



ẢNH HƯỞNG CỦA NHIỆT ĐỘ LÊN KHỐI LƯỢNG HIỆU DỤNG VÀ ĐỘ RỘNG KHE DẢI NĂNG LƯỢNG ĐIỆN TỬ TRONG ỐNG BÁN DẪN CARBON NANO

Lê Văn Tân* và Cao Huy Thiện

Viện Vật lý TP Hồ Chí Minh

Ngày nhận bài: 12-5-2017; ngày nhận bài sửa: 19-9-2017; ngày duyệt đăng: 20-12-2017

TÓM TẮT

Ảnh hưởng của nhiệt độ và mật độ lên năng lượng riêng của điện tử trong ống bán dẫn carbon nano được nghiên cứu bằng cách áp dụng hàm Green Matsubara. Sử dụng những kết quả số để chứng minh mức độ ảnh hưởng lớn của nhiệt độ và mật độ điện tử lên độ rộng khe dải và khối lượng hiệu dụng trong ống bán dẫn carbon nano. Chúng tôi nhận thấy rằng nhiệt độ càng tăng thì độ rộng khe dải càng giảm đối với tất cả mật độ, sự tăng cường của khối lượng hiệu dụng khi tăng mật độ được quan sát.

Từ khóa: cấu trúc nano, bán dẫn.

ABSTRACT

Effect of temperature on electron effective mass and band-gap in semiconductor carbon nanotubes

The effect of temperature on the self-energy of electron in semiconductor carbon nanotubes are studied by Matsubara Green function approach. Numerical results show a large influence of the temperature and electron density on the band-gap and electron effective mass in semiconductor carbon nanotubes. We find that the temperature increasing then the band gap is decreasing for all densities, a sharp increase of the effective mass with increasing electron density has been observed.

Keywords: Nanostructures, semiconductors.

1. Mở đầu

Năm 1991, lần đầu tiên Iijima [1] đã phát hiện ra ống carbon nano. Ống nay được làm từ các tấm graphite hai chiều (2D) cuộn tròn lại. Các trạng thái điện tử của nó thay đổi từ kim loại sang bán dẫn phụ thuộc vào vector hình ống. Cho đến nay, năng lượng riêng của điện tử trong hệ bán dẫn CN vẫn là bài toán thu hút sự quan tâm của nhiều nhà khoa học. Các đặc trưng vật lý của hệ như năng lượng, độ rộng khe dải, và khối lượng hiệu dụng... được tính toán lần đầu tiên trong mô hình liên kết chặt cho cấu trúc dải điện tử của nhóm N. Hamada và J. W. Mintmire [2, 3]. Các đặc trưng này cũng được thực hiện thành công bằng phương pháp $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ [4-10]. Thông thường, người ta tính năng lượng riêng bằng gần đúng Hattree-Fock (HF) [4, 5], và gần đúng chắn động RPA [4-10]. Các tác giả [4-10]

* Email: sobaobai@gmail.com

cho thấy rằng, năng lượng, độ rộng khe dải và khối lượng tái chuẩn hóa... đã tăng lên đáng kể do ảnh hưởng của thông số tương tác Coulomb. Trong các phép tính này, biểu thức hàm điện môi, năng lượng riêng chỉ tính cho nhiệt độ bằng 0, đồng thời không xem xét sự phụ thuộc của nồng độ hạt tải. Tuy nhiên, trong thực nghiệm đo đặc phổ năng lượng của hệ thường được đo tại nhiệt độ khác 0. Đặc biệt, các thí nghiệm [11-14] cho thấy, khi nhiệt độ của hệ càng lớn thì phổ năng lượng của hệ càng tăng, điều đó chứng tỏ ảnh hưởng của nhiệt độ lên hệ khá lớn. Vì vậy, để tăng tính hoàn chỉnh của lý thuyết theo các đo đạc của thực nghiệm [11-14], trong bài báo này, chúng tôi tiến hành tính độ rộng khe dải và khối lượng hiệu dụng cho ống bán dẫn CN bằng cách sử dụng cả 2 gần đúng RPA và HF trong sự phụ thuộc của nhiệt độ và nồng độ hạt tải.

2. Lý thuyết

Chúng ta bắt đầu từ phương pháp xấp xỉ gần đúng khối lượng hiệu dụng, thể tương tác Coulomb giữa hai điện tử trong không gian hình trụ bằng lý thuyết \mathbf{k}, \mathbf{p} được cho bởi [2-5]:

$$v_{n-m}(q) = \frac{2e^2}{\kappa} I_{|n-m|} \left(\frac{L|q|}{2\pi} \right) K_{|n-m|} \left(\frac{L|q|}{2\pi} \right) \quad (1)$$

Ở đây, L độ dài ống nano, $I_n(t)$ và $K_n(t)$ là hàm Bessel bậc n thứ nhất và thứ 2. Sự phân cực của cặp điện tử-điện tử được cho bởi hằng số điện κ .

Chúng ta tính năng lượng riêng của điện tử tại điểm K trong gần đúng xấp xỉ chắn động được cho bởi [4-5]:

$$\Sigma_{\alpha}^K(k, \omega) = -\frac{1}{k_B T} \sum_{m, k', z'} F_{\alpha, k, m, k-k'}^{vK} W_{n-m}(k-k', z-z') G_{\alpha}^K(k', z') \quad (2)$$

Ở đây, $F_{\alpha, k, \beta, k+q}^{vG}$ hàm bao thay đổi chậm được cho bởi [4], k_B là hằng số Boltzmann và T là nhiệt độ tuyệt đối.

$$F_{\alpha, k, \beta, k+q}^{vG} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{s_{\alpha} s_{\beta} [k_v(n)k_v(m) + k(k+q)]}{\sqrt{k_v(n)^2 + k^2} \sqrt{k_v(m)^2 + (k+q)^2}} \right) \quad (3)$$

Với $G=K$, K' và δ là hằng số dương vô cùng bé.

Trong phương trình (2), chúng tôi sử dụng hàm chắn động $W_{n-m}(q, \omega)$ của thể tương tác Coulomb trong gần đúng pha ngẫu nhiên được cho bởi:

$$W_{n-m}(q, \omega) = \frac{v_{n-m}(q, \omega)}{1 - v_{n-m}(q, \omega) P_{n-m}(q, \omega)} \quad (4)$$

Và $G_\alpha^K(k, \omega)$ là hàm Green không tương tác được cho bởi:

$$G_\alpha^K(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\alpha,k}^K + i\delta} \quad (5)$$

Với α (or β) = $\pm m$ xung quanh điểm K, năng lượng dải $\varepsilon_{ns,k}^K$ được cho bởi [4]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ns,k}^K &= s\gamma\sqrt{k_v(n)^2 + k^2} - \mu_{0,n} \\ k_v(n) &= \frac{2\pi}{L}\left(n - \frac{\nu}{3}\right) \end{aligned} \quad (6)$$

Ở đây, n là số nguyên, k vectơ sóng dọc theo trục, và chỉ số dải s ($s = +1$ tính cho vùng dẫn và $s = -1$ cho vùng hóa trị). Đối với phương trình cho điểm K', chúng tôi tính lấy đối xứng bằng cách thay spin σ_y trong điểm K bằng $-\sigma_y$, khi điểm K là ν thì K' là $-\nu$ trong các hệ phương trình trên.

Trong phương trình (4), hàm phản hồi $P_{n-m}(q, \omega)$ được tính tại một mật độ, và nhiệt độ xác định. Nó được tính bằng cách sử dụng biểu thức hàm Green Matsubara áp dụng cho hệ không tương tác mật độ - mật độ, chúng tôi được kết quả như sau:

$$P_{n-m}(q, \omega) = \frac{2}{A} \sum_{G=K, K'} \sum_{k'} \sum_{n', m'} \delta_{n-m, n'-m'} \times \left[\frac{(f_F(\varepsilon_{n', k'+q}^G) - f_F(\varepsilon_{m', k'}^G)) F_{m', k', n', k'+q}^{\nu G}}{\omega - \varepsilon_{m'}^G(k') + \varepsilon_{n'}^G(k'+q) + i\delta} \right] \quad (7)$$

Với $f_F(x) = 1/[\exp(x/k_B T) + 1]$ là hàm phân bố fermion.

Bằng cách áp dụng phương pháp tích phân theo tần số phức ω' của hàm Green Matsubara [15] chúng ta có thể tách (2) ra thành

$$\Sigma_\alpha^K(k, \omega) = \Sigma_\alpha^K(k)^X + \Sigma_\alpha^K(k, \omega)^C \quad (8)$$

Trong đó, $\Sigma_\alpha^K(k)^X$ không chứa là năng lượng riêng Hatree - Fock

$$\Sigma_\alpha^K(k)^X = -\frac{1}{A} \sum_{m, q} F_{\alpha, k, m', k'+q}^{\nu K} v_{n-m}(q) f_F(\varepsilon_{m', k'+q}^K) \quad (9)$$

Và $\Sigma_\alpha^K(k, \omega)^C$ là năng lượng tương quan giữa các hạt, ta phân ra làm 2 thành phần:

$$\Sigma_\alpha^K(k, \omega)^C = \Sigma_\alpha^K(k, \omega)^{res} + \Sigma_\alpha^K(k, \omega)^{line} \quad (10)$$

Với

$$\begin{aligned} I^{res} &= -\frac{1}{A} \sum_{\beta, q} F_{\alpha, k, \beta, k+q}^{\nu K} \cdot \frac{v_{n-m}(q)}{\varepsilon_{n-m}(q, \varepsilon_{\beta, k+q}^K - \omega)} \times f_F(\varepsilon_{\beta, k}^K) \times f_B(\varepsilon_{\beta, k+q}^K - \omega) \\ &+ \frac{1}{A} \sum_{\beta, q} F_{\alpha, k, \beta, k+q}^{\nu K} \cdot \frac{v_{n-m}(q)}{\varepsilon_{n-m}(q, \omega - \varepsilon_{\beta, k+q}^K)} \times (1 - f_F(\varepsilon_{\beta, k}^K)) \times f_B(\omega - \varepsilon_{\beta, k+q}^K) \end{aligned} \quad (12)$$

$$I^{line} = \frac{i}{2\pi A} \int_{-i\infty}^{+i\infty} d\omega' \sum_{\beta, q} \left[\frac{1 - f_F(\varepsilon_{\beta, k}^K)}{\omega + \omega' - \varepsilon_{\beta}^K(k+q) + i\delta} + \frac{f_F(\varepsilon_{\beta, k}^K)}{\omega + \omega' - \varepsilon_{\beta}^K(k+q) - i\delta} \right] F_{\alpha, k, \beta, k+q}^{vK} \frac{v_{n-m}(q)}{\varepsilon_{n-m}(q, \omega')} \quad (13)$$

Chú ý rằng, trong mô hình Das Sarma [16] cho chất lỏng có một tính chất

$$f_B(\varepsilon_{k+q} - \omega) + f_F(\varepsilon_{k+q}) = f_B(\varepsilon_{k+q} - \omega) (1 - f_F(\varepsilon_{k+q})) - f_B(\omega - \varepsilon_{k+q}) f_F(\varepsilon_{k+q}) \quad (14)$$

Nếu chúng ta thay $m' = n'$ tại (6), (9), (12), và (13) thì chúng ta có được biểu thức năng lượng riêng của chúng tôi ở trên hoàn toàn giống hệt mô hình chất lỏng Fermi [16].

Ở đây $f_B(x) = 1 / [\exp(x/k_B T) - 1]$ là hàm Bose.

Thế hóa $\mu_{0,n}$ phụ thuộc vào nhiệt độ và nồng độ hạt tải N được giải thông qua phương trình nồng độ hạt tải như sau:

$$N = \sum_{k, n, \alpha} f_F(\varepsilon_{k, n, \alpha}) \quad (15)$$

Độ rộng khe dải, và khối lượng hiệu dụng được cho bởi [4, 5]:

$$\Delta_n = E_{n+}^K(0) - E_{n-}^K(0) \quad (16)$$

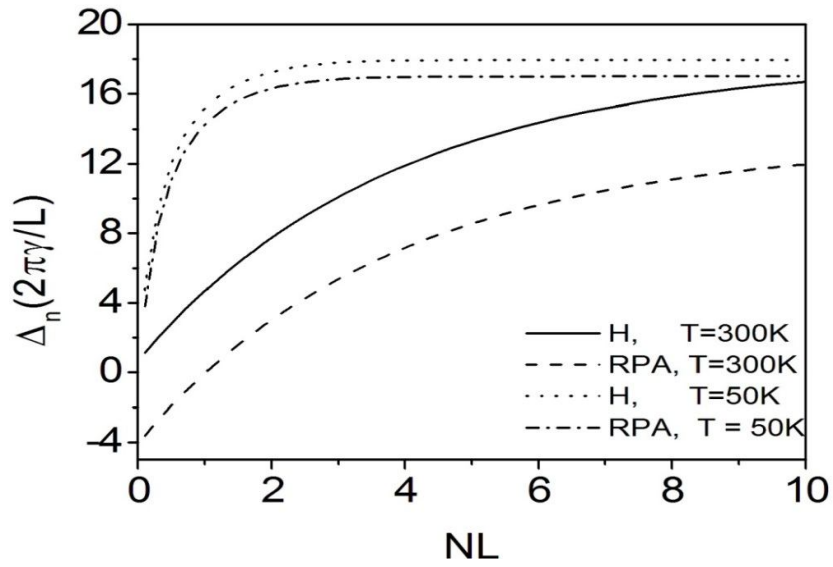
$$\frac{1}{m_{n\pm}^{K*}} = \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{\partial^2 E_{n\pm}^K}{\partial^2 k} \right|_{k=0} \quad (17)$$

Trong phương trình (17) chúng ta thay $E_{n\alpha}^K$, với $\alpha = \pm$ bởi hàm:

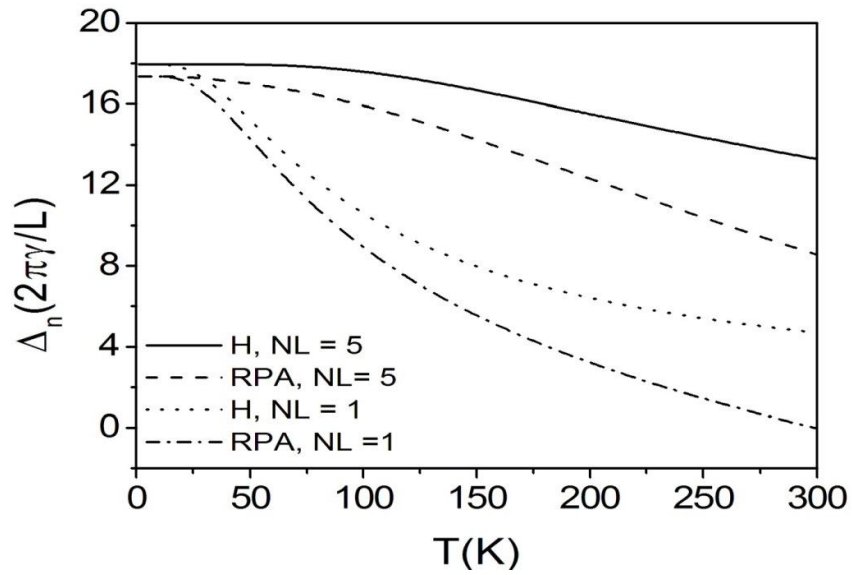
$$E_{n\alpha}^K(k) = \varepsilon_{n\alpha}^K + \Sigma_{\alpha}^K(k, \omega) \quad (18)$$

3. Kết quả tính toán số và thảo luận

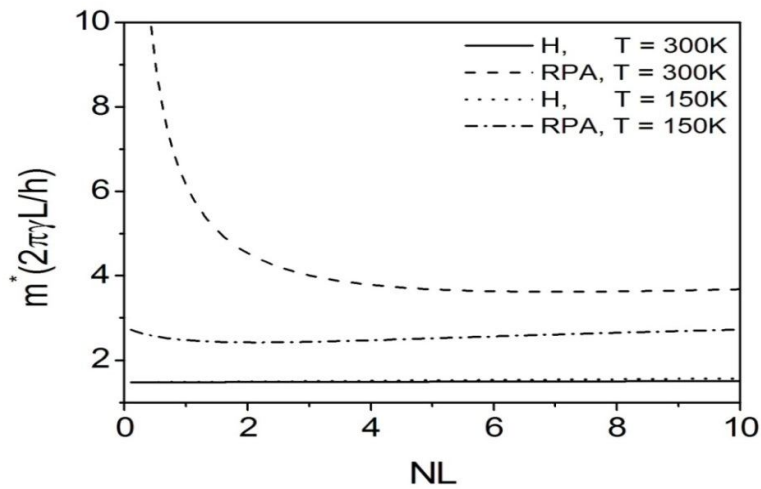
Chúng tôi tính toán số độ rộng khe dải, và khối lượng hiệu dụng tái chuẩn hóa của điện tử trong ống bán dẫn CN với các tham số đã sử dụng: hằng số mạng $a = 2,67 \text{ \AA}$, chúng tôi chọn tỉ số giữa năng lượng hiệu dụng e^2/κ và động năng $2\pi\gamma$ trong thế Coulomb là $(e^2/2\kappa L)/(2\pi\gamma/L) = 0.2$ trong toàn bài báo này. Ở đây, $\gamma = \frac{\sqrt{3}a\gamma_0}{2}$ với $\gamma_0 = 3\text{eV}$ là thông số tích phân chuyển dời giữa hai phân tử kế cận trong mô hình liên kết chặt [1, 2], độ dài của ống carbon nano $L = 100\text{nm}$.



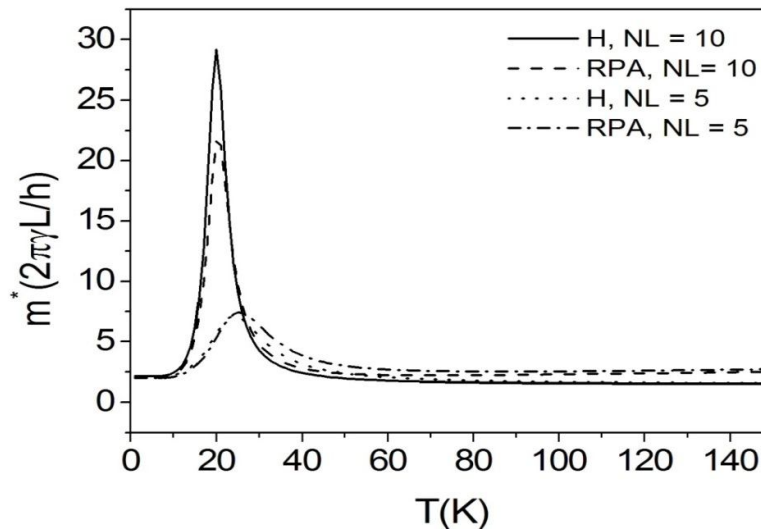
Hình 1. Độ rộng khe dải của điện tử như là một hàm của mật độ



Hình 2. Độ rộng khe dải của điện tử như là một hàm của nhiệt độ



Hình 3. Khối lượng hiệu dụng của điện tử như là một hàm của mật độ



Hình 4. Khối lượng hiệu dụng của điện tử như là một hàm của nhiệt độ

Trong Hình 1, chúng tôi vẽ độ rộng khe dải (BG) như là một hàm của mật độ trong gần đúng xấp xỉ chắn động RPA (đường chấm gạch, và đường gạch tương ứng với nhiệt độ tại 50K và 300K) và HF (đường nét chấm, và đường liền tương ứng với nhiệt độ tại 50K và 300K). Hình 1, tại nhiệt độ 50K và 300K chúng tôi nhận thấy rằng giá trị BG giảm khi nhiệt độ tăng. Và giá trị BG khi tính trong gần đúng HF (đường nét chấm, và đường liền tương ứng tại mật độ tái chuẩn hóa $NL = 1$ và $NL = 5$) lớn hơn so với RPA (đường chấm

gạch, và đường gạch tương ứng tại mật độ tái chuẩn hóa $NL = 1$ và $NL = 5$) trong cùng một mật độ và nhiệt độ Hình 2; điều này, có thể giải thích nguyên nhân là do sự thay đổi năng lượng riêng tương tác chắn Coulomb và chắn động ảnh hưởng trực tiếp đến hệ khi có nhiệt độ và mật độ cao. Điều đó dẫn đến sự tách mức năng lượng tương đối lớn khi hệ tính có chắn động RPA và không chắn HF khác nhau như kết quả của hình trên là khác nhau khá lớn.

Hình 3 chúng tôi vẽ sự phụ thuộc của khối lượng hiệu dụng như là một hàm của mật độ trong gần đúng xấp xỉ chắn động RPA (đường chấm gạch tại nhiệt độ 150K và đường gạch tại nhiệt độ 300K) và HF (đường nét chấm tại 150K và đường liền tại 300K), và Hình 3 cho thấy khi nhiệt mật độ càng cao và nhiệt độ càng lớn thì giá trị của khối lượng hiệu dụng càng lớn. Hình 3 chúng tôi thấy được khối lượng hiệu dụng trong gần đúng HF nhỏ hơn so với RPA. Hình 4 chúng tôi vẽ khối lượng hiệu dụng như là một hàm của nhiệt độ trong gần đúng HF (đường nét chấm $NL = 10$, và đường liền tại $NL = 5$) lớn hơn so với RPA (đường chấm gạch $NL = 10$, và đường gạch $NL = 5$) tăng từ đáy của mật độ không thứ nguyên NL . Đây là vùng trao đổi năng lượng chiếm ưu thế, và nó có thể dễ dàng chỉ ra rằng việc trao đổi tự năng lượng tạo ra hiệu ứng đặc biệt này trên phụ thuộc NL , $m^*(NL)$ tại các giá trị T cố định thấp. Và sau đó khối lượng hiệu dụng giảm khi nhiệt độ tăng. Đáng chú ý điều này có mặt ở tất cả các mật độ. Xu hướng không đơn điệu là cho cả hệ, và giá trị của $m^*(T)$ tăng lên cùng với sự dốc $m^*(T)$ là gần như độc lập với NL cho NL nhỏ, nhưng tăng với NL cho NL giá trị lớn hơn. Khối lượng được tính trong gần đúng HF và RPA là có sự khác biệt khá lớn khi nhiệt độ tăng đến một giá trị nào đó trong gần đúng HF gần như không thay đổi còn trong gần đúng RPA thì lại tăng theo nhiệt độ như vậy ảnh hưởng đến hệ khi có nhiệt độ và mật độ có sự khác biệt khá lớn so với khi nhiệt độ 0 và không có mật độ của kết quả [4, 5].

Tóm lại, chúng tôi tính độ rộng khe dải và khối lượng hiệu dụng trong ống bán dẫn CN cho 2 gần đúng khác nhau HF và RPA. Kết quả chứng tỏ rằng độ rộng khe dải càng giảm khi nhiệt độ càng tăng đối với tất cả các mật độ, và khối lượng hiệu dụng trong ống bán dẫn CN tăng cường mạnh mẽ với nhiệt độ thấp. Điều này cho thấy rằng cơ chế là cơ sở để nâng cao khối lượng hiệu dụng liên quan đến mật độ, nhiệt độ.

❖ **Tuyên bố về quyền lợi:** Các tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] S. Iijima, "Helical microtubules of graphitic carbon," *Nature (London)*, 354, pp. 56-58, 1991.
- [2] N. Hamada, S. Sawada and A. Oshiyama, "New one-dimensional conductors: Graphitic microtubules," *Phys.Rev. Lett.* 68, pp. 1579-1581, 1992.
- [3] J. W. Mintmire, B. I. Dunlap and C. T. White, "Are fullerene tubules metallic?," *Phys. Rev. Lett.* 68, pp. 631- 634, 1992.
- [4] H. Sakai, H. Suzuura, and T. Ando, "Effective-Mass Theory of Electron Correlations in Band Structure of Semiconducting Carbon Nanotubes," *J. Phys. Soc. Jpn.* 72, pp. 1698-1705, 2003.
- [5] H. Sakai, H. Suzuura, and T. Ando, "Effective-mass approach to interaction effects on electronic structure in carbon nanotubes," *Physica E* 22, 2004, pp. 704-707.
- [6] T. Ando, "Theory of Electronic States and Transport in Carbon Nanotubes," *J. Phys. Soc. Jpn.* 74, pp. 777-817, 2005.
- [7] Seiji Uryu and Tsuneya Ando, "Exciton absorption of perpendicularly polarized light in carbon nanotubes," *Phys. Rev. B* 74, pp. 155411-155419, 2006.
- [8] H. Ajiki and T. Ando, "Electronic states of carbon nanotubes," *J. Phys. Soc. Jpn.* 62, pp. 1255- 1266, 1999.
- [9] H. Ajiki and T. Ando, "Energy bands of carbon nanotubes in magnetic fields," *J. Phys. Soc. Jpn.* 65, pp. 505-514, 1996.
- [10] J. W. Wildöer, L. C. Venema, A. G. Rinzler, R.E. Smalley and C. Dekker, "Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes," *Nature (London)*. 391, pp. 59-62, 1998.
- [11] T. W. Odom, J. -L. Huang, P. Kim and C. M. Lieber, "Atomic structure and electronic properties of single-walled carbon nanotubes," *Nature*. 391, pp. 62-64, 1998.
- [12] M. Ichida, S. Mizuno, Y. Tani, Y. Saito, and A. Nakamura, "Exciton Effects of Optical Transitions in Single-Wall Carbon Nanotubes," *J. Phys. Soc. Jpn.* 68, pp. 3131-3133, 1999.
- [13] Yuh Tomio and Hidekatsu Suzuura, "Effects of Dynamic Screening on Excitons in Metallic Carbon Nanotubes," *JPS Conf. Proc* , 4, pp. 0122006-0122009, 2015.
- [14] Aljoscha Roch , Lukas Stepien, Teja Roch, Ines Dani, Christoph Leyens, Oliver Jost, Andreas Leson, "Optical absorption spectroscopy and properties of single walled carbon nanotubes at high temperature," *Synthetic Metals* 197, pp. 182-187, 2014.
- [15] G. D. Mahan, Many – Particle Physics, *Third Edition*, (Kluwer Academic/ Plenum Publishers, New York, USA, 2000)
- [16] B. Y. K. Hu and S. Dar Sarma, "Many-body exchange-correlation effects in the lowest subband of semiconductor quantum wires," *Phys. Rev. B* 48, pp. 5496-5504, 1993.