \quad 1 \leq j \leq 2N, \quad (12)$$

$$E_{b\pm}^a(j) = \sin\frac{\pi j}{N}, \quad E_{t\pm}^a(j) = \sqrt{5 \pm 4\cos\frac{\pi j}{N}}, \quad 1 \leq j \leq N. \quad (13)$$

Отсюда видно, что подзона $j = N$ в зигзагообразной нанотрубке $(2N, 0)$ вырождается в точку, а подзоны j и $2N - j$ имеют одни и те же границы. Подобное совпадение границ энергетических подзон наблюдается и для креслообразной УНТ, это подзоны j и $N - j$. Подзоны обеих ветвей энергетического спектра кНТ характеризуются одним и тем же дном, но разными потолками. Эти особенности легко проследить на рис. 3, где представлена зонная структура энергетического спектра электрона в нанотрубках $(2N, 0)$ и (N, N) для случаев $N = 9$ и $N = 10$.

На основании формул (12), (13) легко записать условие отсутствия фундаментальной энергетической щели Δ в энергетическом спектре каждой из нанотрубок. Зигзагообразная УНТ $(2N, 0)$, для которой $\Delta = 2\min_{j=1}^{2N}[E_b^z(j)]$, приобретает металлический тип проводимости ($\Delta = 0$), только если число N кратно трем. Отсутствие энергетической щели в таких нанотрубках обеспечивают поперечные моды $j = 2N/3$ и $j = 4N/3$, которые имеют бесщелевой электронный спектр (см. рис. 3,а). В остальных случаях зигзагообразная УНТ является полупроводником: $\Delta \neq 0$, как это видно на рис. 3,б.

Поскольку поперечная мода $j = N$ в креслообразной УНТ всегда является бесщелевой (см. рис. 3,в и 3,г), то фундаментальная энергетическая щель в кНТ отсутствует. Это наделяет идеальную креслообразную нанотрубку (N, N) свойствами металла вне зависимости от ее диаметра.

Результаты, касающиеся электронной проводимости нанотрубок $(2N, 0)$ и (N, N) , повторяют ранее известные результаты из обзоров [1,2,4,19]. Используемая здесь методика анализа необходима для последующего изложения материала.

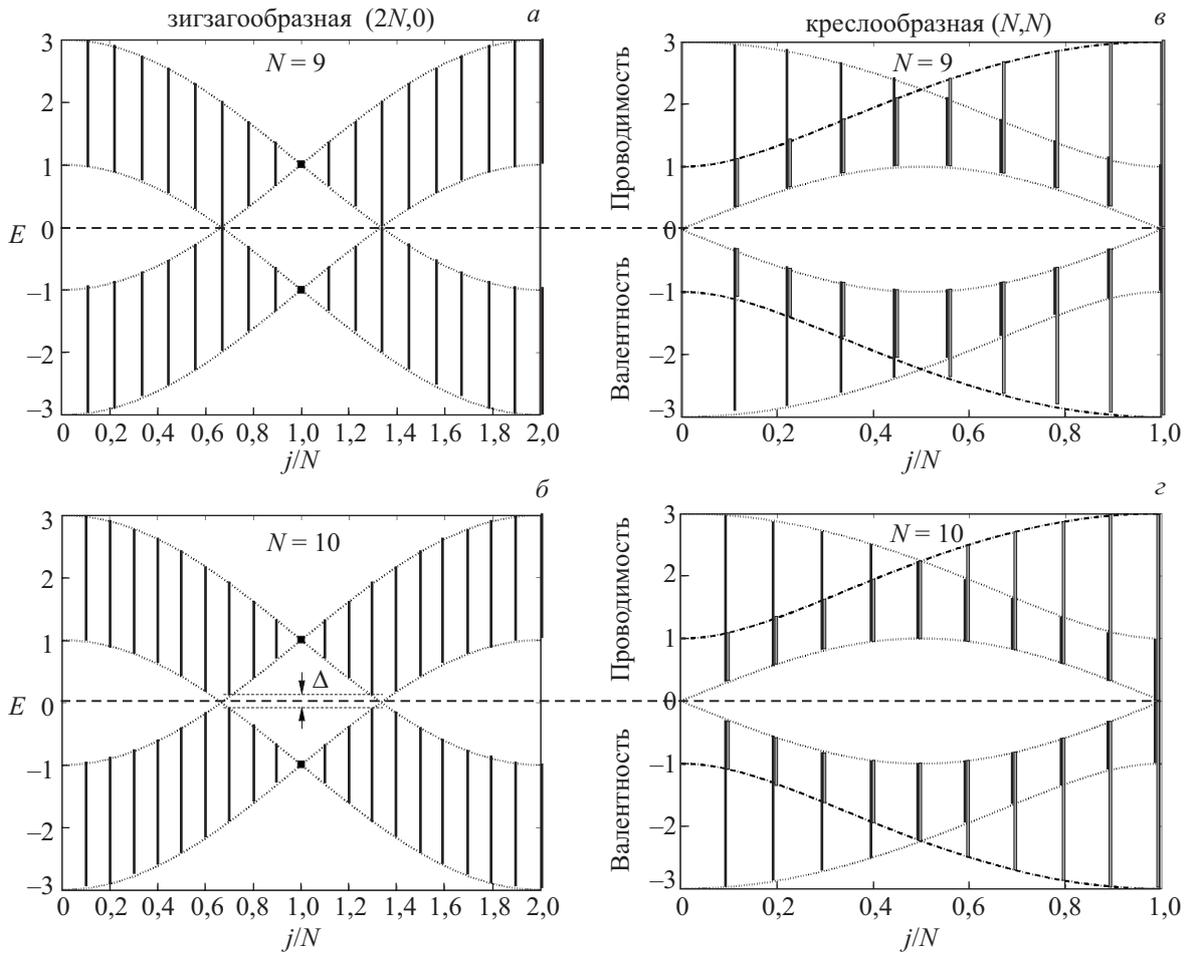


Рис. 3. Зонная структура энергетического спектра электрона в зигзагообразной $(2N,0)$ и креслообразной (N,N) нанотрубках, $N=9$ и $N=10$. Вертикальные линии отвечают энергетическому расположению подзон, серые и пунктирные кривые являются огибающими подзонных границ. Фундаментальная энергетическая щель Δ является минимальной щелью среди всех возможных.

4. Уравнения для амплитуд рассеяния и численное моделирование

Геометрия соединения двух нанотрубок представлена на рис. 4. Чтобы получить условия для сшивки волновых решений на границе соединения, нам необходимо записать уравнения Шредингера для граничных углеродов и сравнить структуру полученных уравнений с соответствующими уравнениями Шредингера (1), (7) для бесконечных зНТ и кНТ. Тем самым мы приходим к следующим условиям сшивки:

$$\Psi_{0,m,B}^{\bar{z}} = \begin{cases} \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{m}{2}, A}^a, & m = 1, 3, \dots, 2N-1, \\ \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{m-1}{2}, B}^a, & m = 2, 4, \dots, 2N, \end{cases} \quad (14)$$

$$\Psi_{0,m,B}^a = \Psi_{0,2m+1,A}^{\bar{z}}, \quad \Psi_{0,m,A}^a = \Psi_{0,2m,A}^{\bar{z}}, \quad m = 1, \dots, N. \quad (15)$$

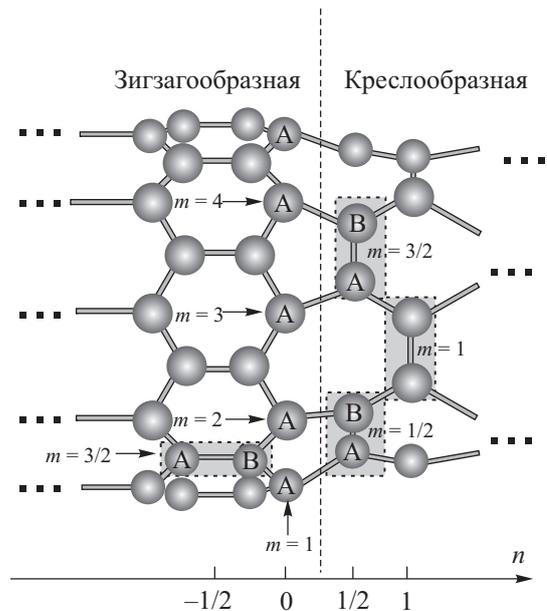


Рис. 4. Геометрия контакта между зигзагообразной и креслообразной нанотрубками.

Прежде чем воспользоваться ими, нам необходимо привести полные решения для волновых функций электрона, которые отвечают задаче его прохождения

из левой нанотрубки (zigzag) в правую (armchair). Решения для зНТ строятся из состояний (2). Имеем

$$\Psi_{n,m,\alpha}^z(j) = \sum_{j=1}^{2N} \chi_j^z(m) \begin{cases} \delta_{j,j_0} e^{iss_j k_j n} + r_j e^{-iss_j k_j n}, & \alpha = A, \\ \delta_{j,j_0} e^{i(ss_j k_j n + \theta_j)} + r_j e^{-i(ss_j k_j n + \theta_j)}, & \alpha = B, \end{cases} \quad (16)$$

Индекс $1 \leq j_0 \leq 2N$ в (16) определяет номер поперечной моды падающей волны. Если заданным значениям E и j отвечает вещественное значение k_j , то коэффициент r_j в (16) имеет смысл амплитуды отражения электронной волны из моды j_0 в моду j . Если число k_j принимает комплексное значение, то следует так распорядиться его знаком, чтобы вторые слагаемые в (16) затухали в глубь зНТ, $\text{Im}(ss_j k_j) > 0$. Сомножитель r_j при таких решениях определяет амплитуду затухающей волны, возбужденной падающей электронной волной.

Подобным образом, используя собственные состояния (10) для электрона в кНТ, может быть записано следующее волновое решение для правой нанотрубки:

$$\Psi_{n,m,\alpha}^a(j) = \sum_{j=1}^N \chi_j^a(m) \begin{cases} t_j^+ e^{-isk_j^+ n} + t_j^- e^{isk_j^- n}, & \alpha = A, \\ e^{i\xi_j^a/2} \left[t_j^+ e^{-i(sk_j^+ n - \phi_j)} - t_j^- e^{i(sk_j^- n - \phi_j)} \right], & \alpha = B. \end{cases} \quad (17)$$

Формула (17) включает в себя как проводящие, так и затухающие волновые решения. Если k_j^\pm — вещественно, то величина t_j^\pm представляет собой амплитуду прохождения по соответствующей поперечной моде правой нанотрубки. В случае комплексности k_j^\pm необходимо выбрать то из его значений, которое описывает затухающую волну в кНТ. Именно, $\text{Im}(sk_j^+) < 0$ и $\text{Im}(sk_j^-) > 0$.

Волновые решения (16), (17) следует подставить в условия сшивки (14), (15), а затем воспользоваться условиями ортогональности поперечных волновых функций электрона. В результате приходим к системе четырех линейных уравнений относительно амплитуд рассеяния r_j , r_{N+j} , t_j^+ и t_j^- , здесь $1 \leq j \leq N$. В обозначениях

$$\bar{r}_j = r_j + \delta_{j,j_0}, \quad \Phi_j^{\sigma_1 \sigma_2} = 1 + \sigma_1 e^{i\sigma_2 \phi_j}$$

эти уравнения выглядят следующим образом:

$$\begin{cases} \bar{r}_j + \bar{r}_{N+j} = \sqrt{2}(t_j^+ + t_j^-), \\ \bar{r}_j - \bar{r}_{N+j} = \sqrt{2}(t_j^+ e^{i\phi_j} - t_j^- e^{-i\phi_j}), \\ t_j^+ \Phi_j^{++} e^{ik_j^+/2} + t_j^- \Phi_j^{--} e^{ik_j^-/2} = \sqrt{2} \left(\bar{r}_j e^{-i\theta_j} + 2i\delta_{j,j_0} \sin \theta_{j_0} \right), \\ t_j^+ \Phi_j^{+-} e^{ik_j^+/2} + t_j^- \Phi_j^{-+} e^{ik_j^-/2} = -\sqrt{2} \left(\bar{r}_{N+j} e^{-i\theta_{N+j}} + 2i\delta_{N+j,j_0} \sin \theta_{N+j_0} \right). \end{cases} \quad (18)$$

Здесь $j = 1, \dots, N$ и $1 \leq j_0 \leq 2N$.

Разрешив систему (18) относительно амплитуд прохождения t_j^\pm , получим систему из двух неоднородных линейных уравнений

$$\begin{cases} t_j^+ \Phi_j^{++} \left(e^{-isk_j^+/2} - e^{-i\theta_j} \right) + t_j^- \Phi_j^{--} \left(e^{isk_j^-/2} - e^{-i\theta_j} \right) = 2i\sqrt{2}\delta_{j,j_0} \sin \theta_{j_0}, \\ t_j^+ \Phi_j^{+-} \left(e^{-isk_j^+/2} + e^{-i\theta_{N+j}} \right) + t_j^- \Phi_j^{-+} \left(e^{isk_j^-/2} + e^{-i\theta_{N+j}} \right) = -2i\sqrt{2}\delta_{N+j,j_0} \sin \theta_{N+j_0}. \end{cases} \quad (19)$$

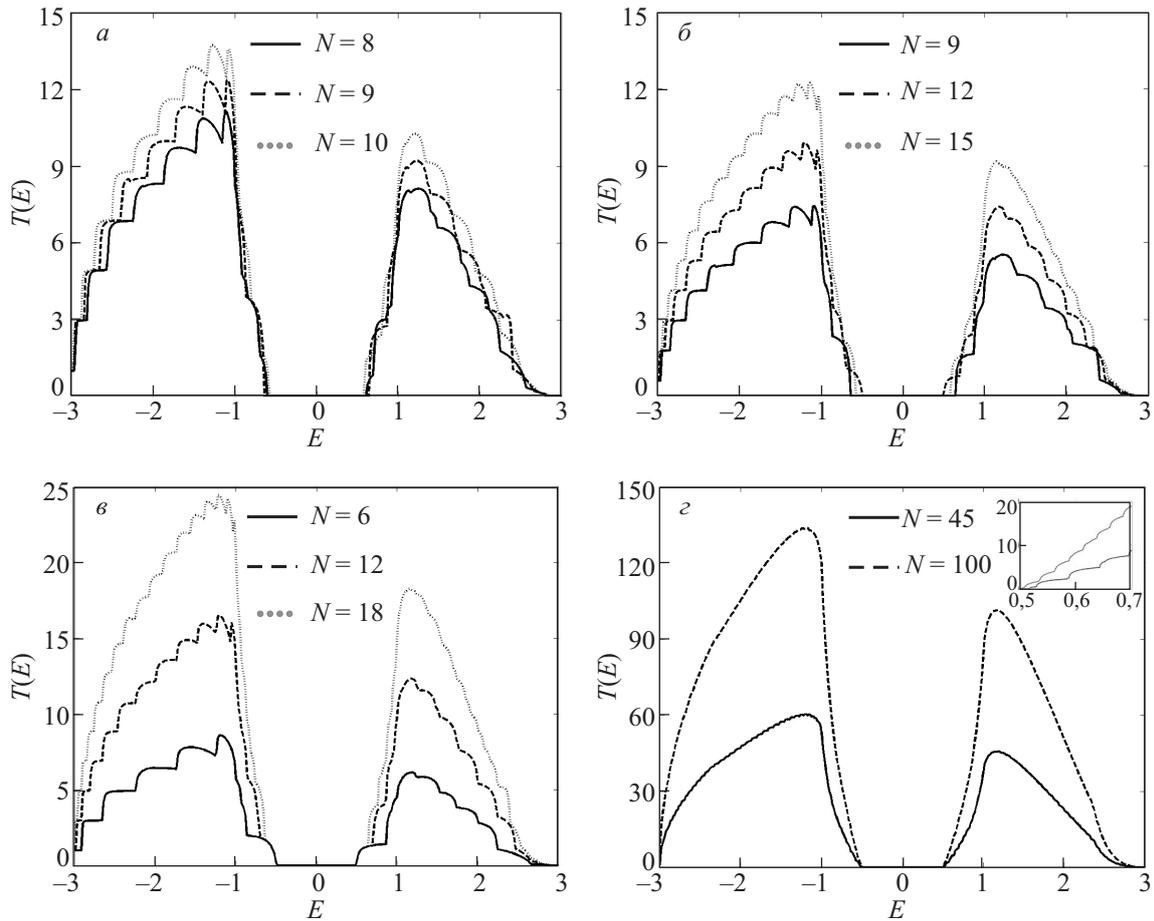


Рис. 5. Коэффициент прохождения электронов через осесимметричный нанотрубчатый контакт $(2N,0)/(N,N)$. Значения N приведены на рисунке.

Найдя очевидные решения системы уравнений (19) и используя выражения для групповых скоростей электрона в нанотрубках, легко определить искомые помодовые вероятности прохождения электронных волн,

$$T_{j,j_0}^{\pm} = \frac{v_j^{a\pm}}{v_{j_0}^z} |t_j^{\pm}|^2. \quad (20)$$

Коэффициент прохождения электронов находится по формуле

$$T(E) = \sum_{j,j_0} \left(T_{j,j_0}^+ + T_{j,j_0}^- \right),$$

нижние индексы в которой пробегает номера всех распространяющихся поперечных мод с заданной энергией E электрона.

На рис. 5 представлены графики коэффициента прохождения $T(E)$ для различных нанотрубчатых переходов из класса $(2N,0)/(N,N)$. Рисунок 5,а иллюстрирует поведение коэффициента прохождения для соединений различных типов: металл–металл ($N=9$) либо полупроводник–металл ($N=8, 10$). Обращают на себя внимание малые отклонения в ширине симмет-

ричной щели. На рис. 5,б, построенном для соединений металлического типа, $N=9, 12, 15$, наблюдается немонотонная зависимость ширины щели с увеличением числа N , в то время как для еще одной «металлической» последовательности, $N=6, 12, 18$ (рис. 5,в), ширина щели остается постоянной. В случае больших N различие в ширинах запрещенной зоны выражено относительно слабо, см. вставку на рис. 5,г.

Эти и другие особенности поведения коэффициента прохождения обсуждаются в следующем разделе.

5. Основные свойства коэффициента прохождения

Прежде всего остановимся на правилах отбора, которые следуют из системы уравнений (18) и касаются номеров мод, возбуждаемых падающим электроном. Из структуры уравнений видно, что электронная волна с модой $j (\leq N)$ или $N+j$ может пройти в правую нанотрубку только по j -й моде (и по обеим ветвям энергетического спектра) и отразиться от контакта по модам j и $N+j$. Везде далее группу, состоящую из этих поперечных мод, будем называть j -й группой.

Легко понять, что j -я группа мод участвует в электронном переносе (т.е. канал j становится открытым),

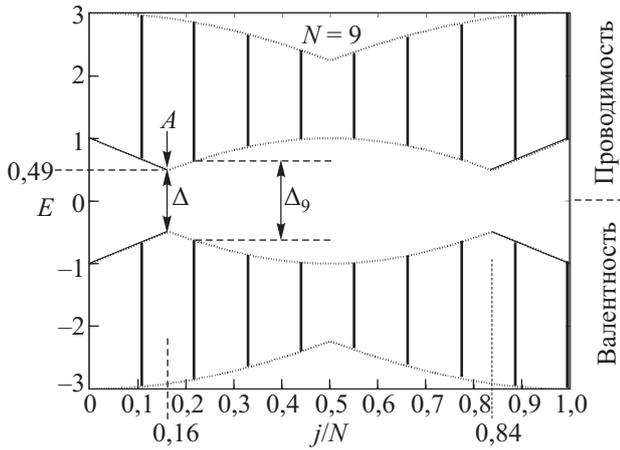


Рис. 6. Окна прохождения (показаны вертикальными отрезками) j -й группы поперечных мод через соединение $(2N,0)/(N,N)$ для случая $N=9$. Непрерывные (пунктирные) линии являются огибающими границ окон прохождения и различают вклады зигзагообразной (креслообразной) нанотрубок. Параметр Δ задает минимально возможную щель в коэффициенте прохождения, Δ_9 — размер симметричной щели при $N=9$.

только если внутри этой группы имеется хотя бы по одной проводящей моде в каждой из УНТ. Область существования проводящих мод в зНТ совпадает с интервалом энергий, который является объединением подзон j и $N+j$; проводящие моды в кНТ существуют на объединении j -х подзон от обеих ветвей (\pm) энергетического спектра. Пересечение этих множеств задает энергетические окна, внутри которых j -й канал прохождения становится открытым. В качестве иллюстрации вертикальные отрезки на рис. 6 соответствуют положению окон прохождения в структуре $(2N,0)/(N,N)$ при $N=9$. Остальные линии на рисунке относятся к огибающим оконных границ; последние строятся на основании зависимостей (12) и (13). В случае, когда

поведение огибающей унаследовано от креслообразной нанотрубки, огибающая изображена пунктиром.

Энергетическая щель Δ_N , наблюдаемая в коэффициенте прохождения осесимметричных соединений, очевидно, совпадает с интервалом, который не принадлежит ни к одному из окон прохождения. Для $N=9$ эта область показана на рис. 6. В случае произвольных значений N размер симметричной щели должен превышать значение Δ . Чтобы найти это значение, заметим, что точка A на рисунке, которая определяет минимальный размер щели, является точкой пересечения кривых $1+2\cos[\pi(1+x)/2]$ и $\sin(\pi x)$, где $x \equiv j/N$, см. (12) и (13). Отсюда находим абсциссу точки пересечения

$$x^* \equiv j^*/N \approx 0,16361, \tag{21}$$

которая приводит к следующему значению для минимальной ширины симметричной щели: $\Delta = 2\sin(\pi x^*) \approx 0,9833$.

Из формулы (21) также легко определить номер окна, нижняя граница которого лимитирует размер симметричной щели. Поскольку число $j^* = 0.16361N$ вещественное, то номер окна совпадает с одним из целых чисел, между которыми располагается j^* . В частности, для $N=55$ получаем $j^* = 8,999$, т.е. симметричная щель формируется окном прохождения $j=9$. Малость отклонения между j^* и j говорит о том, что размер щели фактически совпадает со своим нижним пределом, $\Delta_{55} = \Delta$. Таких же минимальных ширин следует ожидать и для чисел N , кратных 55.

На рис. 7 приведен график зависимости ширины симметричной щели Δ_N от числа N . Кривая строится на основе зависимостей (12), (13) с привлечением рис. 6. Левая панель соответствует области умеренных значений N , правая панель показывает поведение кривой Δ_N для больших диаметров нанотрубок. Отчетливо заметен осциллирующий характер зависимости

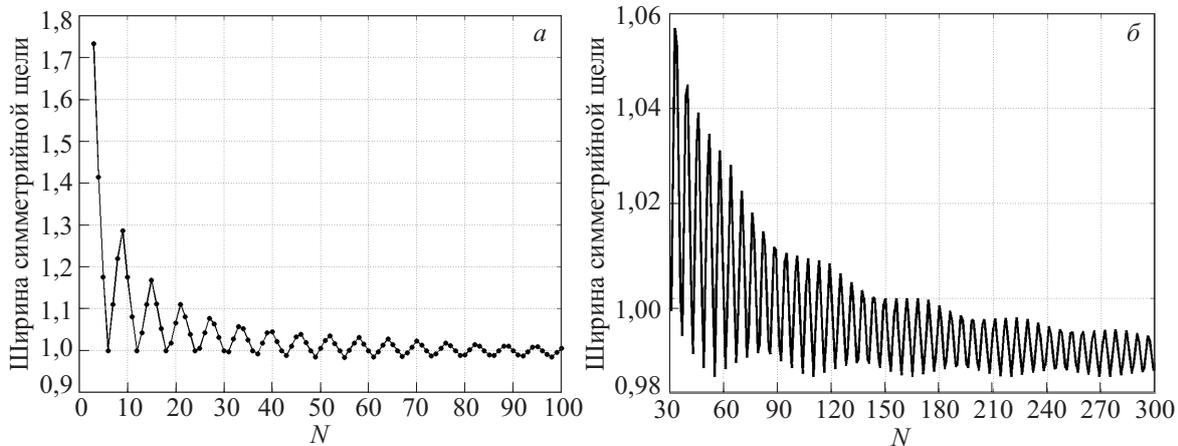


Рис. 7. Зависимость ширины симметричной щели в переходах $(2N,0)/(N,N)$ от числа N : $3 \leq N \leq 100$ (а), $30 \leq N \leq 300$ (б).

кривой Δ_N и ее огибающих. Период осцилляции нижней огибающей, как уже было установлено, близок к 55.

Чтобы оценить значение периода осцилляций функции Δ_N , в формуле (21) заменим число x^* близкой к нему рациональной дробью $(1/6)$ и рассмотрим семейство соединений, для которых $N = 6p + 3$, p — целое. Из (21) получаем $j^* = p + 1/2$, т.е. степень отклонения между j^* и ближайшим целым числом достигает максимума именно в этом классе соединений. Привлекая рис. 6, видим, что подобные отклонения приводят к локальному максимуму в ширине симметричной щели. Таким образом, можно утверждать, что период осцилляций кривой Δ_N близок к 6.

По сути, значение первичного периода осцилляции ширины щели совпадает с целой частью числа $1/x^* \approx 6,11$, $(\Delta N)_1 = 6$, в то время как его дробная часть $\{1/x^*\}$ характеризует вторичный период осцилляций $(\Delta N)_2$: $(\Delta N)_2/(\Delta N)_1 \approx \{1/x^*\}^{-1} \approx 9$.

Близость отношения $1/x^*$ к шести указывает на уникальность семейства $N = 6p$ (p — целое) в классе структур $(2N, 0)/(N, N)$. Как следует из (21), в этом семействе $j^* \approx 0,98p$, т.е. размер симметричной щели регулируется окном прохождения $j = p$ по крайней мере до значений $p = 20$. Это приводит к постоянству отношения $j/N (= 1/6)$ и к неизменности ширины симметричной щели: $\Delta_{N=6p} = 2 \sin(\pi/6) = 1$, если $6 \leq N \leq 120$.

Приведенные выше аналитические результаты показывают, что при $N > 5$ размер симметричной щели колеблется в пределах $0,98 < \Delta_N < 1,3$. Для разных N результаты анализа полностью согласуются с графиками на рис. 5. Ниже остановимся на других особенностях в поведении транспортных кривых.

В отличие от идеальных зНТ $(2N, 0)$ и кНТ (N, N) , где номера низкоэнергетических мод близки к $2N/3$, $4N/3$ (зНТ) и к N (кНТ) (см. рис. 3), открытие канала прохождения в переходах $(2N, 0)/(N, N)$ обеспечивается группами мод с номерами, близкими к $N/6$ и $5N/6$ (см. рис. 6). Последовательное открытие этих каналов придает начальному участку коэффициента прохождения ступенчатую форму. Пороги открытия каналов $E(j)$ (т.е. появление очередной ступеньки в коэффициенте прохождения) легко определить из рис. 6, заметив, что при $|E| < 1$ огибающие границ окон прохождения хорошо аппроксимируются линейными кривыми. В результате получим две последовательности равноудаленных энергий

$$|E^z(j)| = \frac{\Delta}{2} + \pi \cos \frac{\pi x^*}{2} \left(\frac{j}{N} - x^* \right) \approx 0,49 + 3,04 \left(\frac{j}{N} - 0,16 \right)$$

$$|E^a(j)| = \frac{\Delta}{2} + \pi \cos(\pi x^*) \left(\frac{j}{N} - x^* \right) \approx 0,49 + 2,74 \left(\frac{j}{N} - 0,16 \right).$$

Здесь $j/N > 0,16$; верхний индекс в формулах указывает на тип нанотрубки, благодаря которой образуется ступенька в коэффициенте прохождения.

Таким образом, квантование начального участка в коэффициенте прохождения ($|E| < 1$) обеспечивается вкладами от обеих нанотрубок, а по порогам открытия ступенек можно судить о диаметре нанотрубочного соединения. В остальных областях, $|E| > 1$, ступенчатый вид коэффициента прохождения регулируется зонным строением только креслообразной УНТ, как это можно понять из рис. 6.

Поскольку зонная структура идеальных зНТ и кНТ обнаруживает симметрию относительно нулевой энергии, а коэффициент прохождения электронов через соединение этих нанотрубок является несимметричным относительно этой точки, укажем основную причину асимметрии этой транспортной кривой. Симметрия электронных свойств изолированных нанотрубок связана с их принадлежностью к классу альтернантных углеводородов — в модели сильной связи спектр последних всегда симметричен относительно собственной энергии углеродного атома [36]. Асимметрия свойств коэффициента прохождения возникает из-за нарушения условий альтернантности на стыке нанотрубок — как видно на рис. 4, пятиугольники и семиугольники кольца, которое формирует соединение, обнаруживают наличие прямых связей между атомами одного и того же типа (А).

На рис. 8 приведены помодовые графики вероятности прохождения через соединение $(2N, 0)/(N, N)$ для случая $N = 18$. Зависимости построены на основании формулы (20). (Напомним, что коэффициент прохождения электронов определяется как сумма помодовых вероятностей прохождения.) Видно, что прохождение первых и последних мод в валентной зоне является практически совершенным, в то время как прохождение этих мод в зоне проводимости существенно подавлено.

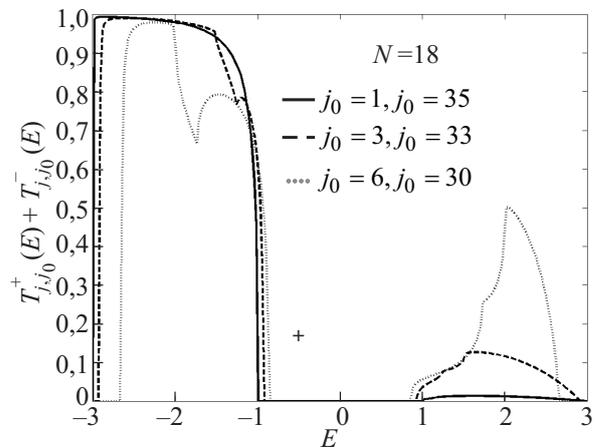


Рис. 8. Помодовые вероятности прохождения электронной волны через нанотрубочное соединение $(2N, 0)/(N, N)$ для случая $N = 18$.

лено. Именно эти различия в помодовых коэффициентах прохождения, которые возникают из-за нарушения условия альтернантности на переходе между нанотрубками, и являются причиной асимметрии транспортных характеристик осесимметричных контактов $(2N, 0)/(N, N)$.

6. Краткие выводы

Недавно открытые технологии по управляемому синтезу нанотрубочных соединений дают основание надеяться на скорое получение экспериментальных образцов наноконтактов заранее заданной геометрии и типа. Теоретическое изучение свойств осесимметричных нанотрубочных сочленений $(2N, 0)/(N, N)$ указывает на существование энергетической щели в коэффициенте прохождения электронов, вызванное осевой симметрией контакта. Нарушение симметрии контакта внешней силой приводит к возникновению низкоэнергетического переноса, что может быть использовано для создания принципиально новых устройств молекулярного масштаба.

В работе предложен чисто аналитический подход к описанию свойств электронного транспорта через осесимметричное соединение зигзагообразной и креслообразной нанотрубок. Имеющиеся на сегодняшний день публикации в этом направлении касаются только результатов численного моделирования, основанного на формализме неравновесных функций Грина.

Были установлены правила отбора при рассеянии электрона через переход нанотрубок. Эти правила являются следствием осевой симметрии соединения и ортогональности собственных волновых функций электрона в поперечном направлении. На основании правил отбора были определены каналы прохождения системы. Их изучение показало, что энергетическая щель Δ_N , наблюдаемая в коэффициенте прохождения электронов, имеет нижний предел, равный 0,98. В размерных величинах это составляет 2,62 эВ, если воспользоваться общепринятым значением для резонансного интеграла между соседними углеродными атомами в нанотрубках, $\beta = -2,66$ эВ.

Ширина симметричной щели в коэффициенте прохождения через систему, рассматриваемая в зависимости от числа N , демонстрирует первичные и вторичные осцилляции. Их периоды соответственно близки к 6 и 55. Также показано, что в семействе соединений $N = 6p$, p — целое, величина симметричной щели остается постоянной вплоть до значений $p = 20$. Эта ширина в точности равна резонансному интегралу β .

В работе установлено, что ступенчатое поведение коэффициента прохождения на начальном участке ($|E| < 1$) определяется вкладами от обеих нанотрубок, формирующих переход. Аналитически найдены пороги возникновения ступенек. В областях $|E| > 1$ коэффициент прохождения через систему определяется

свойствами только креслообразной составляющей перехода. Также прояснена причина наблюдаемого различия в коэффициенте прохождения электронов через валентную зону и зону проводимости.

Экспериментальную проверку предсказанных в работе эффектов можно осуществить путем измерения низкотемпературной проводимости нанотрубочного перехода как функции от потенциала на затворе, который помещается в область контакта двух нанотрубок. Согласно теории Ландауэра–Буттикера [33], проводимость наноструктуры при нулевой температуре и малой разности прикладываемых потенциалов совпадает с коэффициентом прохождения через систему с точностью до множителя $2e^2/h$. Следует ожидать, что предсказанный в работе ступенчатый вид квантовой проводимости, наблюдаемый при $T = 0$, будет дополнительно размываться при повышении температуры и исчезнет, если расстояние δ между ступеньками станет сравнимым с kT . Для оценки степени температурного влияния на наблюдаемый ступенчатый характер проводимости нанотрубочного перехода $(2N, 0)/(N, N)$ воспользуемся графиками, которые представлены на рис. 5. Определив из них характерное расстояние между ступеньками $\delta \sim 0,1|\beta|$, заключаем, что характерная температура размывтия ступенек в квантовой проводимости нанотрубочного перехода превосходит комнатную даже для случая широких нанотрубок.

Работа выполнена в рамках Государственной целевой научно-технической программы «Нанотехнологии и наноматериалы», грант 1.1.1.33, и при поддержке гранта УНТЦ, №21-4930/08. Автор благодарен А. Шевцову за полезные замечания, учтенные в окончательной версии работы.

Приложение. Скорость прохождения электронной волны в зНТ и кНТ

Чтобы получить выражение для скорости прохождения электрона в зигзагообразной УНТ, будем стартовать из нестационарного уравнения Шредингера

$$\begin{cases} \hat{\Psi}_{n,m,A}^z = i \frac{|\beta|}{\hbar} \left(\Psi_{n,m,B}^z + \Psi_{n-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},B}^z + \Psi_{n-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},B}^z \right), \\ \hat{\Psi}_{n,m,B}^z = i \frac{|\beta|}{\hbar} \left(\Psi_{n,m,A}^z + \Psi_{n+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},A}^z + \Psi_{n+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},A}^z \right). \end{cases}$$

Домножим первое (второе) уравнение на $\Psi_{n,m,A}^{z*}$ ($\Psi_{n,m,B}^{z*}$) и сложим результат с его комплексным сопряжением. Полученные уравнения сложим друг с другом, а затем просуммируем по индексу m от 1 до $2N$. Это уравнение удобно представить следующим образом:

$$-\frac{d}{dt} \sum_{m=1}^{2N} \left[|\Psi_{n,m,A}^z|^2 + |\Psi_{n,m,B}^z|^2 \right] = \frac{2|\beta|}{\hbar} (v_n^l + v_n^r). \quad (\text{П.1})$$

Здесь введены обозначения

$$v_n^l = 2\text{Im} \sum_{m=1}^{2N} \left[\psi_{n-\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}, B}^z + \psi_{n-\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}, B}^z \right] \psi_{n, m, A}^{z*}, \quad (\text{П.2})$$

$$v_n^r = 2\text{Im} \sum_{m=1}^{2N} \left[\psi_{n+\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}, A}^z + \psi_{n+\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}, A}^z \right] \psi_{n, m, B}^{z*},$$

которые имеют смысл безразмерной скорости прохождения электронов в ЗНТ.

Левая часть уравнения (П.1) представляет собой скорость изменения полной вероятности нахождения электрона в слое n . Такое изменение возможно лишь за счет ухода электрона из этого слоя. Поэтому правая часть формулы (П.1) определяет суммарный электронный поток через левую (l) и правую (r) границы n -го слоя.

Для определенности безразмерную скорость электрона будем определять формулой (П.2). При подстановке сюда выражения (2) для собственной волновой функции электрона можно получить

$$v_j^z = \cos \frac{\xi_j^z}{2} \sin \left(\frac{\sigma k_j}{2} - \theta_j \right) = -\frac{\sigma}{E} \cos \frac{\pi j}{2N} \sin \frac{k_j}{2}. \quad (\text{П.3})$$

Здесь были использованы формулы (3), (5) из основного текста. Таким образом, определяя знаковую функцию σ в виде (6), добьемся положительности выражения для скорости прохождения,

$$v_j^z = \left| \frac{\cos \frac{\pi j}{2N}}{E} \right| \sin \frac{k_j}{2} = \frac{|\sin \theta_j|}{2}. \quad (\text{П.4})$$

Это означает движение электронной волны в сторону больших n , т.е. в направлении слева направо.

Для нахождения скорости прохождения электрона в креслообразной УНТ следует исходить из нестационарной системы уравнений

$$\begin{cases} \dot{\psi}_{n, m, A}^a = i \frac{|\beta|}{\hbar} \left(\psi_{n, m, B}^a + \psi_{n-\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}, B}^a + \psi_{n+\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}, B}^a \right), \\ \dot{\psi}_{n, m, B}^a = i \frac{|\beta|}{\hbar} \left(\psi_{n, m, A}^a + \psi_{n-\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}, A}^a + \psi_{n+\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}, A}^a \right) \end{cases}$$

и проделать такую же процедуру, как и для ЗНТ. Окончательно будем иметь

$$v^z = 2 \text{Im} \sum_{m=1}^N \left[\psi_{n+\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}, B}^a \psi_{n, m, A}^{a*} + \psi_{n+\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}, A}^a \psi_{n, m, B}^{a*} \right]. \quad (\text{П.5})$$

Подстановка в (П.5) формул (10) для двух типов волновых функций электрона в кНТ приводит к следующим выражениям для скоростей электрона:

$$v_j^{a\pm} = -s \sin \frac{k_j^\pm}{2} \cos \phi_j =$$

$$= \frac{\sqrt{E^2 - \sin^2 \frac{\xi_j^a}{2}}}{|E|} \sin \frac{k_j^\pm}{2} = |\cos \phi_j| \sin \frac{k_j^\pm}{2}. \quad (\text{П.6})$$

В заключение отметим, что скорость прохождения электрона в УНТ обоих типов совпадает с соответствующей групповой скоростью электронной волны. В этом легко убедиться из соответствующих дисперсионных соотношений (4), (8), используя стандартное определение для групповой скорости — как первой производной от энергии электрона по продольному волновому числу.

1. M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and P.C. Eklund, *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, Academic, San Diego (1996).
2. А.В. Елецкий, *УФН* **172**, 401 (2002).
3. А.В. Елецкий, *УФН* **167**, 945 (1997).
4. J.-C. Charlier, X. Blase, and S. Roshe, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 677 (2007).
5. L.C. Venema, J.W.G. Wildoer, J.W. Janssen, S.J. Tans, H.L.J.T. Tuinstra, L.P. Kouwenhoven, and C. Dekker, *Science* **283**, 52 (1999).
6. J. Tans, A.R.M. Verschueren, and C. Dekker, *Nature* **393**, 49 (1998).
7. M. Bockrath, D.H. Cobden, P.L. McEuen, N.G. Chopra, A. Zettl, A. Thess, and R.E. Smalley, *Science* **275**, 1922 (1997).
8. P.G. Collins, A. Zettl, H. Bando, A. Thess, and R.E. Smalley, *Science* **278**, 100 (1997).
9. J.U. Lee, P.P. Gipp, and G.M. Heller, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 145 (2004).
10. Z. Yao, H.W.Ch. Postma, L. Balents, and C. Dekker, *Nature* **402**, 273 (1999).
11. V. Sazonova, Y. Yaish, H. Ustunel, D. Roundy, T.A. Arias, and P.L. McEuen, *Nature* **431**, 284 (2004).
12. J. Kong, N. Franklin, C. Zhou, S. Peng, J.J. Cho, and H. Dai, *Science* **287**, 622 (2000).
13. L.C. Venema, J.W. Janssen, M.R. Buitelaar, J.W.G. Wildoer, S.G. Lemay, L.P. Kouwenhoven, and C. Dekker, *Phys. Rev.* **B62**, 5238 (2000).
14. T.W. Odom, J.L. Huang, P. Kim, and C.M. Lieber, *J. Phys. Chem.* **B104**, 2794 (2000).
15. T.W. Odom, J.H. Hafner, and C.M. Lieber, *Appl. Phys.* **80**, 173 (2001).
16. A.M. Rao, E. Richter, S. Bandow, B. Chase, P.C. Eklund, K.A. Williams, S. Fang, K.R. Subbaswamy, M. Menon, A. Thess, R.E. Smalley, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus, *Science* **275**, 187 (1997).

17. A. Jorio, R. Saito, J.H. Hafner, C.M. Lieber, M. Hunter, T. McClure, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1118 (2001).
18. R. Saito, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **B53**, 2044 (1996).
19. T. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn* **74**, 777 (2002).
20. L. Chico, L.X. Benedict, S.G. Louie, and M.L. Cohen, *Phys. Rev.* **B54**, 2600 (1996).
21. J. Han, M.P. Anantram, R.L. Jaffe, J. Kong, and H. Dai, *Phys. Rev.* **B57**, 14983 (1998).
22. M. Ouyang, J.-L. Huang, C.L. Cheung, and C.M. Lieber, *Science* **291**, 97 (2001).
23. Y. Yao, Q. Li, J. Zhang, R. Liu, L. Jiao, Y.T. Zhu, and Z. Liu, *Nat. Mater.* **6**, 283 (2007).
24. C. Jin, K. Suenaga, and S. Iijima, *Nature Nanotechnology* **3**, 17 (2008).
25. A. Ayuela, L. Chiko, and W. Jaskolski, *Phys. Rev.* **B77**, 085435 (2008).
26. A. Rochefort and P. Avouris, *Nanoletters* **2**, Vol. **3**, 253 (2002).
27. L. Chico, M.P. López Sancho, and M.C. Muñoz, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1278 (1998).
28. L. Chiko and W. Jaskolski, *Phys. Rev.* **B69**, 085406 (2004).
29. H. Liu and Y. Tao, *Nanotechnology* **16**, 619 (2005).
30. W. Jaskólski and L. Chiko, *Phys. Rev.* **B71**, 155405 (2005).
31. H. Santos, A. Ayuela, W. Jaskólski, M. Pelc, and L. Chico, *Phys. Rev.* **B80**, 035436 (2009).
32. L. Yang, J. Chen, H. Yang, and J. Dong, *Eur. Phys. J.* **B33**, 215 (2003).
33. S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, Cambridge (1995).
34. Yu.O. Klymenko and O. Shevtsov, *Eur. Phys. J.* **B69**, 383 (2009).
35. Yu.O. Klymenko and O. Shevtsov, *Eur. Phys. J.* **B72**, 203 (2009).
36. K. Yates, *Hückel Molecular Orbital Theory*, Academic Press, New York (1978).

Quantum electron transport in axisymmetric contact of zigzag and armchair nanotubes

Yu.O. Klymenko

Using the nearest neighbor tight-binding approximation, an analytical approach is developed to describe the process of electron transport properties in axisymmetric contacts of zigzag and armchair nanotubes. The method proposed gives an analytical expression of electron transmission probability and allows us to specify the selection rules that are valid for electron scattering. As a function of nanotube diameter, oscillations of the gap width in the electron transmission are predicted and a minimum value of the gap is found. The step thresholds in the transmission coefficient are also described. It is shown that the step-like behavior of the transmission coefficient is connected to the electronic features of the armchair nanotube everywhere apart from its initial section.

PACS: 72.10.Bg General formulation of transport theory;
 73.22.Dj Single particle states;
 73.63.Fg Nanotubes;
 85.35.Kt Nanotube devices.

Keywords: electron transport, transmission coefficient, axisymmetric contact, zigzag and armchair nanotubes.