



TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ

Technische Universität Chemnitz
Institut für Physik
Theorie ungeordneter Systeme



Fraunhofer

Fraunhofer Institut für Elektronische Nanosysteme
Abteilung Back-end of Line

SPEZIALISIERUNGSPRAKTIKUM

Elektronische Struktur und Transporteigenschaften von gekreuzten Kohlenstoffnanoröhrchen

Name: Fabian Teichert

Zeitraum: Sommersemester 2012

Betreuer: Andreas Zienert

Abriss

Kohlenstoffnanoröhrchen zeigen je nach ihrer Struktur verschiedene Eigenschaften und können elektrisch leitend oder halbleitend sein. Werden sie in elektronischen Schaltungen als Nanodraht zwischen zwei Elektroden eingesetzt, treten sie nicht nur einzeln auf, sondern können dicht beieinander liegen. In der vorliegenden Arbeit wird untersucht, welchen Einfluss auf die elektronische Struktur und die Transporteigenschaften zwei wenige Ångström entfernt liegende Kohlenstoffnanoröhrchen haben. Am Beispielsystem, bestehend aus metallischen (4,1)-Kohlenstoffnanoröhrchen, werden Elektronendichten, Zustandsdichten, Transmissionsspektren und Stromspannungskennlinien berechnet und erläutert. Die Rechnungen werden mit der Software Atomistix ToolKit, welche die Dichtefunktionaltheorie und den Formalismus der Nichtgleichgewichtsgreensfunktion verwendet, durchgeführt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Theoretische Grundlagen	7
2.1	Kohlenstoffnanoröhrchen	7
2.1.1	Struktur	7
2.1.2	Elektronische Eigenschaften des unendlichen CNT	8
2.2	Dichtefunktionaltheorie	9
2.2.1	Hohenberg-Kohn-Theorem	10
2.2.2	Thomas-Fermi-Näherung	11
2.2.3	Erweiterungen	11
2.2.4	Kohn-Sham-Gleichungen	12
2.3	Landauer-Büttiker-Formel	13
3	Software	15
4	Geometrie des untersuchten Systems in unterschiedlichen Konfigurationen	17
4.1	Variation des Krümmungsradius	17
4.2	Zusammengesetztes System aus linearem und gekrümmtem CNT	18
4.3	Variation des Kontaktwinkels	18
4.4	Wahl des CNT	20
5	Ergebnisse	21
5.1	Observablen	21
5.1.1	Gesamtenergie	21
5.1.2	Elektronendichte	22
5.1.3	Zustandsdichte	24
5.1.4	Transmissionsspektrum	26
5.2	Einfluss von Krümmung und Kreuzung durch Differenzbildung	29
5.3	Strom-Spannungs-Kennlinien	31
5.3.1	Strom-Spannungs-Kennlinien	31
5.3.2	Einfluss von Krümmung und Kreuzung durch Differenzbildung	33
5.4	Unterbrochenes System	39
5.5	Halbleitendes System	42
6	Zusammenfassung	53
7	Anhang	55
	Tabellenverzeichnis	55
	Abbildungsverzeichnis	57
	Literaturverzeichnis	58

Mathematische und physikalische Konstanten

$e = 2,718\,281\,828\,459\,045 \dots$	Eulersche Zahl
$\pi = 3,141\,592\,653\,589\,793 \dots$	Kreiszahl
$e = 1,602\,176\,46 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	Elementarladung
$\epsilon_0 = 8,854\,187\,817 \cdot 10^{-12} \frac{\text{As}}{\text{Vm}}$	Elektrische Feldkonstante
$h = 6,626\,068\,8 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$	Plancksches Wirkungsquantum
$\hbar = 1,054\,571\,60 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$	Reduziertes Plancksches Wirkungsquantum
$k_B = 1,380\,650 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$	Boltzmannkonstante
$m_e = 9,109\,381\,9 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$	Elektronenmasse

1 Einleitung

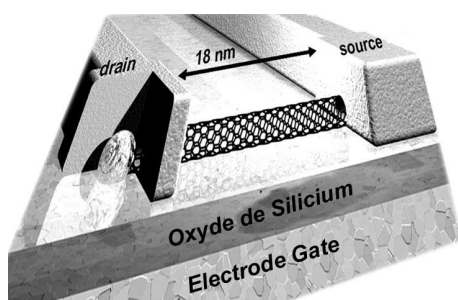


Abb. 1.1: Schematische Darstellung eines Kohlenstoffnanoröhrchenfeldeffekttransistors [1].

Kohlenstoffnanoröhrchen haben je nach ihrer Struktur verschiedene Eigenschaften und können beispielsweise bezüglich der elektrischen Leitfähigkeit metallisch oder halbleitend sein. Daraus ergeben sich vielfältige potentielle Anwendungsgebiete in den immer weiter miniaturisierten elektronischen Schaltungen. Metallische Kohlenstoffnanoröhrchen können als Nanodraht fungieren und als dünner Leiter zwischen zwei Elektroden zum Einsatz kommen. Halbleitende Kohlenstoffnanoröhrchen können in Sensoren eingesetzt werden, da durch mechanische Belastung die Bandlücke und somit die

Leitfähigkeit beeinflusst wird. Feldeffekttransistoren mit Kohlenstoffnanoröhrchen konnten bereits erfolgreich hergestellt werden. Abb. 1.1 zeigt schematisch ein solches System.

Aufgrund der geringen Abmessungen ist eine klassische Beschreibung eines solchen Systems nicht mehr möglich. Es zeigen sich quantenmechanische Effekte, deren Auswirkungen schwer abzuschätzen sind. Wie in Abb. 1.2 schematisch und stark vereinfacht dargestellt ist, können sich zwei Kohlenstoffnanoröhrchen, welche zwischen Elektroden platziert sind, bis auf wenige Ångström annähern und eine Art „berührungsfreie Kreuzung“ bilden. Der Stromfluss durch eines der beiden Kohlenstoffnanoröhrchen ist somit durch die Anwesenheit des zweiten beeinflusst.

Die Frage, auf die in diesem Praktikum eine Antwort zu geben versucht wird, lautet daher: Welchen Einfluss hat eine solche Kohlenstoffnanoröhrchenkreuzung auf die elektronische Struktur und die Transporteigenschaften im Vergleich zu zwei einzelnen, nicht wechselwirkenden Kohlenstoffnanoröhrchen?

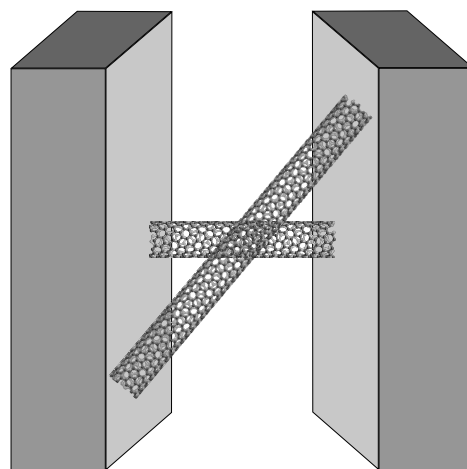


Abb. 1.2: Vereinfachter schematischer Aufbau zweier mit Kohlenstoffnanoröhrchen verbundener Elektroden.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Kohlenstoffnanoröhrchen

2.1.1 Struktur

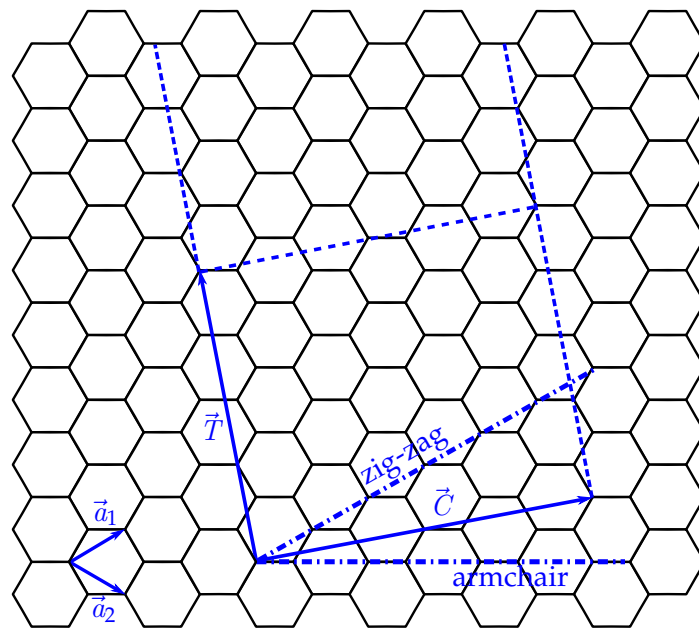


Abb. 2.1: CNT-Einheitszelle als Ausschnitt der Graphen-Ebene [2]

Die geometrische Struktur eines *Kohlenstoffnanoröhrchens* (englisch: carbon nanotube, kurz: CNT) lässt sich als aufgerollter Graphenausschnitt beschreiben, wie dies in Abb. 2.1 dargestellt ist. Das periodische hexagonale Graphengitter mit zweiatomiger Basis wird durch die Basisvektoren

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right) a \quad , \quad \vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) a \quad (2.1)$$

aufgespannt, wobei $a = 2,46 \text{ \AA}$ die Gitterkonstante bezeichnet. Der Kohlenstoff-Kohlenstoff-Abstand ergibt sich dann zu $a_{CC} = 1,42 \text{ \AA}$. Ein CNT ist definiert durch den Chiralitätsvektor

$$\vec{C} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 \quad (2.2)$$

und wird als (m,n) -CNT bezeichnet. Für $n = 0$ spricht man vom *Zick-Zack-CNT*, für $m = n$ vom *Sessel-CNT*, da die Atome entlang des Vektors \vec{C} eine Zick-Zack- bzw. Sesselform besitzen. Für alle anderen Werte spricht man vom *chiralen CNT*. Das Gitter ergibt sich als periodische Fortsetzung einer Einheitszelle. Wählt man diese rechtwinklig so ergibt sich

der kürzeste zu \vec{C} senkrechte Translationsvektor

$$\vec{T} = \frac{2n+m}{\text{ggT}(2m+n, 2n+m)} \vec{a}_1 - \frac{2m+n}{\text{ggT}(2m+n, 2n+m)} \vec{a}_2 \quad (2.3)$$

Das Kohlenstoffnanoröhrchen entsteht schließlich durch Aufrollen der Einheitszelle parallel zu \vec{C} und Identifizierung der durch \vec{T} gegebenen Ränder. Der Umfang u , die Länge l und die Atomzahl N des CNT ist somit gegeben durch

$$u = |\vec{C}| = \sqrt{3} \sqrt{m^2 + n^2 + mn} a_{CC} \quad , \quad (2.4)$$

$$l = |\vec{T}| = \frac{3 \sqrt{m^2 + n^2 + mn}}{\text{ggT}(2m+n, 2n+m)} a_{CC} \quad , \quad (2.5)$$

$$N = 2 \frac{|\vec{C} \times \vec{T}|}{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|} = 4 \frac{m^2 + n^2 + mn}{\text{ggT}(2m+n, 2n+m)} \quad . \quad (2.6)$$

Abb. 2.1 zeigt die Einheitszelle eines (4,2)-CNT in der Graphenebene. In Abb. 2.2 sind die Einheitszellen der fünf (4, n)-CNT in senkrechter Projektion dargestellt. die grau schattierten Atome liegen dabei im hinteren Bereich.

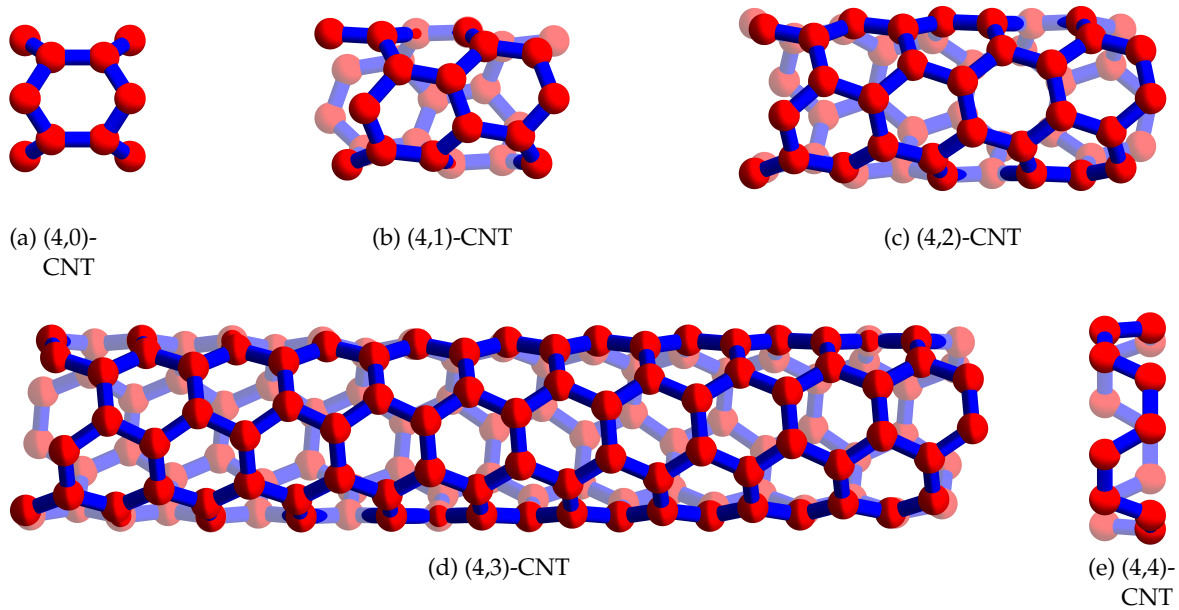


Abb. 2.2: Einheitszellen des (4, n)-CNT.

2.1.2 Elektronische Eigenschaften des unendlichen CNT

Das Tight-Binding-Verfahren liefert für die Bandstruktur von Graphen folgenden Ausdruck [3]:

$$E(k_x, k_y) = \pm \gamma \sqrt{1 + 4 \cos^2 \left(\frac{1}{2} k_y a \right) + 4 \cos \left(\frac{1}{2} k_y a \right) \cos \left(\frac{1}{2} k_x \sqrt{3} a \right)} \quad . \quad (2.7)$$

Dabei ist γ das Übergangsintegral nächster Nachbarn. Die Bandstruktur ist in Abb. 2.3 abgebildet. Die Bänder des CNT ergeben sich aufgrund der Periodizität in Richtung \vec{C} näherungsweise (die Krümmung wurde nicht beachtet) als senkrechte Schnitte durch die Bandstruktur von Graphen. Die Zustandsdichte ist aufgrund der effektiven Eindimensionalität abschnittsweise proportional zu $E^{-1/2}$ und weist die typischen Van-Hove-Singularitäten an den Bandkanten auf. Die Transmission im CNT ist proportional zur Anzahl der Bänder, da sich Elektronen in Graphen ballistisch fortbewegen. Daher besteht das Transmissionsspektrum aus Stufen, deren Höhe ganzzahlige Werte annimmt. Bandstruktur, Zustandsdichte und Transmissionsspektrum sind am Beispiel des (4,1)-CNT in Abb. 2.4 dargestellt.

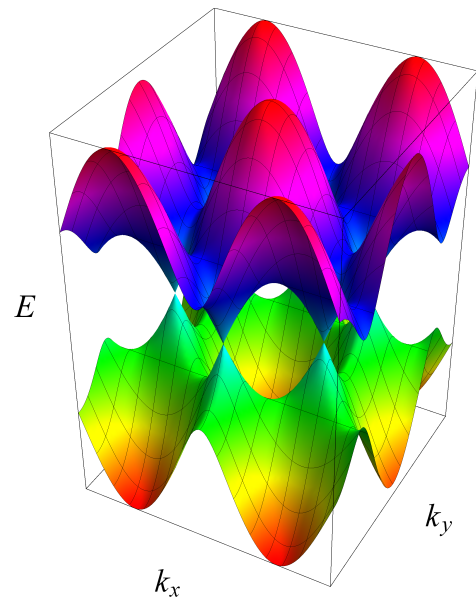


Abb. 2.3: Bandstruktur von Graphen.

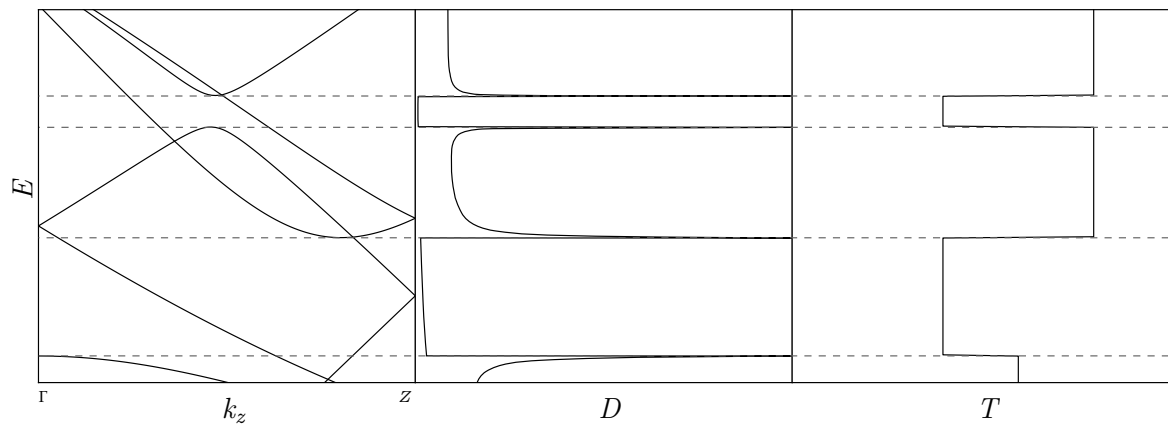


Abb. 2.4: Bandstruktur, Zustandsdichte und Transmissionsspektrum am Beispiel des (4,1)-CNT.

2.2 Dichtefunktionaltheorie

Grundlage der *Dichtefunktionaltheorie* (kurz: DFT) [4] ist die quantenmechanische Beschreibung des Systems. Die Grundgleichung, die es zu lösen gilt, ist die *zeitunabhängige Schrödingergleichung*

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi \quad , \quad (2.8)$$

welche die Eigenenergien E und die Eigenzustände ψ liefert. Für ein einzelnes Elektron im Potential $v_s(\vec{r})$ statischer Atomrümpfe (Born-Oppenheimer-Näherung) ist $\psi = \psi(\vec{r})$ und $\hat{\mathcal{H}}_s$ der Einteilchen-Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}}_s = \hat{\mathcal{T}}_s + \hat{\mathcal{V}}_s = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + v_s(\vec{r}) \quad . \quad (2.9)$$

Für ein Vielteilchenproblem mit N Elektronen und N_A Atomrümpfen ist $\psi = \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ eine Funktion von $3N$ Elektron-Koordinaten $\{\vec{r}_i\}$ und für den Hamiltonoperator $\hat{\mathcal{H}}$ mit ausschließlich Coulomb-Wechselwirkung gilt

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= \hat{\mathcal{T}} + \hat{\mathcal{V}} + \hat{\mathcal{U}} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \sum_{i=1}^N \sum_{\mu=1}^{N_A} \frac{-eQ_\mu}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{R}_\mu|} + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad ,\end{aligned}\quad (2.10)$$

wobei $\hat{\mathcal{T}}$, $\hat{\mathcal{V}}$ und $\hat{\mathcal{U}}$ die Operatoren der kinetischen Energie, des Potentials und Elektron-Elektron-Wechselwirkung sind und $\{\vec{R}_\mu\}$ die Koordinaten der Atomrümpfe bezeichnen. Aus den Lösungen ψ der Schrödingergleichung lassen sich die Observablen

$$O = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \quad (2.11)$$

insbesondere die Elektronendichte

$$n(\vec{r}) = N \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \psi^*(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \psi(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) d^3\vec{r}_2 \dots d^3\vec{r}_N \quad (2.12)$$

berechnen. Diese hängt nur von 3 Koordinaten ab und stellt im Gegensatz zu den $3N$ Koordinaten der Eigenzustände eine starke Verminderung der Dimensionalität dar, wodurch bei numerischer Behandlung ein wesentlich geringerer Speicherbedarf benötigt wird. Allerdings geht damit im Allgemeinen auch eine starke Reduzierung der Informationen einher.

Die Gesamtzahl der Elektronen im System lässt sich als Funktional

$$N = N[n] = \int_{\mathbb{R}^3} n(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (2.13)$$

darstellen. Welche weiteren Observablen sich als Funktional der Elektronendichte darstellen lassen, liefert das *Hohenberg-Kohn-Theorem* [5].

2.2.1 Hohenberg-Kohn-Theorem

Satz: Sei die Grundzustandselektronendichte n_0 nicht entartet. Dann gilt:

- (i) Der Grundzustand ist ein Funktional der Grundzustandselektronendichte.

$$\psi_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \psi[n_0] \quad (2.14)$$

Insbesondere folgt: jede Observable des Grundzustandes ist ein Funktional der Grundzustandselektronendichte.

$$O_0 = O[n_0] = \langle \psi[n_0] | \hat{O} | \psi[n_0] \rangle \quad (2.15)$$

- (ii) Die Grundzustandselektronendichte minimiert die Energie.

$$E_0 = E[n_0] = \min_n E[n] = \min_n \min_{\psi \rightarrow n} \langle \psi | \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle \quad (2.16)$$

- (iii) Die Beiträge der kinetischen Energie, des Potentials und der Wechselwirkungsenergie zur Gesamtenergie sind Funktionale der Elektronendichte.

$$E[n] = T[n] + V[n] + U[n] \quad (2.17)$$

Für das potentielle Energiefunktional gilt bei gegebenem Potential $v(\vec{r})$

$$V[n] = \int_{\mathbb{R}^3} n(\vec{r}) v(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (2.18)$$

Eine zentrale Aussage ist die Äquivalenz von Eigenzustand und Grundzustandselektronendichte. Dies besagt, dass bei der Berechnung von n_0 aus ψ_0 keinerlei Informationen verloren gehen, d.h. ψ_0 aus n_0 wiederum berechnet werden kann. Das Hohenberg-Kohn-Theorem liefert somit einen effektiven Ansatz zur Berechnung der Observablen von Vielteilchensystemen, ohne die Eigenzustände an sich berechnen zu müssen.

2.2.2 Thomas-Fermi-Näherung

Dem Hohenberg-Kohn-Theorem zu folge existiert zwar eine exakte Darstellung der Energiefunktionale, diese sind allerdings nicht explizit bekannt. Eine einfache Approximation stellt die *Thomas-Fermi-Näherung* dar. Dabei wird das Wechselwirkungsenergiefunktional durch die elektrostatische Feldenergie der Ladungsverteilung (Hartree-Energie) genähert.

$$U[n] \approx U_H[n] = \frac{q^2}{2} \int_{\mathbb{R}^6} \frac{n(\vec{r}) n(\vec{r}')}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \quad (2.19)$$

Des Weiteren wird das kinetische Energiefunktional als Integral über die kinetische Energiedichte eines homogenen, nicht wechselwirkenden (d.h. Einelektronen-) Systems genähert.

$$T[n] \approx T^{TF}[n] = \int_{\mathbb{R}^3} t_s^{hom}(n(\vec{r})) d^3\vec{r} \quad \text{mit} \quad t_s^{hom}(n(\vec{r})) = \frac{3\hbar^2 (3\pi^2)^{2/3}}{10m_e} n^{5/3} \quad (2.20)$$

2.2.3 Erweiterungen

Allgemein lässt sich der Anteil der kinetischen Energie in einen nicht wechselwirkenden (Einteilchen-) Term und einen wechselwirkenden Term aufspalten.

$$T[n] = T_s[n] + T_{xc}[n] \quad (2.21)$$

In *lokaler Dichtenäherung* (englisch: local-density approximation, kurz: LDA) ist der nicht wechselwirkende Term gleich dem der Thomas-Fermi-Näherung. In einer *erweiterten Gradientennäherung* (englisch: gradient-expansion approximation, kurz: GEA) wird dieser durch einen Korrekturterm (Weizsäckerterm) ergänzt.

$$T_s^{LDA}[n] = T^{TF}[n] \quad , \quad (2.22)$$

$$T_s^{GEA}[n] = T_s^{LDA}[n] + \frac{\hbar^2}{8m_e} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\nabla n(\vec{r})|^2}{n(\vec{r})} d^3\vec{r} \quad (2.23)$$

Beim Wechselwirkungsfunktional spaltet man ebenfalls den Austausch-Korrelationsterm ab. Der wechselwirkungsfreie Teil entspricht dabei der Hartree-Energie.

$$U[n] = U_H[n] + U_{xc}[n] \quad (2.24)$$

Für das potentielle Energiefunktional lässt sich folgende Beziehung zeigen:

$$V[n] = \int_{\mathbb{R}^3} n(\vec{r}) (v_s(\vec{r}) - v_H(\vec{r}) - v_{xc}(\vec{r})) d^3\vec{r} \quad , \quad (2.25)$$

$$v_H(\vec{r}) = q^2 \int_{\mathbb{R}^3} \frac{n(\vec{r}')}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}' \quad . \quad (2.26)$$

Dabei ist v_H das Hartree-Potential und v_{xc} das Austausch-Korrelationspotential. Sämtliche wechselwirkenden Terme fasst man zur Austausch-Korrelationsenergie zusammen.

$$T_c[n] + U_{xc}[n] + V_{xc}[n] = E_{xc}[n] = E_x[n] + E_c[n] \quad (2.27)$$

Für die Austauschenergie gilt

$$E_x[n] \approx E_x^{LDA}[n] = -\frac{3q^2}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \int_{\mathbb{R}^3} n(\vec{r})^{4/3} d^3\vec{r} \quad , \quad (2.28)$$

$$E_x[n] \approx E_x^{GEA}[n] = E_x^{LDA}[n] - \frac{10q^2}{432\pi (3\pi^2)^{1/3}} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\nabla n(\vec{r})|^2}{n(\vec{r})^{4/3}} d^3\vec{r} \quad (2.29)$$

Die Korrelationsenergie $E_c[n]$ ist nicht explizit bekannt, kann aber mit umfangreichen Vielteilchen-Quanten-Monte-Carlo-Simulationen berechnet werden.

2.2.4 Kohn-Sham-Gleichungen

Basis der Berechnung ist weiterhin die Schrödinger-Gleichung, welche $3N$ -dimensionale Eigenfunktionen liefert und in dieser Form nicht handhabbar ist. Die *Kohn-Sham-Gleichungen* [6] liefern einen berechenbaren Ansatz, bei dem das ursprüngliche Problem in ein effektiv eindimensionales Problem überführt wird.

Die Minimierung des Energiefunktional lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\delta E[n]}{\delta n(\vec{r})} = \frac{\delta T_s[n]}{\delta n(\vec{r})} + \frac{\delta V[n]}{\delta n(\vec{r})} + \frac{\delta U_H[n]}{\delta n(\vec{r})} + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\vec{r})} \\ &= \frac{\delta T_s[n]}{\delta n(\vec{r})} + v(\vec{r}) + v_H(\vec{r}) + v_{xc}(\vec{r}) \quad . \end{aligned} \quad (2.30)$$

Für ein nicht wechselwirkendes System liefert die Minimierung

$$0 = \frac{\delta E_s[n]}{\delta n(\vec{r})} = \frac{\delta T_s[n]}{\delta n(\vec{r})} + \frac{\delta V_s[n]}{\delta n(\vec{r})} = \frac{\delta T_s[n]}{\delta n(\vec{r})} + v_s(\vec{r}) \quad (2.31)$$

die Elektronendichte des nicht wechselwirkenden Systems $n_s(\vec{r})$.

Aus der Forderung $n(\vec{r}) = n_s(\vec{r})$ ergibt sich somit

$$v_s(\vec{r}) = v(\vec{r}) + v_H(\vec{r}) + v_{xc}(\vec{r}) \quad . \quad (2.32)$$

Mithilfe dessen lässt sich das ursprüngliche Problem in eine Einteilchen-Schrödingergleichung überführen.

$$\hat{\mathcal{H}}_s \phi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + v_s(\vec{r}) \right] \phi = E_s \phi \quad (2.33)$$

Die Elektronendichte ist dann durch die Besetzung der einzelnen Orbitale ϕ_i gegeben.

$$n(\vec{r}) = n_s(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N f_i |\phi_i(\vec{r})|^2 \quad (2.34)$$

f_i bezeichnet dabei die Besetzungswahrscheinlichkeit des i -ten Orbitals.

Die Berechnung von n geschieht über eine Selbstkonsistenzrechnung, die folgenden vereinfacht dargestellten Algorithmus aufweist:

1. Starte mit einem $n^{(0)}(\vec{r})$.
2. Überführe $v^{(k)}(\vec{r})$ in $v_s^{(k)}(\vec{r})$.
3. Löse $\hat{\mathcal{H}}_s^{(k)} \phi^{(k)} = E_s^{(k)} \phi^{(k)}$.
4. Berechne $n^{(k+1)}(\vec{r})$ aus der Besetzung der Orbitale $\phi_i^{(k)}$.
5. Falls $\|n^{(k+1)}(\vec{r}) - n^{(k)}(\vec{r})\|$ eine gegebene Genauigkeit unterschreitet, beende den Algorithmus, ansonsten gehe zu 2. und wiederhole den Algorithmus mit $n^{(k+1)}(\vec{r})$.

2.3 Landauer-Büttiker-Formel

Die Strom-Spannungs-Kennlinie $I(U)$ kann aus dem Transmissionsspektrum $T(E, U)$ mit Hilfe der *Landauer-Büttiker-Formel* [7]

$$I(U) = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E, U) \left[f\left(E - \frac{e}{2}U\right) - f\left(E + \frac{e}{2}U\right) \right] dE \quad (2.35)$$

berechnet werden. Dabei ist

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}} \quad (2.36)$$

die Fermi-Dirac-Verteilung der Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen bei der Temperatur T und der Fermienergie E_F . Das Transmissionsspektrum $T(E, U)$ gibt bei einer anliegenden Spannung U in Abhängigkeit der Energie die Summe der Transmissionswahrscheinlichkeiten durch das Gesamtsystem aller Transportkanäle (Bänder der Dispersionsrelation) an. Da sich bei einer Spannung $U \neq 0$ das System nicht im Gleichgewicht befindet, ist eine weitere Theorie nötig, die der *Nichtgleichgewichtsgreensfunktion*, auf deren Darstellung im folgenden jedoch verzichtet wird.

3 Software

Sämtliche Dichtefunktionaltheorierechnungen wurden mittels ATOMISTIX TOOLKIT 12.2.0 durchgeführt [8, 9]. Dabei wurden die in Tab. 3.1, 3.2, 3.3, 3.4, 3.5 und 3.6 aufgeführten Parameter verwendet.

Tab. 3.1: Parameter für die Geometrieoptimierung mit Atomistix ToolKit.

Rechner	Brenner
maximale Kraft	$0,01 \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$
Spannungen vorhanden	nein
maximale Schrittzahl	200
maximale Schrittweite	$0,5 \text{\AA}$
Einschränkungen	keine Optimierung der Elektrodenkopie sowie einer anschließenden Einheitszelle

Tab. 3.2: Parameter für die DFT-Rechnungen mit Atomistix ToolKit.

Rechner	DFT: LCAOCalculator
Basissatz	LDABasis.SingleZetaPolarized
Austausch-Korrelationsfunktional	Lokale-Dichte-Näherung: LDA.PZ
Elektronentemperatur	300 K
Gitternetzabstände ⁽¹⁾	$150 \text{ Ry}^{(2)}$
k-Punkt-Rasterung	(1,1,100)
Poisson-Gleichungslöser der Elektroden	FFT ⁽³⁾ mit periodischen Randbedingungen in alle Richtungen
Poisson-Gleichungslöser der Zentralregion	zweidimensionale FFT ⁽³⁾ mit periodischen Randbedingungen in alle Richtungen
Initialisierungselektronendichte der Zentralregion	Superposition der Dichte der neutralen Atome
Übergangslänge zwischen Elektrode und Zentralregion	7\AA
Elektrodenpotentiale	beidseitig 0 V

⁽¹⁾ in Energieeinheiten. Längeneinheit $\lambda = c\sqrt{\frac{\hbar^2 E}{2m_e}}$

⁽²⁾ $1 \text{ Ry} = 1 \text{ Rydberg} \approx 13,6 \text{ eV}$ = Bindungsenergie des 1s-Zustandes im Wasserstoffatom

⁽³⁾ schnelle Fouriertransformation

Tab. 3.3: Zusätzliche Parameter für die Berechnung der Elektronendichte mittels DFT (Parameter siehe Tab. 3.2) mit Atomistix ToolKit.

Spin	Spin.Sum
------	----------

Tab. 3.4: Zusätzliche Parameter für die Berechnung der Zustandsdichte und des 0 V-Transmissionsspektrums mittels DFT (Parameter siehe Tab. 3.2) mit Atomistix ToolKit.

Energien	Intervall $[-1, 5; 1, 5]$ eV in Abständen von 0,01 eV
k-Punkte	äquidistantes Gitter: MonkhorstPackGrid(1,1)
Nullpunktenergie	Fermienergie
Energieinkrement	$1 \cdot 10^{-6}$ eV
Selbstenergierechner	KrylovSelfEnergy()

Tab. 3.5: Zusätzliche Parameter für die Berechnung der spannungsabhängigen Transmissionsspektren mittels DFT (Parameter siehe Tab. 3.2) mit Atomistix ToolKit.

Energien	Intervall $[-1, 5; 1, 5]$ eV in Abständen von 0,01 eV
k-Punkte	äquidistantes Gitter: MonkhorstPackGrid(1,1)
Nullpunktenergie	Fermienergie
Energieinkrement	$1 \cdot 10^{-5}$ eV
Selbstenergierechner	KrylovSelfEnergy()
angelegte Spannungsdifferenz	Intervall $[0, 0.9]$ V in Abständen von 0,1 V

Tab. 3.6: Parameter für die Berechnung von Bandstruktur, Zustandsdichte und Transmissionsspektrum des unendlichen CNT mittels DFT mit Atomistix ToolKit.

Rechner	DFT: LCAOCalculator
Basissatz	GGABasis.DoubleZetaDoublePolarized
Austausch-Korrelationsfunktional	Verallgemeinerte-Gradienten-Näherung: GGA.PBE
Gitternetzabstände ⁽¹⁾	150 Ry ⁽²⁾
k-Punkt-Rasterung	(1,1,100)
Poisson-Gleichungslöser	FFT ⁽³⁾ mit periodischen Randbedingungen in alle Richtungen

⁽¹⁾ in Energieeinheiten. Längeneinheit $\lambda = c\sqrt{\frac{\hbar^2 E}{2m_e}}$

⁽²⁾ 1 Ry = 1Rydberg $\approx 13,6$ eV = Bindungsenergie des 1s-Zustandes im Wasserstoffatom

⁽³⁾ schnelle Fouriertransformation

4 Geometrie des untersuchten Systems in unterschiedlichen Konfigurationen

Die im folgenden untersuchten Systeme sind stets in drei Bereiche gegliedert, wie dies schematisch in Abb. 4.1, 4.2 und 4.3 dargestellt ist: eine große Zentralregion, die das eigentliche zu untersuchende System darstellt, und zwei kleinere Elektrodenregionen, die als Kontakte und Elektronenreservoir dienen. Die Kontaktfläche ist blau eingezeichnet. Die Elektrodenregionen enthalten an allen Kontaktstellen zur Zentralregion eine möglichst kleine Anzahl an Einheitszellen CNT (rot eingezeichnet), die jedoch länger sein muss als der effektive Wechselwirkungsabstand zweier Atome. Die Zentralregion enthält an beiden Seiten eine Kopie der Elektrode (ebenfalls rot eingezeichnet), welche an den Rändern die Eigenschaften der Elektroden erzwingt. Des Weiteren enthält diese zuzüglich zu demjenigen CNT, dessen Eigenschaften berechnet werden sollen, eine zusätzliche Einheitszelle an der Elektrodenkopie (grün eingezeichnet), die bei der Optimierung festgehalten wird und einen Abbruch des Programms verhindert, für den Fall, dass die inneren Atome in den Bereich der Elektrodenkopie verschoben werden sollten.

Um den Einfluss der Krümmung eines Kohlenstoffnanoröhrchens und den zweier nah beieinander liegender CNTs, im folgenden stets als Kreuzung bezeichnet, systematisch und getrennt von einander zu untersuchen, empfiehlt sich die Variation diverser Parameter bei der Berechnung der Eigenschaften des Systems.

4.1 Variation des Krümmungsradius

Die Variation des Krümmungsradius geschieht wie in Abb. 4.1 dargestellt. Das zentrale CNT wird dabei in drei Bereiche unterteilt: einen horizontalen, einen gekrümmten und einen diagonalen Teil. Es empfiehlt sich, die Anzahl der Atome konstant zu halten und für die Bereiche ganze Einheitszellen zu wählen. Eine Gesamtzahl von 12 Einheitszellen bietet sich daher an. Die Aufteilung erfolgt dann in

- jeweils zwei Einheitszellen in der Kontaktregion, jeweils zwei Einheitszellen in der Krümmungsregion, vier Einheitszellen in der diagonalen Verbindungsregion (kurz: $\{2, 2, 4\}$, siehe Abb. 4.1a),
- jeweils eine Einheitszelle in der Kontaktregion, jeweils vier Einheitszellen in der Krümmungsregion, zwei Einheitszellen in der diagonalen Verbindungsregion (kurz: $\{1, 4, 2\}$, siehe Abb. 4.1b),
- keine Kontaktregion, jeweils sechs Einheitszellen in der Krümmungsregion, keine diagonale Verbindungsregion (kurz: $\{0, 6, 0\}$, siehe Abb. 4.1c).

4.2 Zusammengesetztes System aus linearem und gekrümmtem CNT

Um den Einfluss von Krümmung und Kreuzung herauszuarbeiten, sind die Eigenschaften der folgenden drei Systeme zu berechnen:

- ein lineares CNT (siehe Abb. 4.2a),
- ein gekrümmtes CNT (siehe Abb. 4.2b),
- ein zusammengesetztes System aus dem linearen und dem gekrümmten CNT aus den obigen beiden Punkten (siehe Abb. 4.2c).

Das gekrümmte CNT wird dabei so gewählt, wie in Kapitel 4.1 beschrieben. Die Länge des linearen CNT wird der Länge der Zentralregion des gekrümmten CNTs angepasst. Der senkrechte Abstand beider CNTs im zusammengesetzten System wird auf den CNT-CNT-Gleichgewichtsabstand von etwa 3 Å gesetzt [10]. Den Einfluss des Krümmungsradius auf eine Observable lässt sich daraus wie folgt bestimmen:

$$\Delta O_l = O_{kr} - O_{lin} \quad . \quad (4.1)$$

Analog folgt für den Einfluss des Kreuzungsbereiches

$$\Delta O_{\times} = O_{tot} - O_{lin} - O_{kr} \quad . \quad (4.2)$$

Dabei steht O_{lin} , O_{kr} bzw. O_{tot} für die Observable des einzelnen, linearen CNTs, des einzelnen gekrümmten CNTs sowie des zusammengesetzten Gesamtsystems und ΔO_l bzw. ΔO_{\times} für den Einfluss von Krümmung sowie Kreuzung. Bei einem solchen Vergleich fehlen bei den Einzelsystemen im Vergleich zum Gesamtsystem ein Teil der Atome und in der Rechnung somit auch die zugehörigen Basisfunktionen. Da bei großen Systemen der Basissatz nie vollständig ist, kommt es dadurch zu Superpositionsfehlern. Diese können behoben werden, indem man sogenannte Geisteratome einführt, bei denen lediglich an der entsprechenden Atomposition eine Basis zur Verfügung gestellt wird, alle sonstigen atomaren Eigenschaften aber fehlen. Somit kann in den Einzelsystemen das jeweils andere CNT als Geister-CNT mit eingebracht werden, um den Superpositionsfehler zu beheben. Das hier untersuchte System weist allerdings bis auf in der Kreuzungsregion große Abstände zwischen den beiden CNTs auf, sodass der Fehler gering sein sollte. Weiterhin würde das Geister-CNT die Atomzahl der Einzelsysteme verdoppeln und somit die Rechenzeit dieser extrem erhöhen. Auf die Verwendung der Geister-Atome wurde daher verzichtet.

4.3 Variation des Kontaktwinkels

Zur Bestimmung des Einflusses des Kreuzungsbereiches wird der Kontaktwinkel α , d.h. der Winkel zwischen den beiden Tangenten an die longitudinale Achse beider CNTs, von 10° bis 90° in Intervallen von 10° für alle Systemkombinationen aus Kapitel 4.1 und 4.2 variiert (siehe Abb. 4.3). Die Gesamtzahl der Atome wurde dabei wieder auf 12 Einheitszellen festgehalten. Da mit der Veränderung des Kontaktwinkels somit auch eine Veränderung des Krümmungsradius einhergeht, ist somit der Einfluss der Krümmung ebenfalls erfasst. Bei einer Einheitszellenlänge l und einer Anzahl von k Einheitszellen in der Krümmungsregion ist der Zusammenhang zwischen Kreuzungswinkel und Krümmungsradius durch $R\alpha = kl$ gegeben.

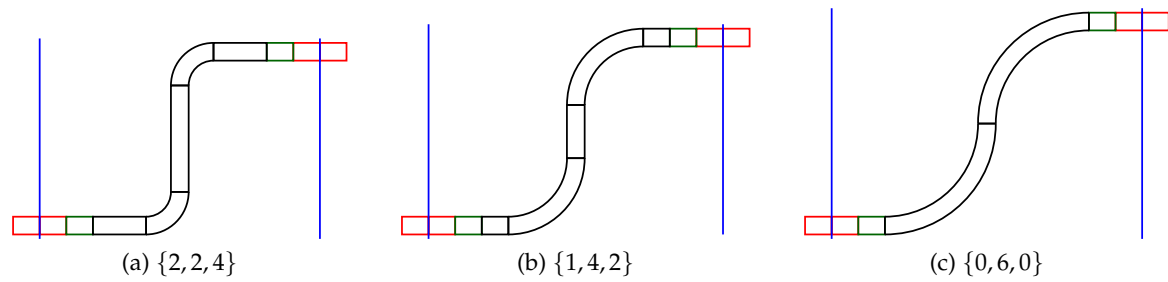


Abb. 4.1: Zur Untersuchung des Einflusses der Krümmung wurden die Observablen für drei verschiedene Kombinationen mit der gleichen Anzahl Einheitszellen berechnet. (a) jeweils 2 Einheitszellen Kontaktregion, jeweils 2 Einheitszellen Krümmung und 4 Einheitszellen mittlere Verbindung. (b) jeweils 1 Einheitszelle Kontaktregion, jeweils 4 Einheitszellen Krümmung und 2 Einheitszellen mittlere Verbindung. (c) jeweils 6 Einheitszellen Krümmung, keine Kontaktregion und mittlere Verbindung. Der rote Bereich markiert die Elektrode und die Elektrodenkopie. Die blaue Linie markiert die Kontaktebene zwischen der Zentralregion und den Elektroden. Bei allen Konfigurationen wurde jeweils eine Einheitszelle als Abstandshalter (grün) eingefügt.

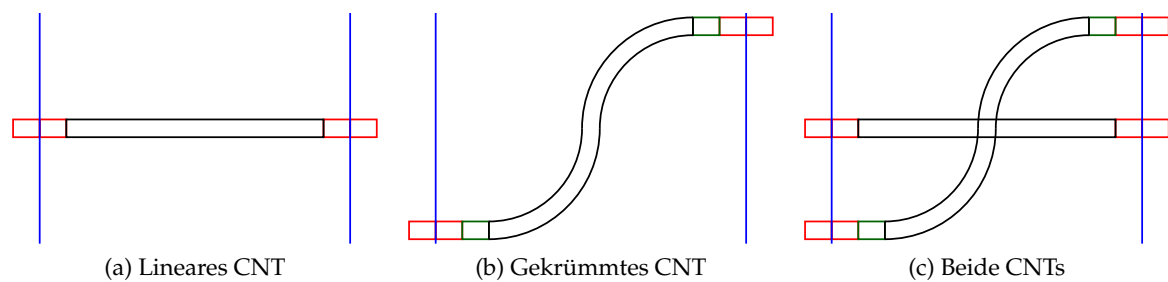


Abb. 4.2: Zur Untersuchung des Einflusses von Krümmung und Kontaktwinkel wurden die Observablen (a) für ein lineares CNT, (b) für ein gekrümmtes CNT und (c) für die Kombination aus beiden CNTs berechnet. Der rote Bereich markiert die Elektrode und die Elektrodenkopie. Die blaue Linie markiert die Kontaktebene zwischen der Zentralregion und den Elektroden. Die grüne Einheitszelle fungiert als zusätzlicher Abstandshalter.

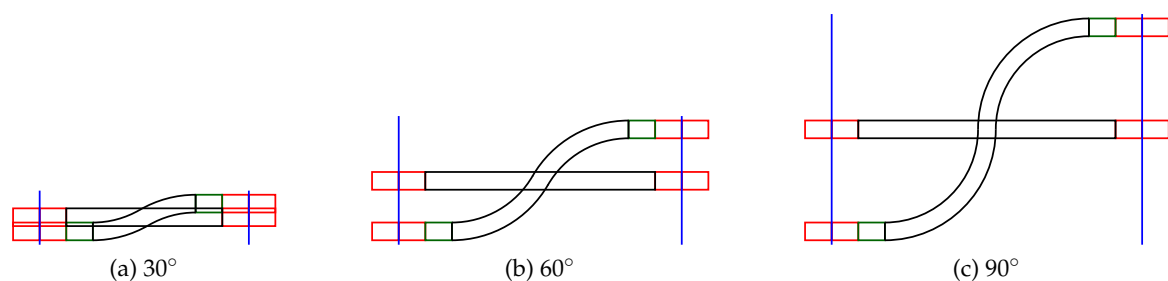


Abb. 4.3: Zur Untersuchung des Einflusses von Krümmung und Kontaktwinkel wurden die Observablen für Winkel von 10° bis 90° in Intervallen von 10° berechnet. Der rote Bereich markiert die Elektrode und die Elektrodenkopie. Die blaue Linie markiert die Kontaktebene zwischen der Zentralregion und den Elektroden. Die grüne Einheitszelle fungiert als zusätzlicher Abstandshalter.

4.4 Wahl des CNT

Das gekrümmte CNT in der gewählten Geometrie besitzt in der Zentralregion 14 Einheitszellen. Um die Rechnung möglichst kurz zu halten, ist es daher zweckmäßig, eine CNT-Art mit wenigen Atomen je Einheitszelle zu wählen. Tab. 4.1 zeigt hierzu für $m = 4 \dots 6$ die Atomanzahl je Einheitszelle, den Umfang und die Länge. Setzt man 500 Atome als Grenze, so entfallen alle CNTs mit mehr als 35 Atomen je Einheitszelle und es verbleiben (4,0)-, (4,1)-, (4,4)-, (5,0)-, (5,5)-, (6,0)- und (6,6)-CNT. Als zweites Kriterium sollte die Länge möglichst groß und somit der Umfang möglichst klein sein. Dies wird am besten durch das (4,1)-CNT erfüllt. Eine zugehörige Grafik ist in Abb. 4.4 abgebildet. Dabei handelt es sich um ein metallisches CNT. Zur systematischen Untersuchung des Leitfähigkeitsverhaltens ist dies besser geeignet als ein halbleitendes CNT. Um eventuell auch Aussagen über halbleitende CNTs zu bekommen, wird im Anschluss an die systematische Untersuchung des metallischen CNTs das halbleitende (4,2)-CNT mit kleiner Bandlücke und das halbleitende (7,0)-CNT mit großer Bandlücke in der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ untersucht.

Tab. 4.1: Übersicht über Atomzahl, Umfang und Länge verschiedener CNT.

m	n	N	u/a	$N/u \sim l$
4	0	16	4,000	4,000
	1	28	4,583	6,110
	2	56	5,292	10,583
	3	148	6,083	24,331
	4	16	6,928	2,309
5	0	20	5,000	4,000
	1	124	5,568	22,271
	2	52	6,245	8,327
	3	196	7,000	28,000
	4	244	7,810	31,241
6	0	24	6,000	4,000
	1	172	6,557	26,229
	2	104	7,211	14,422
	3	84	7,937	10,583
	4	152	8,718	17,436
7	0	28	7,000	4,000
	1	364	9,539	38,158
	2	24	10,392	2,309
	3	28	7,000	4,000
	4	28	7,000	4,000

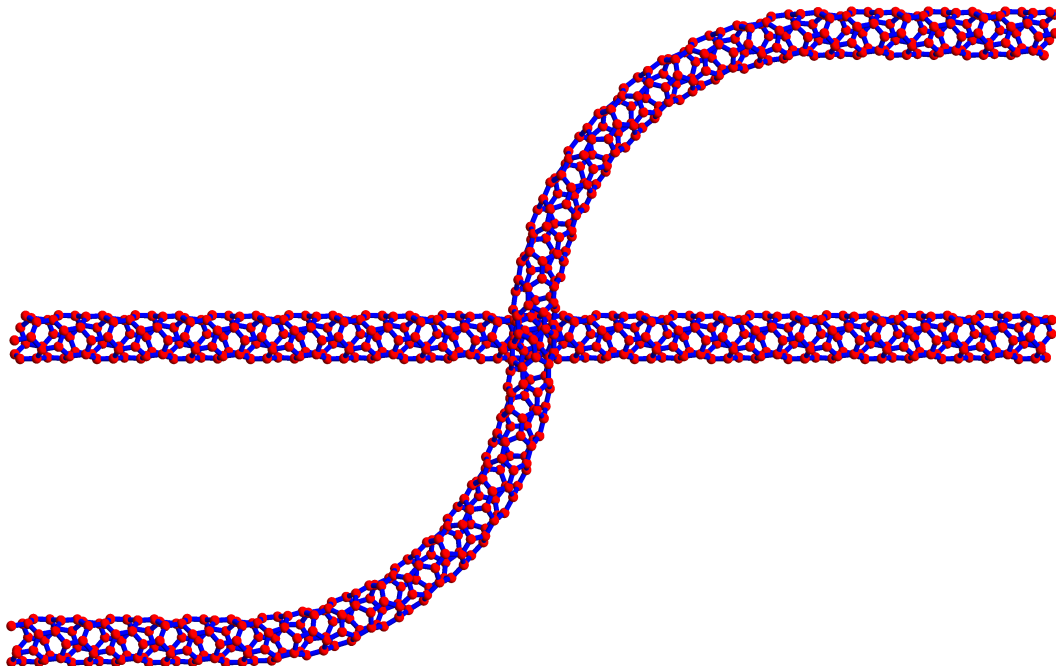


Abb. 4.4: Untersuchtes System mit einem (4,1)-CNT im Kugel-Modell. Der Abstand beider CNTs senkrecht zur Bildebene beträgt 3 Å.

5 Ergebnisse

5.1 Observablen

5.1.1 Gesamtenergie

Abb. 5.1 zeigt die Gesamtenergie pro Atom in Abhängigkeit des Kreuzungswinkels α . Dargestellt sind die drei verschiedenen Konfigurationen $\{0,6,0\}$ (durchgezogene Linie), $\{1,4,2\}$ (gestrichelte Linie) und $\{2,2,4\}$ (gepunktete Linie). Ein Vergleich zwischen den drei Kurven zeigt, dass mit zunehmender Krümmung bzw. abnehmendem Krümmungsradius (vgl. Kurvenverlauf: $R(\{2,2,4\}) > R(\{1,4,2\}) > R(\{0,6,0\})$) die Gesamtenergie pro Atom abnimmt und sich dem Energieminimierungsprinzip zufolge stets die Konfiguration $\{0,6,0\}$ einstellen wird. Dies bestätigt die Vermutungen, da durch die Krümmung innere Spannungen verursacht werden und diese mit kleiner werdendem Krümmungsradius zunehmen. Dies wird auch durch die Winkelabhängigkeit bestätigt: mit zunehmendem Kreuzungswinkel nimmt der Krümmungsradius ab und die Gesamtenergie pro Atom erhöht sich. Weiterhin ist ersichtlich, dass die Energie dabei etwa quadratisch mit α anwächst. Allerdings liegt der Effekt bei etwa 0,18 eV und ist somit sehr gering.

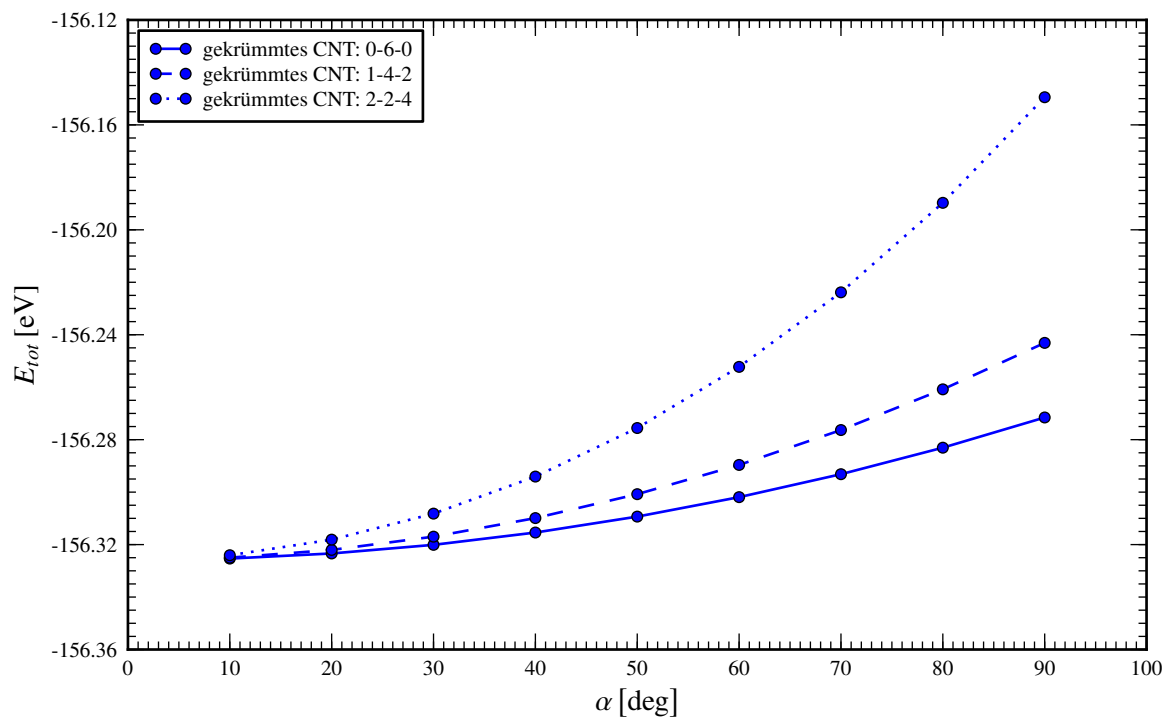


Abb. 5.1: Winkelabhängigkeit der Gesamtenergie pro Atom für das einzelne gekrümmte CNT jeweils für die drei Konfigurationen aus Abb. 4.1.

5.1.2 Elektronendichte

Ausgangspunkt aller Observablen ist die Berechnung der Elektronendichte $n(\vec{r})$. Da es sich dabei um eine Abbildung $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ handelt und die Darstellung desselben im Allgemeinen schwierig ist, wird eine Integration über die einzelnen Raumrichtungen durchgeführt. Die entsprechenden integrierten Elektronendichten sind

$$n(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} n(\vec{r}) dz, \quad (5.1)$$

$$n(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} n(\vec{r}) dy, \quad (5.2)$$

$$n(y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} n(\vec{r}) dx \quad (5.3)$$

und zeigen eine Seitenansicht, Draufsicht bzw. Frontansicht. Abb. 5.2, 5.3 und 5.4 zeigen $n(y, z)$ für die Konfiguration mit größtem Krümmungsradius $\{0, 6, 0\}$ für die Winkel $\alpha = 30^\circ$, $\alpha = 60^\circ$ und $\alpha = 90^\circ$. Es sind die Atompositionen erkennbar, da dort die Elektronendichte maximal ist. Mit wachsender Entfernung von den Atompositionen fällt n sehr schnell ab. Die scheinbar doppelt so hohe Dichte in der Mitte der Bilder ist lediglich darauf zurückzuführen, dass dort beide CNT hintereinander liegen und somit doppelt so viele Atome auf die dargestellte Ebene projiziert werden.

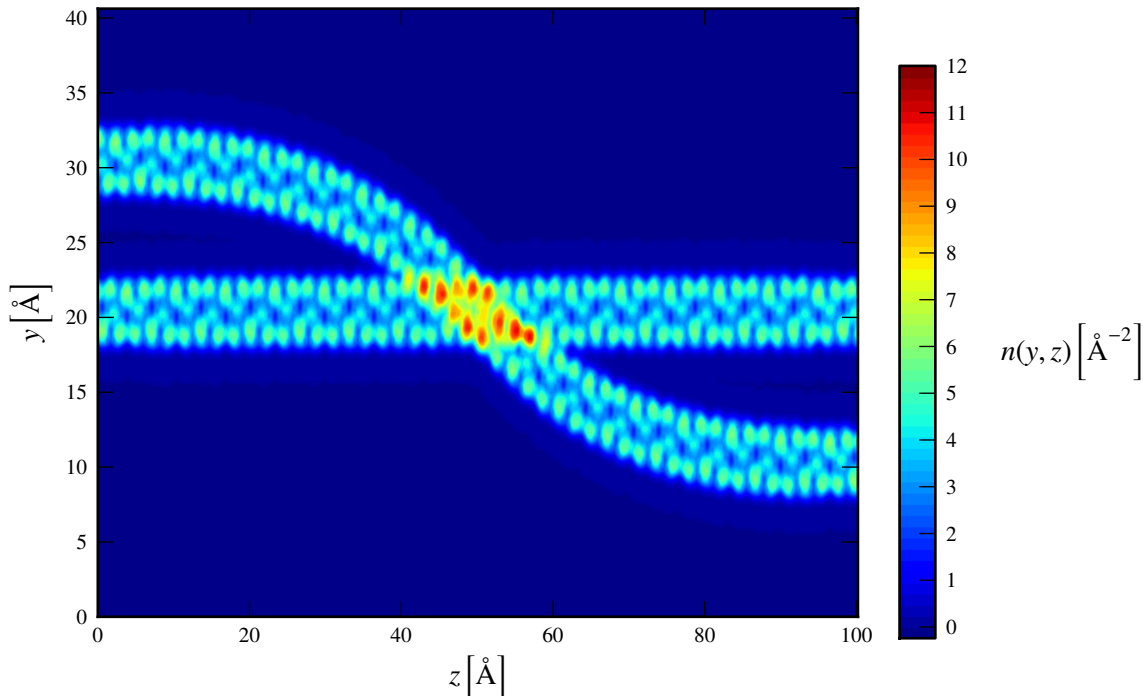


Abb. 5.2: Integrierte Elektronendichte $n(y, z)$ der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 30^\circ$.

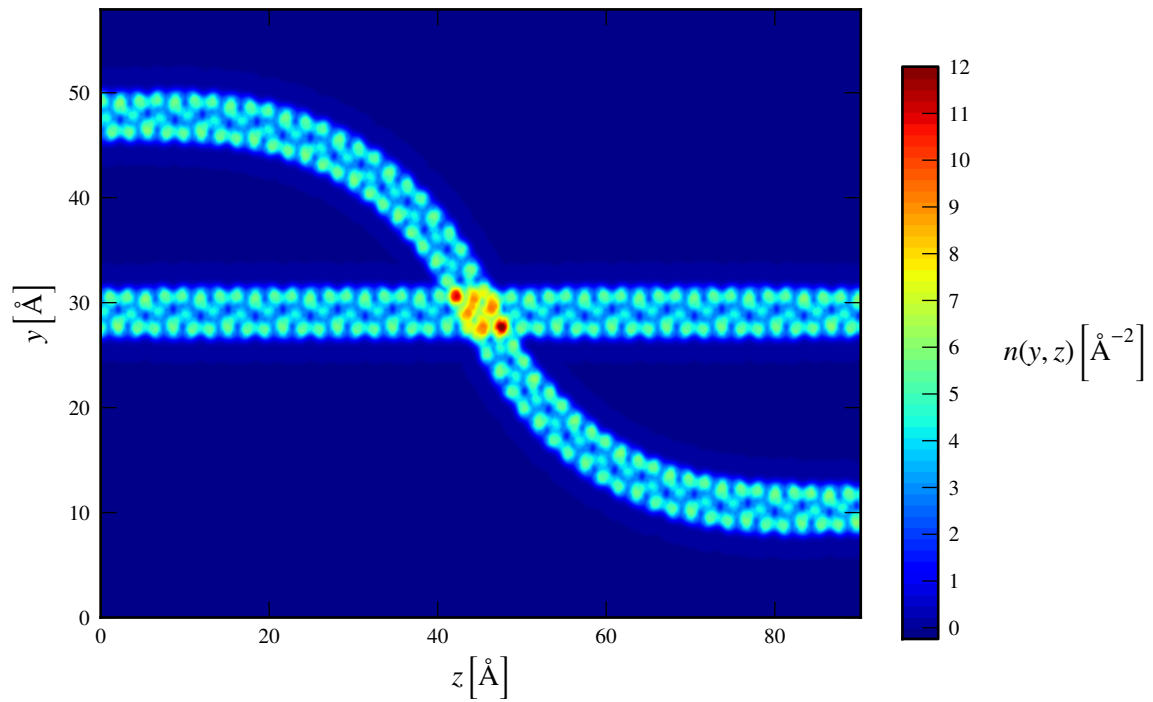


Abb. 5.3: Integrierte Elektronendichte $n(y, z)$ der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 60^\circ$.

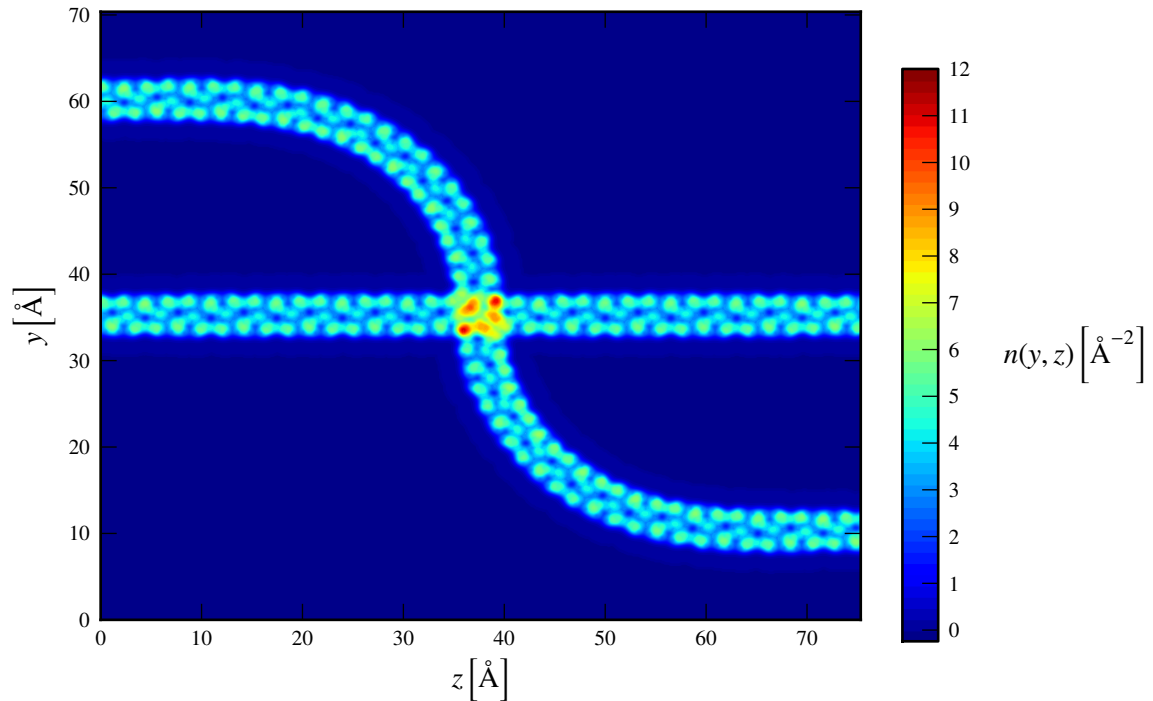


Abb. 5.4: Integrierte Elektronendichte $n(y, z)$ der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 90^\circ$.

5.1.3 Zustandsdichte

In Abb. 5.5 ist die Zustandsdichte eines linearen CNT vor (schwarz) und nach (blau) der Optimierung der Zentralregion dargestellt. Deutlich erkennbar sind die Van-Hove-Singularitäten des periodischen quasi-eindimensionalen Systems. Durch die Optimierung verschwinden diese, der Verlauf wird welliger und es taucht das allgemeine zackige Verhalten nicht periodischer Strukturen auf, d.h. es existieren nah bei einander liegende, scharfe Peaks. Des Weiteren ist die Zustandsdichte des linearen optimierten CNT stark abhängig von der Länge der Zelle. Dabei treten offenbar unsystematisch zusätzliche Peaks in den nahezu konstanten Bereichen zwischen den Singularitäten auf. Um den Verlauf besser herauszuarbeiten, kann man die Kurve glätten, indem man jeden Datenpunkt (E_j, D_j) gaußverbreitert, d.h. in eine Gaußkurve mit Erwartungswert E_j und gegebener Varianz σ^2 (diese gibt die Verbreiterung der Peaks an) umwandelt, wobei diese auf D_j normiert ist. Die geglättete (gaußverbreiterte) Kurve ist somit die diskrete Faltung der Funktion $D(E)$ mit einem gaußförmigen Kern und für einen neuen Datenpunkt D'_i ergibt sich

$$D'_i = \sum_j \frac{D_j}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(E_i - E_j)^2} . \quad (5.4)$$

Für die Verbreiterung wurde stets $\sigma = 0,02 \text{ eV}^{1/2}$ gewählt. Abb. 5.6 zeigt die geglättete Zustandsdichte des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{0,6,0\}$ für die verschiedenen Kreuzungswinkel α . Abb. 5.7 zeigt den gleichen Sachverhalt für das zusammengesetzte System. Zusätzlich eingezeichnet ist die Zustandsdichte des linearen unoptimierten Systems. Es zeigt sich, dass sich die Zustände der Van-Hove-Singularitäten in Richtung der nahezu konstanten Bereiche verschieben.

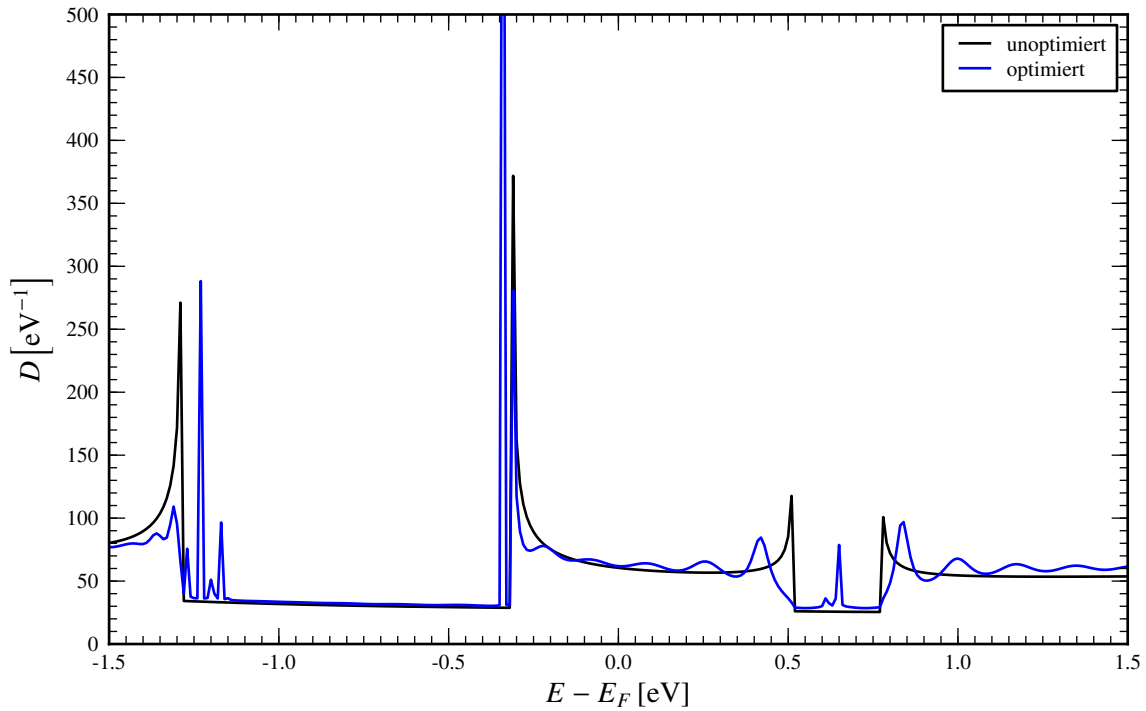


Abb. 5.5: Zustandsdichte $D(E)$ eines linearen CNT.

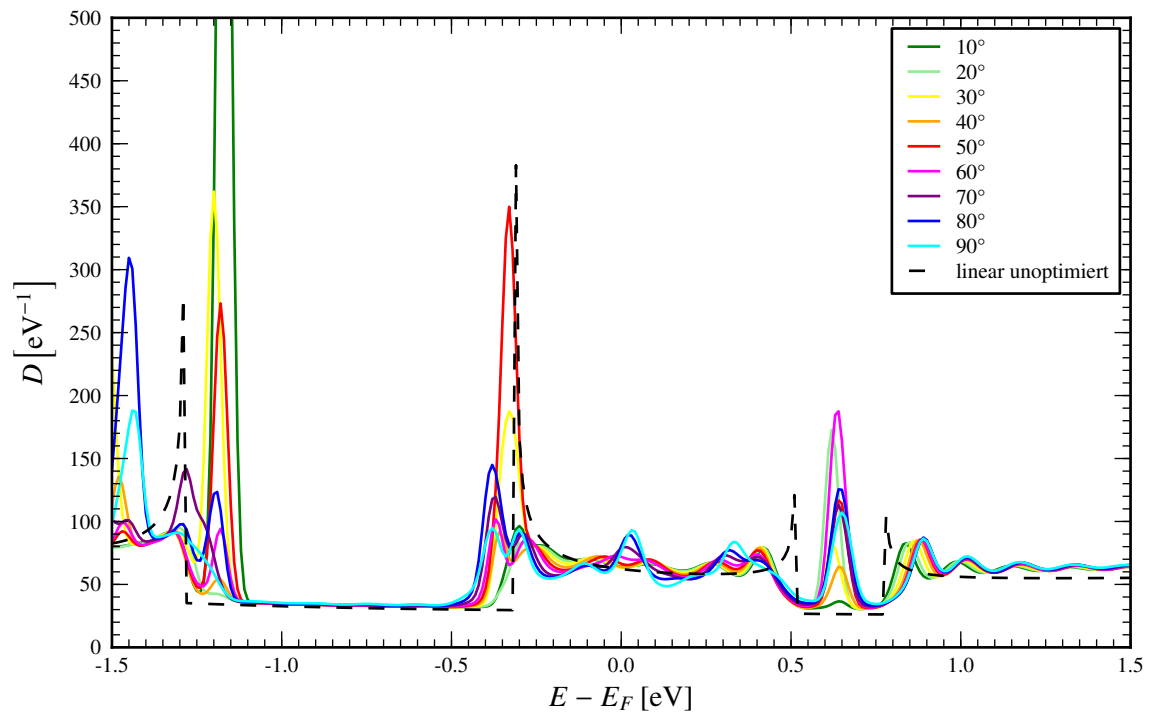


Abb. 5.6: Gaußverbreiterte Zustandsdichte $D(E)$ des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{0,6,0\}$ für die verschiedenen Kreuzungswinkel α .

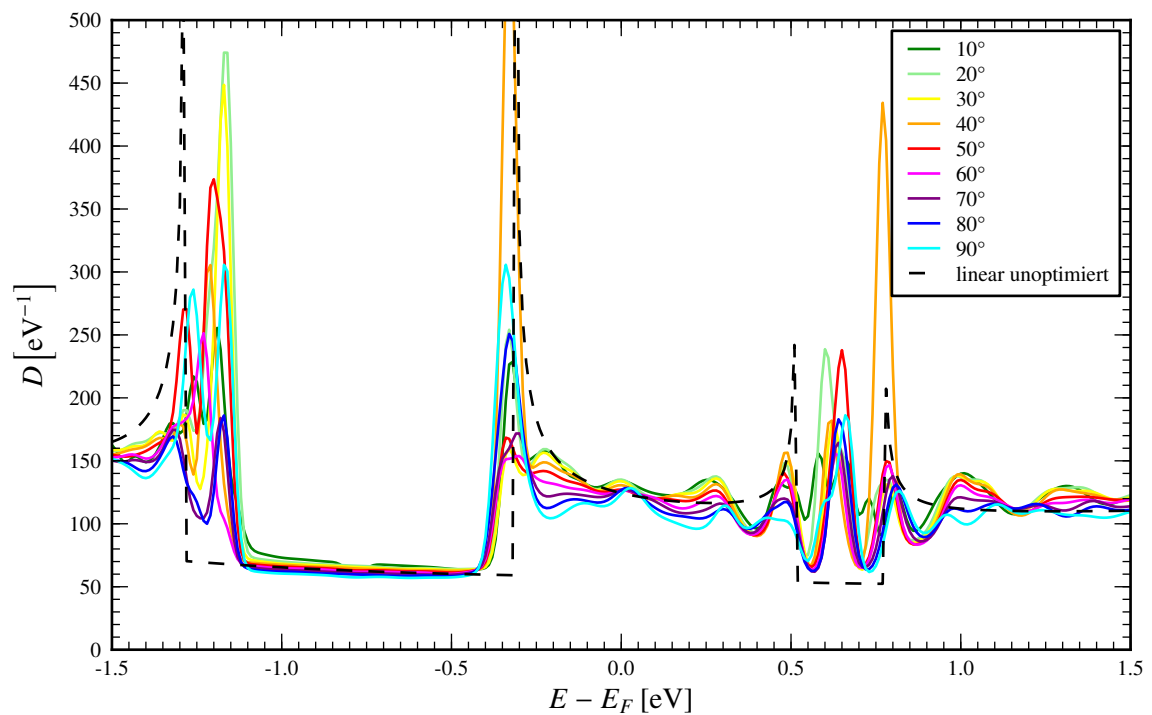


Abb. 5.7: Gaußverbreiterte Zustandsdichte $D(E)$ des Gesamtsystems der Konfiguration $\{0,6,0\}$ für die verschiedenen Kreuzungswinkel α .

5.1.4 Transmissionsspektrum

In Abb. 5.8 ist das Transmissionsspektrum eines linearen CNT vor (schwarz) und nach (blau) der Optimierung der Zentralregion dargestellt. Durch die Optimierung wird der Kurvenverlauf in Bereichen hoher Transmission sinusförmig vermindert. Eine Erhöhung ist nicht möglich, da der ballistische Transport von Graphen und idealen unendlichen CNTs die theoretische Obergrenze darstellt. Abb. 5.9 zeigt das geglättete Transmissionsspektrum des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für die verschiedenen Kreuzungswinkel α . Es ist ersichtlich, dass mit zunehmendem Kreuzungswinkel, mit dem der Krümmungsradius abnimmt, sich das Transmissionsspektrum im etwa 0,8 eV breiten Energiebereich mit $T = 4$ nahe der Fermienergie stark verringert, bis bei $\alpha = 90^\circ$ schließlich $T(E)$ im Schnitt auf den Wert der angrenzenden Bereiche ($T \approx 2$) abgefallen ist. Die Transmission bei höheren Energien bleibt unverändert. Abb. 5.10 und 5.11 zeigen den selben Sachverhalt für die Konfigurationen $\{1, 4, 2\}$ und $\{2, 2, 4\}$. Dabei wird die weitere Absenkung der Transmission bei noch kleineren Krümmungsradien ersichtlich. Bei der Unterschreitung eines kritischen Krümmungsradius wird die Transmission im gesamten Energiebereich drastisch abgesenkt, auf durchschnittlich etwa $T \approx 0,8$ bei 80° und $T \approx 0,4$ bei 90° in Abb. 5.11. Dies führt zu einer Absenkung der elektrischen Leitfähigkeit für die entsprechende Struktur. Der kritische Krümmungsradius lässt sich daraus zu

$$7 \text{ \AA} < R_{krit} < 8 \text{ \AA} \quad (5.5)$$

abschätzen. Abb. 5.12 zeigt das Transmissionsspektrum für das zusammengesetzte System der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$. Zusätzlich eingezeichnet ist das Transmissionsspektrum zweier idealer, linearer, unkorrelierter CNTs. Hierbei kann die Transmission bis auf maximal die Hälfte abgesenkt werden, da das lineare CNT unverändert bleibt und Beiträge zur Transmission liefert.

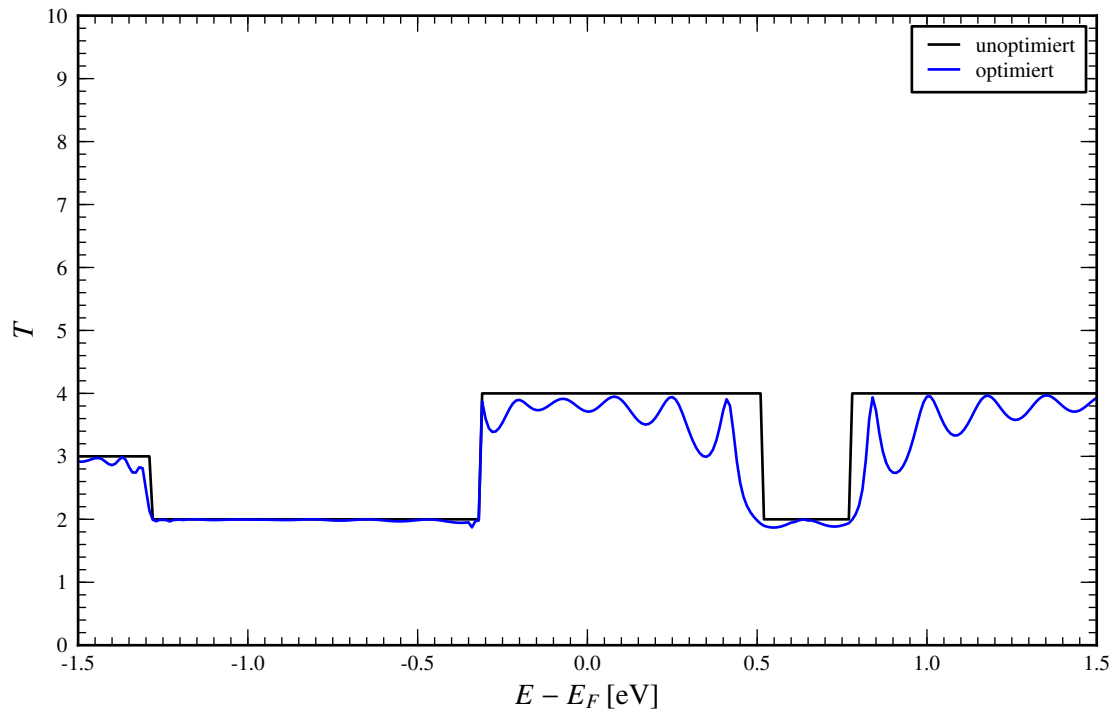


Abb. 5.8: Transmissionsspektrum $T(E)$ eines linearen CNT.

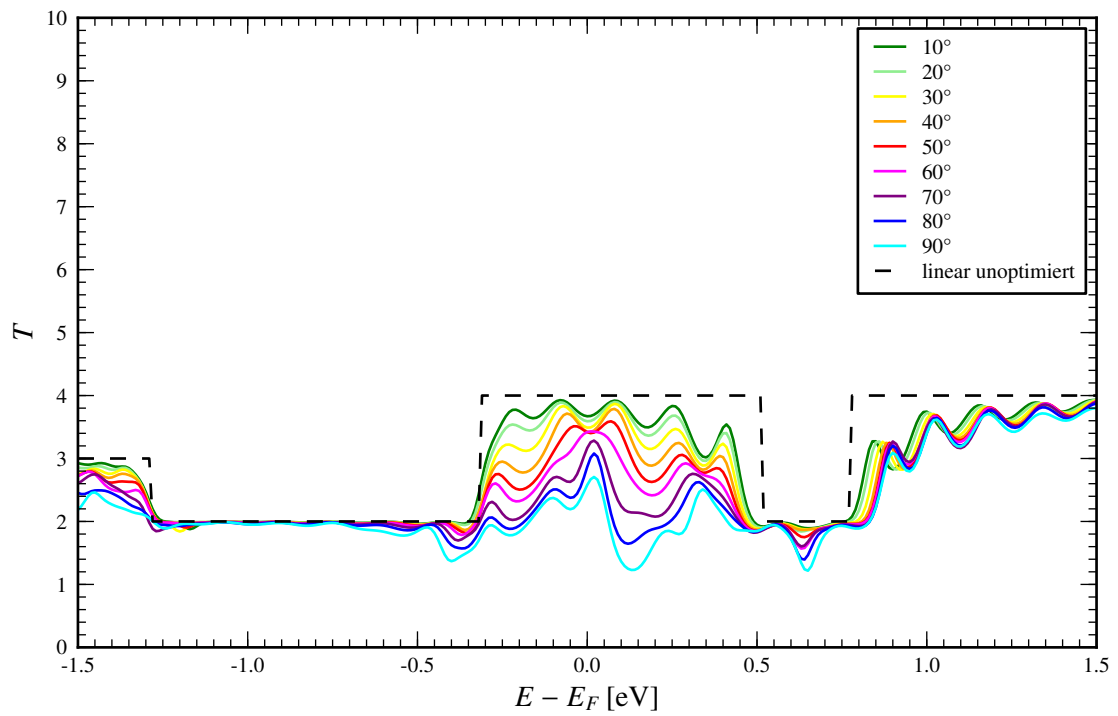


Abb. 5.9: Gaußverbreitertes Transmissionsspektrum $T(E)$ des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{0,6,0\}$ für die verschiedenen Kreuzungswinkel α .

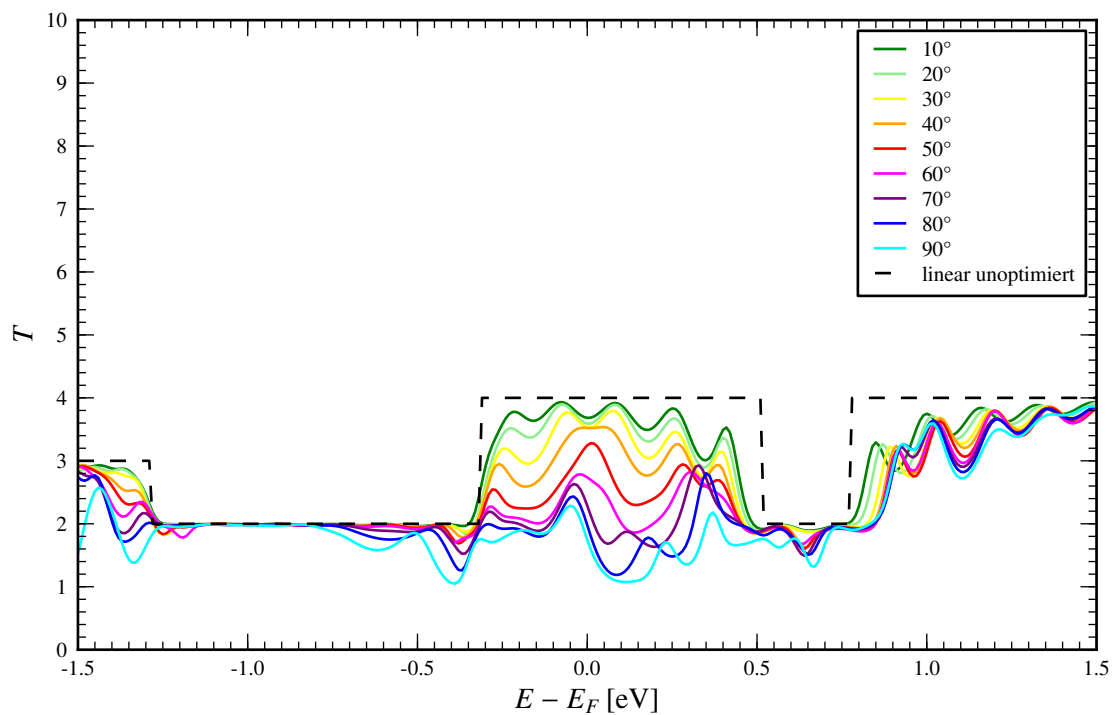


Abb. 5.10: Gaußverbreitertes Transmissionsspektrum $T(E)$ des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{1,4,2\}$ für die verschiedenen Kreuzungswinkel α .

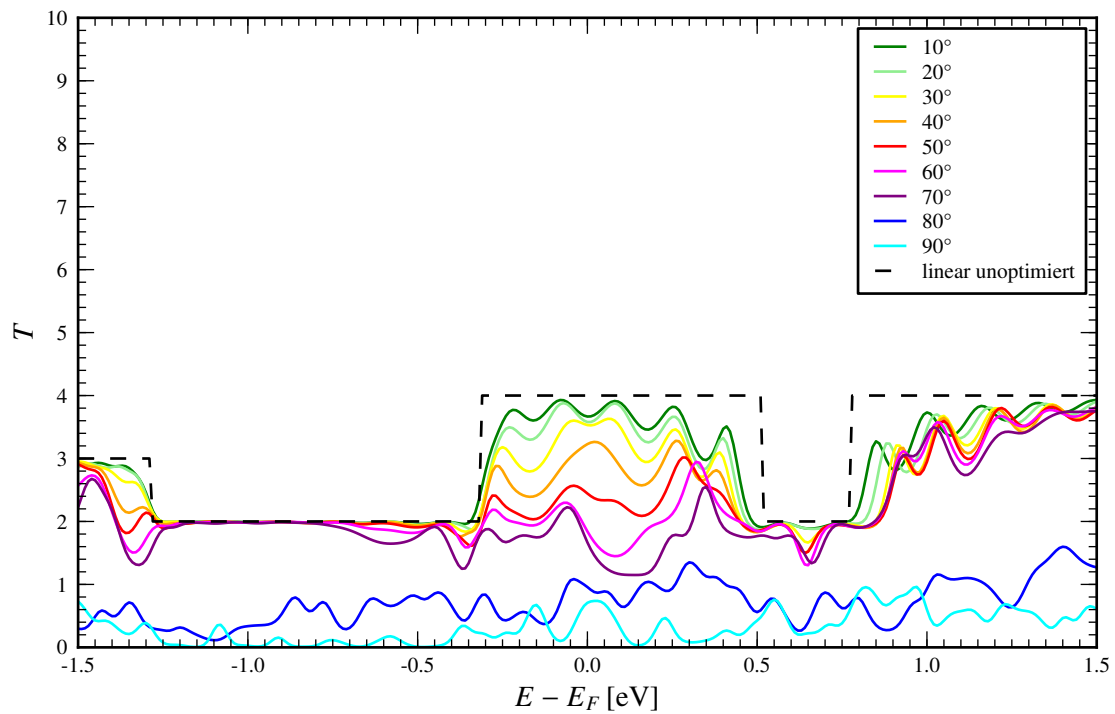


Abb. 5.11: Gaußverbreitetes Transmissionsspektrum $T(E)$ des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{2,2,4\}$ für die verschiedenen Kreuzungswinkel α .

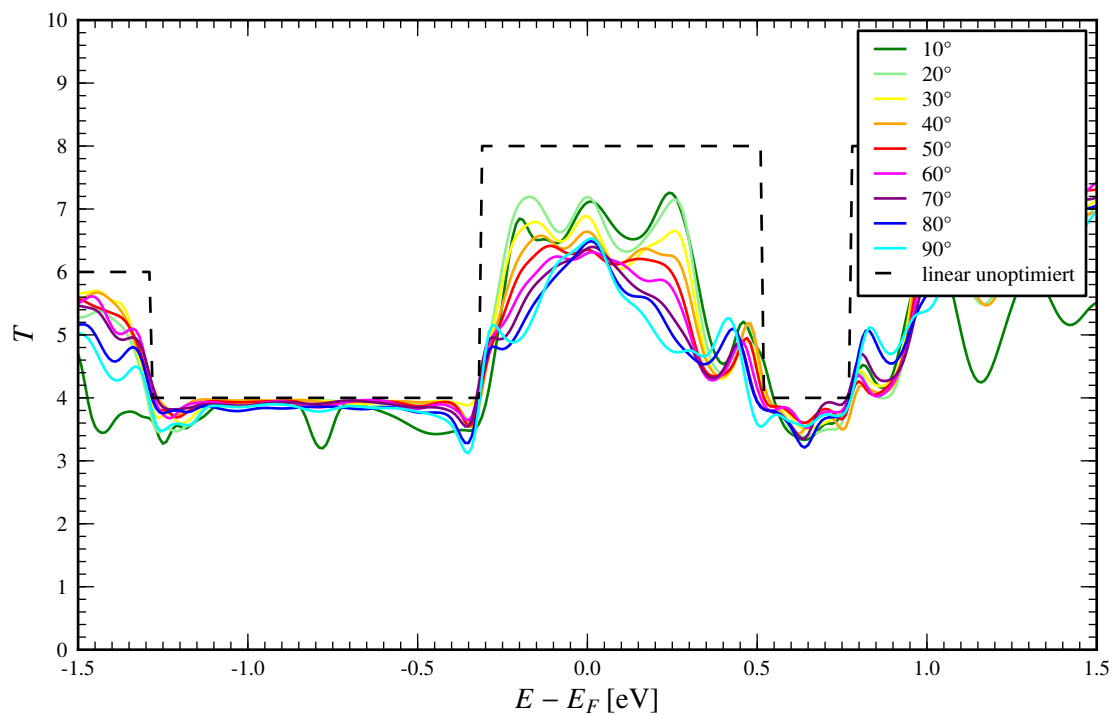


Abb. 5.12: Gaußverbreitetes Transmissionsspektrum $T(E)$ des Gesamtsystems der Konfiguration $\{0,6,0\}$ für die verschiedenen Kreuzungswinkel α .

5.2 Einfluss von Krümmung und Kreuzung durch Differenzbildung

Der Einfluss der Krümmung (Index \wr) und der Kreuzungsregion (Index \times) kann durch Bildung der Differenz der Observablen des linearen (Index lin), gekrümmten (Index kr) und des Gesamtsystems (Index tot) bestimmt werden:

$$\Delta O_{\wr} = O_{kr} - O_{lin} \quad , \quad (5.6)$$

$$\Delta O_{\times} = O_{tot} - O_{lin} - O_{kr} \quad . \quad (5.7)$$

In Abb. 5.13, 5.14 und 5.15 ist die Differenz der Elektronendichten

$$\Delta n = n_{tot} - n_{lin} - n_{kr} \quad (5.8)$$

für die drei jeweiligen Ansichten für die Konfiguration $\{0,6,0\}$ dargestellt. Dabei ist der Kreuzungswinkel $\alpha = 10^\circ$, da hier die größte Überlappung auftritt und der Effekt daher am besten sichtbar ist. Die grauen Punkte markieren die Atompositionen. Es zeigt sich, dass es im Kontaktbereich zur Umverteilung der Elektronen kommt. Dabei wird die Elektronendichte an den Atompositionen in Richtung des Kontaktbereiches erhöht und in den direkt angrenzenden Gebieten innerhalb und außerhalb des Kohlenstoffnanoröhrchens verringert. Weiterhin kommt es zu einer in z periodischen, im Vergleich dazu etwa doppelt so starken Erhöhung der Elektronendichte in der Mitte des Kontaktbereiches ($30 \text{ \AA} < z < 70 \text{ \AA}$, $13 \text{ \AA} < x < 14 \text{ \AA}$). 20 Maxima befinden sich innerhalb einer Strecke von 40 \AA . Somit beträgt die zugehörige Wellenlänge etwa 2 \AA .

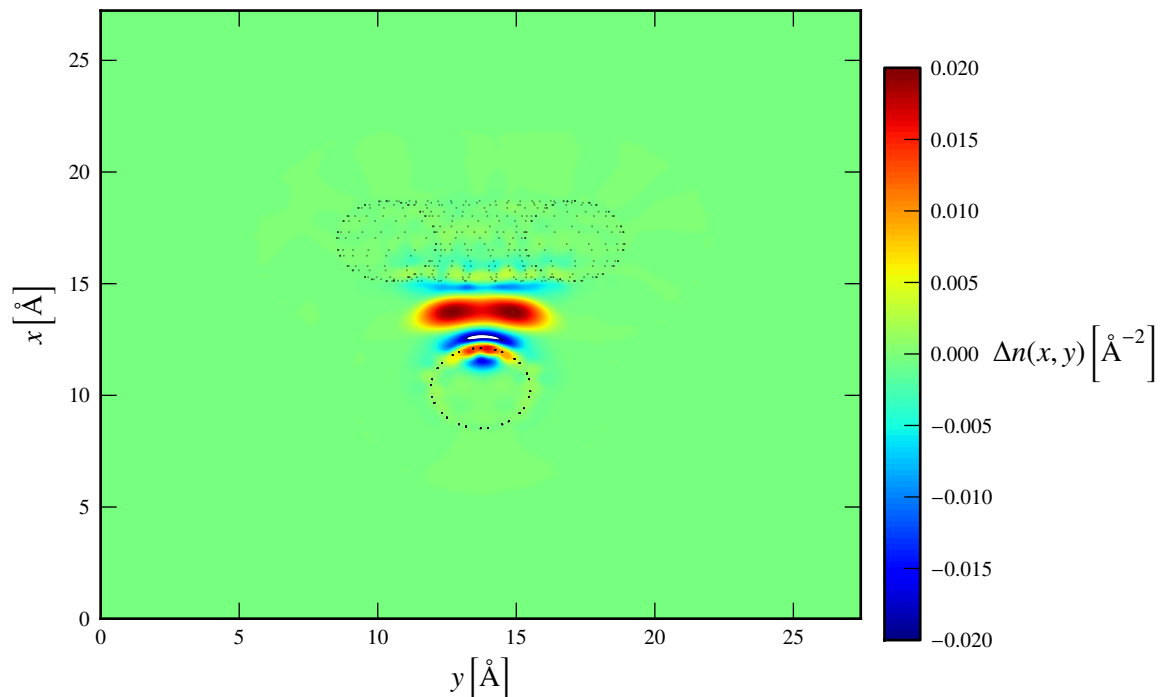


Abb. 5.13: Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(x, y)$ der Konfiguration $\{0,6,0\}$ bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 10^\circ$.

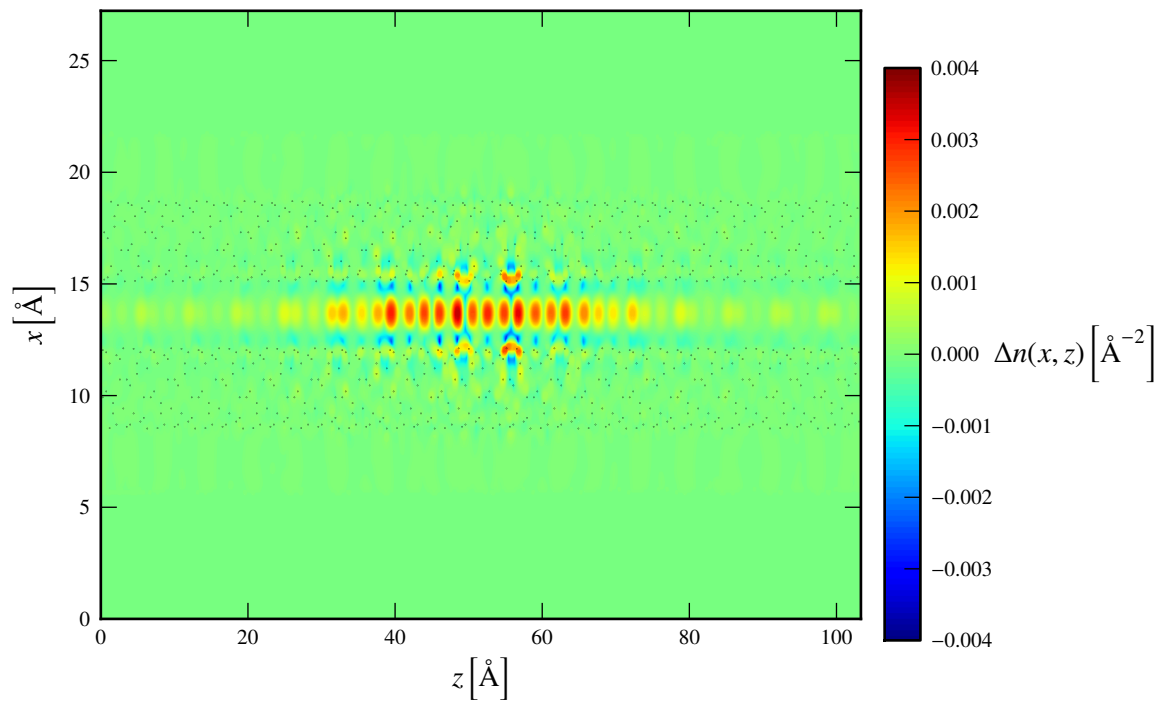


Abb. 5.14: Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(x, z)$ der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 10^\circ$.

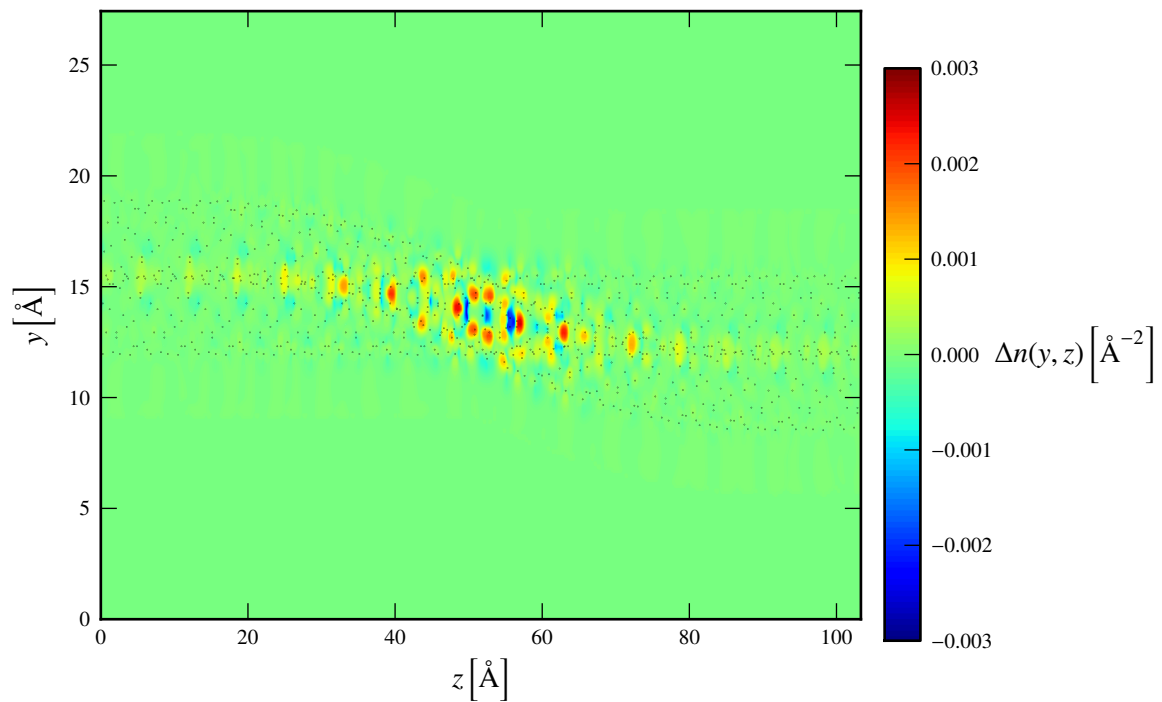


Abb. 5.15: Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(y, z)$ der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 10^\circ$.

5.3 Strom-Spannungs-Kennlinien

5.3.1 Strom-Spannungs-Kennlinien

Abb. 5.16 zeigt die Strom-Spannungs-Kennlinien des linearen sowie der gekrümmten CNTs der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ mit Winkel α im Bereich von 10° bis 90° . Abb. 5.17 und 5.18 zeigen dies für die Konfigurationen $\{1, 4, 2\}$ und $\{2, 2, 4\}$. Es ist ersichtlich, dass der Strom im Spannungsbereich bis $0,7\text{ V}$ mit zunehmendem Winkel α , d.h. mit zunehmender Krümmung, abnimmt. Der Vergleich der drei Diagramme untereinander bestätigt dies, da auch hier der Strom für die Kurven mit gleichem Kreuzungswinkel beim Durchlaufen der Konfigurationen von $\{0, 6, 0\}$ über $\{1, 4, 2\}$ nach $\{2, 2, 4\}$, d.h. mit zunehmender Krümmung, abnimmt. Die bereits aus den entsprechenden Transmissionsspektren entnommene Tatsache, dass unterhalb eines kritischen Krümmungsradius die Leitung der Elektronen stark behindert und somit die Transmission durch das System stark verringert wird, zeigt sich ebenfalls in den Kennlinien in Abb. 5.18. Für die Winkel $\alpha = 80^\circ$ und $\alpha = 90^\circ$ der Konfiguration $\{2, 2, 4\}$ ist auch für Spannungen $U \neq 0$ der Strom stärker verringert als der Trend erwarten lässt.

Des Weiteren ändert sich mit zunehmender Krümmung auch der qualitative Verlauf der Strom-Spannungs-Kennlinie. Während der Strom des linearen und der schwach gekrümmten CNTs bei $U \approx 0,5\text{ V}$ in Sättigung geht, zeigen die stark gekrümmten CNTs einen durchgehend linearen Verlauf. Die Ursache hierfür lässt sich in den Transmissionsspektren feststellen.

In Abb. 5.19 sind die Transmissionsspektren des linearen CNT für verschiedene Spannungen abgebildet. Das Plateau $T \approx 2$ in Umgebung der Fermienergie nimmt mit zunehmender Spannung an Breite ab, bis es schließlich bei $U \approx 0,8\text{ V}$ komplett verschwunden ist und

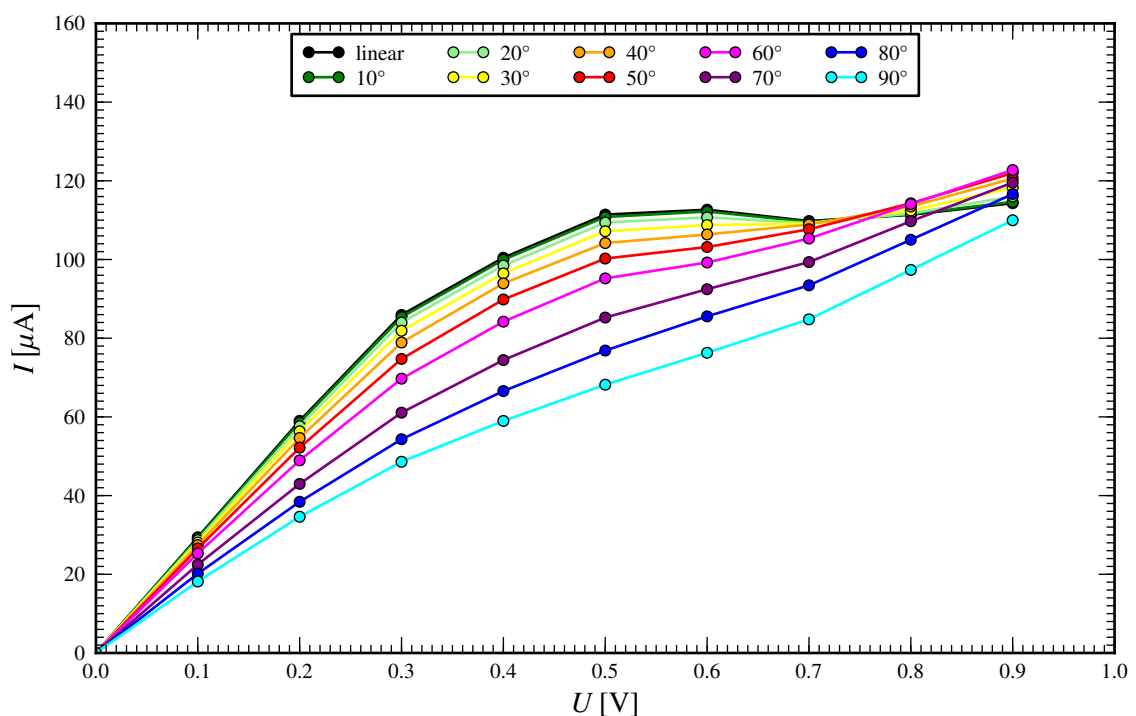


Abb. 5.16: Strom-Spannungs-Kennlinie des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für verschiedene Winkel.

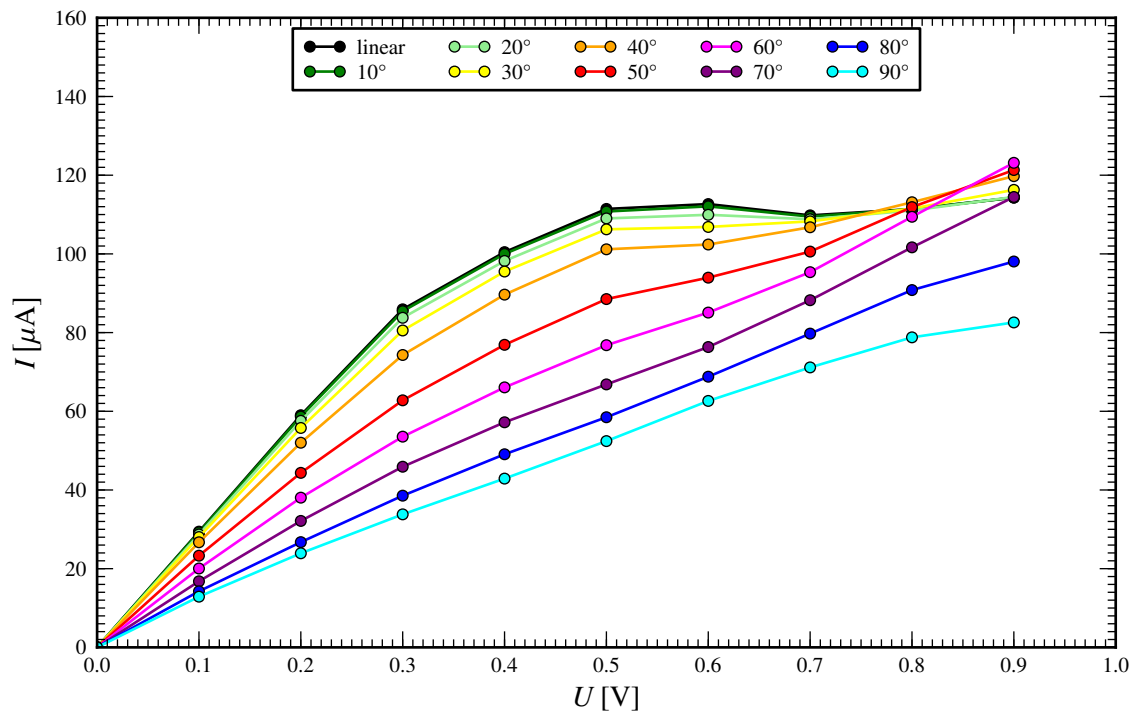


Abb. 5.17: Strom-Spannungs-Kennlinie des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{1, 4, 2\}$ für verschiedene Winkel.

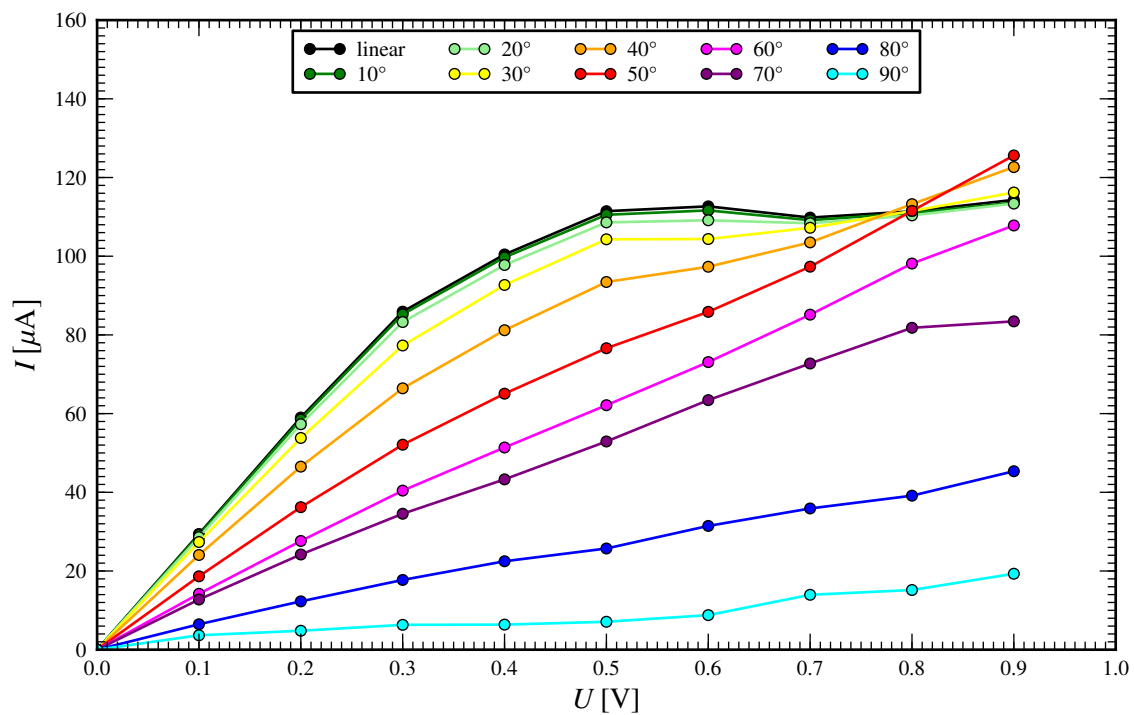


Abb. 5.18: Strom-Spannungs-Kennlinie des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{2, 2, 4\}$ für verschiedene Winkel.

die Transmission auf dem Niveau der von der Fermienergie weiter entfernten Energien bei $T \approx 2$ liegt. Für $U = 0,9$ V entsteht eine weitere Lücke, in der die Transmission auf Null abfällt und es ist zu vermuten, dass die Breite dieser Lücke mit zunehmender Spannung noch weiter wächst. Der geometrischen Deutung der Landauer-Büttiker-Formel entsprechend, ist der zur Spannung U gehörende Strom gleich der Fläche unter der Transmissionskurve $T(E, U)$ innerhalb eines um die Fermienergie symmetrischen Fensters der Breite eU . Mit steigender Spannung wird dieses Fenster linear breiter und da die Transmission in Umgebung der Fermienergie konstant ist, steigt der Strom zunächst linear an. Ab einer bestimmten Spannung überschreitet das sich vergrößernde Fenster die Grenze des Bereiches mit $T \approx 4$. Ab diesem Punkt ist der Stromzuwachs durch das breiter werdende Spannungsfenster nur noch halb so groß, da $T \approx 2$ für den zusätzlichen Bereich ist. Zusätzlich verringert sich der Strom um die Fläche, die durch das schmaler werdende Plateau verloren geht. Da das Plateau auf beiden Seiten in etwa um den halben Spannungszuwachs kleiner wird, ist die dadurch verursachte Stromabnahme gleich der Stromzunahme durch das sich verbreiternde Spannungsfenster. Der Strom bleibt somit konstant. Da das Plateau $T \approx 4$ nicht symmetrisch um die Fermienergie liegt, ergeben sich zwei verschiedene Spannungen für das Überschreiten der linken bzw. rechten Grenze. Die linke Grenze wird bei $U \approx 0,3$ V überschritten, die rechte Grenze bei $U \approx 0,5$ V. Beide Punkte sind in der Strom-Spannungs-Kennlinie zu erkennen. Der Übergang vom linearen zum konstanten Verlauf erfolgt nun in zwei Schritten. Für kleine U steigt der Strom linear an. Bei $U \approx 0,3$ V weist die Kurve einen Knick auf und steigt bis $U \approx 0,5$ V linear mit halbem Anstieg an. Bei $U \approx 0,5$ V weist die Kurve einen weiteren Knick auf und bleibt darüber hinaus konstant.

Die Transmissionsspektren des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{0,6,0\}$ mit $\alpha = 90^\circ$ sind für verschiedene Spannungen in Abb. 5.20 abgebildet. Im Gegensatz zum linearen CNT zeigt das gekrümmte CNT ein völlig anderes spannungsabhängiges Verhalten. Aufgrund der starken Krümmung ist bereits für $U = 0$ V die Transmission in Umgebung der Fermienergie bei $T \approx 2$. Für wachsende Spannungen ändert sich dies bis auf kleine Schwankungen nicht, sodass durch das breiter werdende Integrationsfenster der Strom linear mit der Spannung ansteigt.

5.3.2 Einfluss von Krümmung und Kreuzung durch Differenzbildung

Der Einfluss der Krümmung und der Kreuzungsregion auf den Stromfluss lässt sich durch Betrachten der Differenzen der einzelnen Strom-Spannungs-Kennlinien herausarbeiten. Als Beispiel sind die Kennlinien der Konfiguration $\{0,6,0\}$ für $\alpha = 30^\circ$ in Abb. 5.21 gezeigt. Dabei ist das lineare CNT schwarz, das einzelne, gekrümmte CNT blau und das Gesamtsystem grün dargestellt. Die Stromänderung, welche durch die Krümmung verursacht wird (orange dargestellt) ist gegeben durch die Differenz von linearem und gerümmtem CNT. Die durch die Kreuzungsregion verursachte Stromänderung (rot dargestellt) ist durch die Differenz von Gesamtsystem und der Summe der beiden Einzelsysteme (linear und gekrümmt) gegeben.

$$\Delta I_l = I_{kr} - I_{lin} \quad (5.9)$$

$$\Delta I_\times = I_{tot} - (I_{kr} + I_{lin}) \quad (5.10)$$

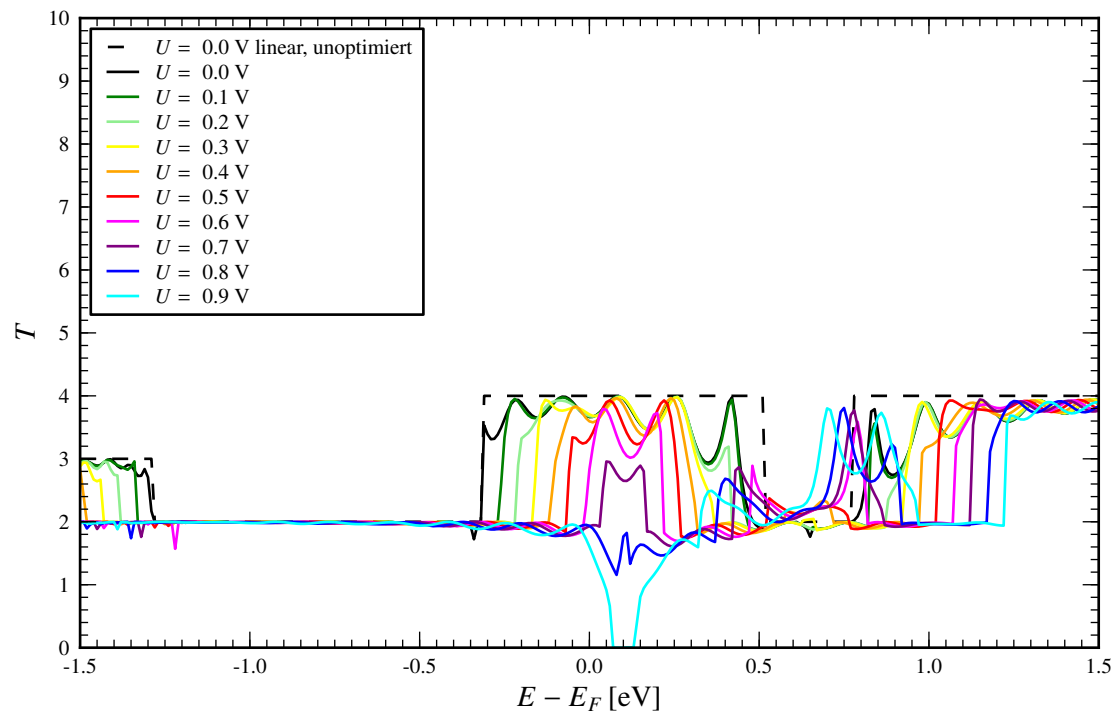


Abb. 5.19: Transmissionsspektren des linearen CNT für verschiedene Spannungen.

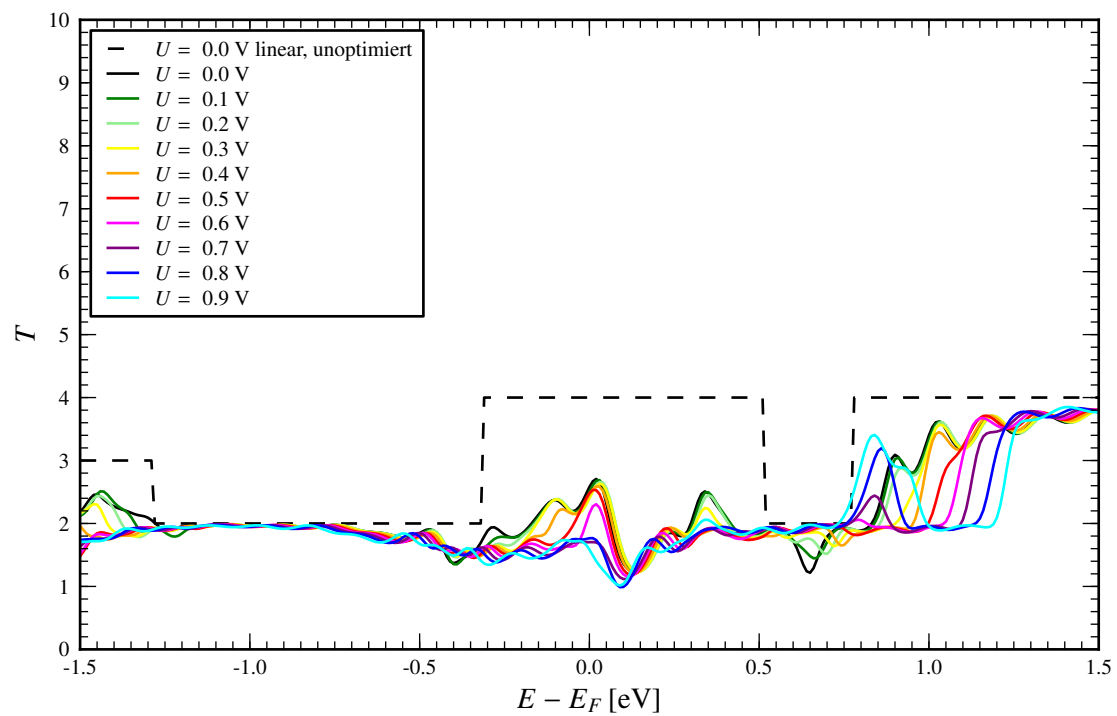


Abb. 5.20: Transmissionsspektren des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für verschiedene Spannungen für $\alpha = 90^\circ$.

Um quantitative Aussagen zu treffen und die beiden Effekte miteinander vergleichen zu können, empfiehlt sich eine Normierung auf die unbeeinflusste Geometrie.

$$\left(\frac{\Delta I}{I}\right)_\gamma = \frac{I_{kr} - I_{lin}}{I_{lin}} \quad (5.11)$$

$$\left(\frac{\Delta I}{I}\right)_\times = \frac{I_{tot} - (I_{lin} + I_{kr})}{I_{lin} + I_{kr}} \quad (5.12)$$

Abb. 5.22, 5.23 und 5.24 zeigen die Differenzkurven des Krümmungseffektes für verschiedene Winkel α jeweils für die Konfigurationen $\{0,6,0\}$, $\{1,4,2\}$ und $\{2,2,4\}$. Dabei zeigt sich stets der gleiche qualitative Verlauf. Der relative Stromverlust bleibt bis zu einer gewissen Spannung, bei kleinen Krümmungen etwa $U \approx 0,5\text{ V}$, bei großen Krümmungen etwa $U \approx 0,3\text{ V}$, konstant und nimmt darüber hinaus ab. Weiterhin zeigt sich wieder, dass sowohl mit zunehmendem Winkel α als auch durch Erhöhung der Krümmung durch die verschiedenen Konfigurationen der Stromverlust zunimmt. Der zudem verstärkte Stromverlust beim unterschreiten eines kritischen Krümmungsradius ist ebenfalls sichtbar.

Abb. 5.25, 5.26 und 5.27 zeigen die Differenzkurven des Kreuzungseffektes für verschiedene Winkel α jeweils für die Konfigurationen $\{0,6,0\}$, $\{1,4,2\}$ und $\{2,2,4\}$. Ein für alle Parameter durchgehend quantitativ schlüssiges Verhalten lässt sich nicht ableiten. Dies ist damit zu begründen, dass der Effekt sehr sensitiv auf den Abstand reagiert und somit mit Variation des Winkels zufällig zwei Atome direkt übereinander oder verschieden stark versetzt stehen können. Der Verlauf ist nur recht grob interpretierbar und liefert, vorrangig bezüglich der kleineren Krümmungen von Konfiguration $\{0,6,0\}$, die folgenden qualitativen Aussagen:

- Der Verlauf ist zweigeteilt. Bei kleinen Spannungen nimmt der Effekt (Stromverlust durch Geometrieänderung) mit wachsender Spannung zu, für große Spannungen jedoch mit wachsender Spannung wieder ab. Es gibt somit eine Spannung, bei dem der Effekt, d.h. der Stromverlust, maximal ist und der Kurvenverlauf ein Minimum aufweist.
- Das Minimum im Kurvenverlauf verschiebt sich mit zunehmendem Winkel zu höheren Spannungen. Für die Konfiguration $\{0,6,0\}$ liegt es für $\alpha = 10^\circ$ bis $\alpha = 40^\circ$ bei $U = 0,3\text{ V}$, für $\alpha = 50^\circ$ bis $\alpha = 70^\circ$ bei $U = 0,4\text{ V}$ und für $\alpha = 80^\circ$ und $\alpha = 90^\circ$ bei $U = 0,5\text{ V}$.
- Der Anstieg der Kurve im Intervall vor dem Minimum variiert. Für kleine Winkel ist er negativ, steigt mit zunehmendem Winkel an, hat sein Maximum bei etwa $\alpha = 50^\circ$ und fällt für wachsende Winkel anschließend wieder.
- Bei zu großen Krümmungen verschwindet der Effekt auch bei kleinen Spannungen.

Eine generelle quantitative Abschätzung des Effektes lässt sich wie folgt treffen: Für kleine Winkel und kleine Spannungen liegt der Stromverlust bei 8% bis 16%. Für größere Spannungen nimmt er linear ab und verschwindet bei $U \approx 0,9\text{ V}$. Im Vergleich mit dem Krümmungseffekt (Abb. 5.22) lässt sich demnach grob zusammenfassen, dass der Kreuzungseffekt bei Winkeln bis $\alpha \approx 50^\circ$ dominiert und der Krümmungseffekt darüber hinaus.

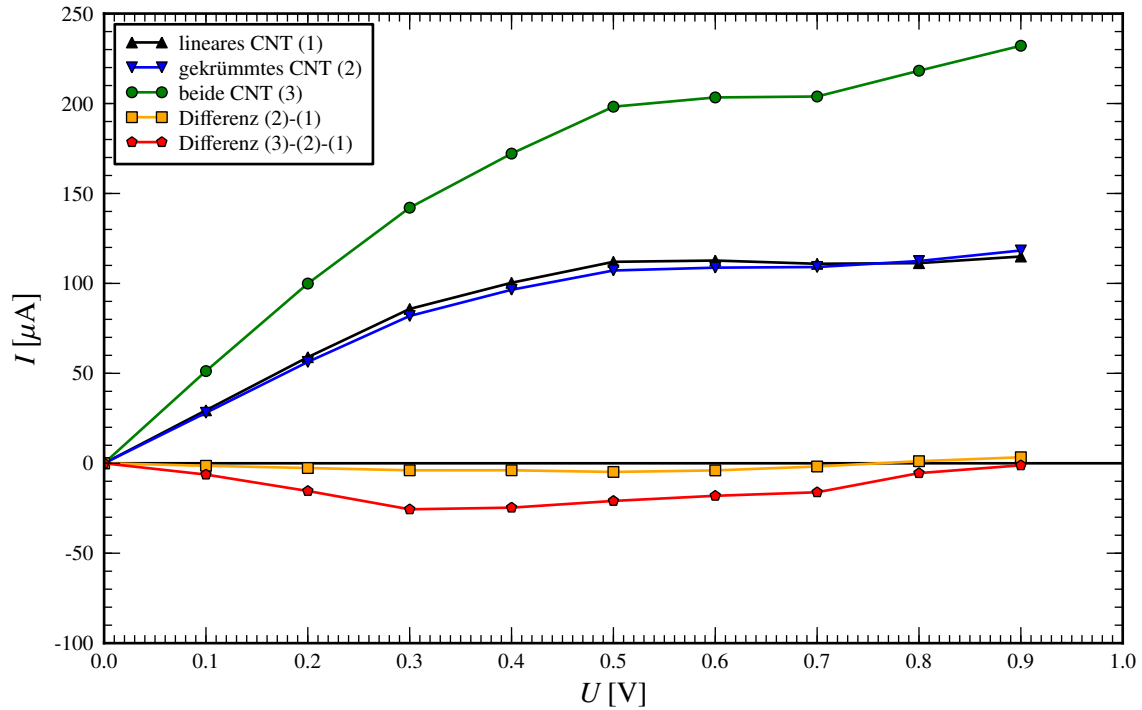


Abb. 5.21: Strom-Spannungs-Kennlinien der Konfiguration $\{0,6,0\}$ für $\alpha = 30^\circ$. Gezeigt ist das lineare CNT (1, schwarz), das gekrümmte CNT (2, blau) und das Gesamtsystem (3, grün) sowie die Differenzen für den Krümmungseffekt (2-1, orange) und den Kreuzungseffekt (3-2-1, rot).

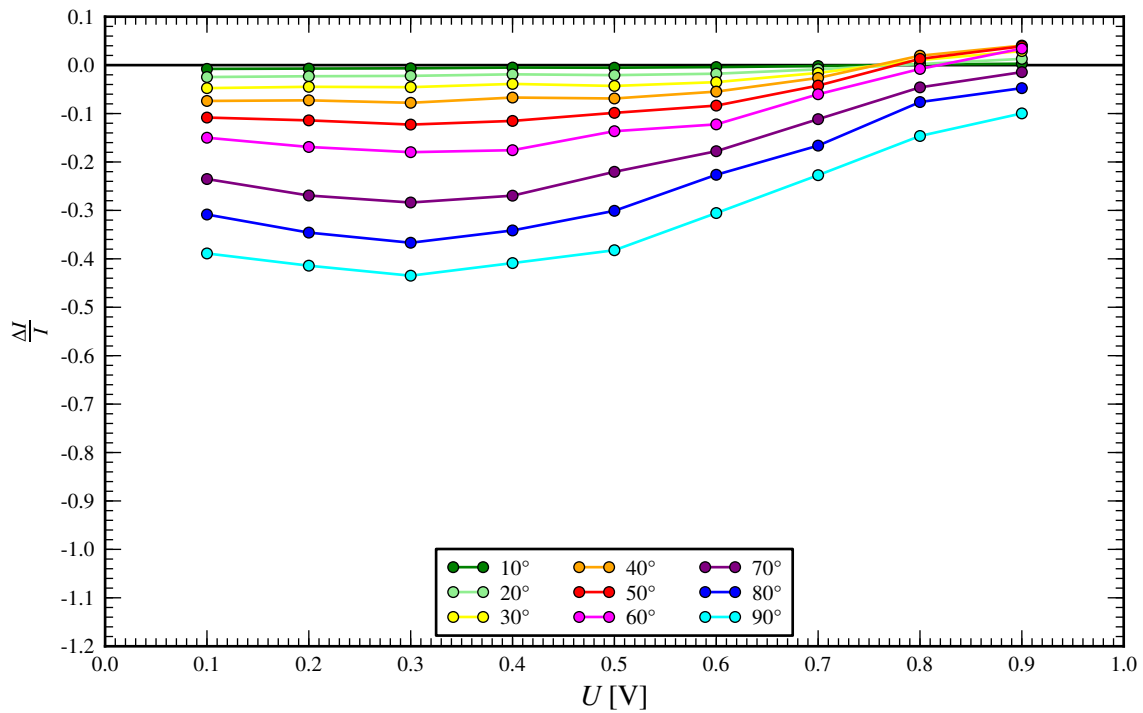


Abb. 5.22: Relative Änderung der Strom-Spannungs-Kennlinie durch den Krümmungseffekt:

$$\left(\frac{\Delta I}{I}\right)_l = \frac{I_{kr} - I_{lin}}{I_{lin}} \text{ für das CNT der Konfiguration } \{0,6,0\} \text{ für verschiedene Winkel.}$$

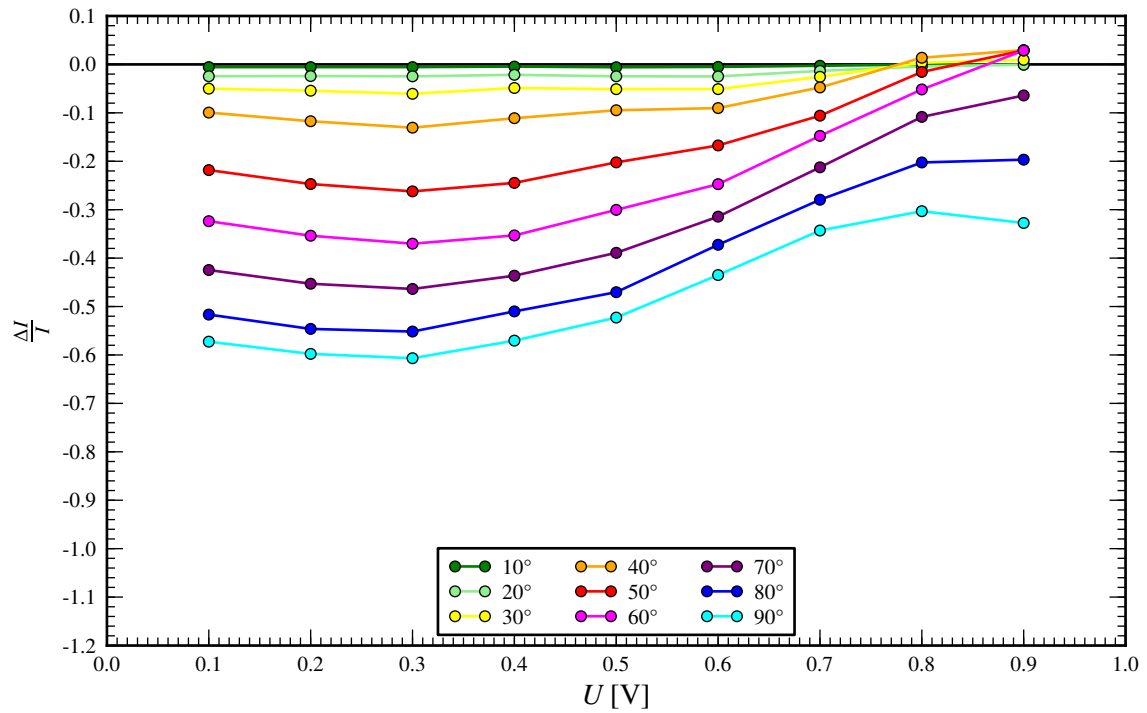


Abb. 5.23: Relative Änderung der Strom-Spannungs-Kennlinie durch den Krümmungseffekt:

$$\left(\frac{\Delta I}{I}\right)_l = \frac{I_{kr} - I_{lin}}{I_{lin}} \text{ für das CNT der Konfiguration } \{1,4,2\} \text{ für verschiedene Winkel.}$$

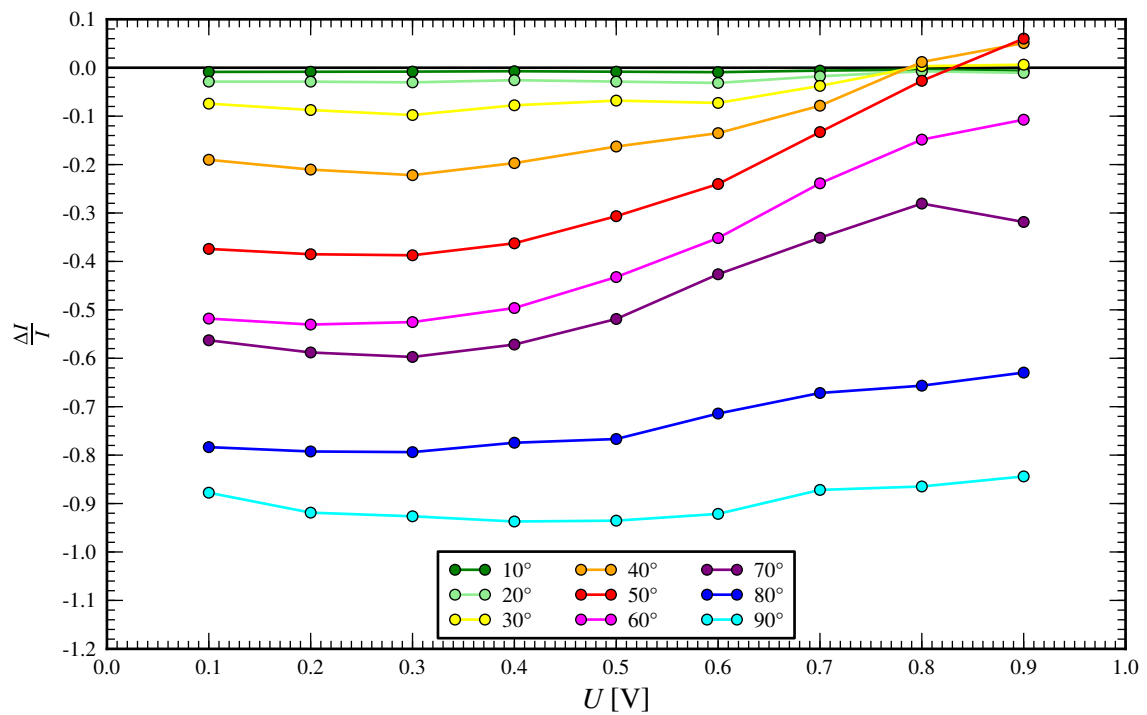


Abb. 5.24: Relative Änderung der Strom-Spannungs-Kennlinie durch den Krümmungseffekt:

$$\left(\frac{\Delta I}{I}\right)_l = \frac{I_{kr} - I_{lin}}{I_{lin}} \text{ für das CNT der Konfiguration } \{2,2,4\} \text{ für verschiedene Winkel.}$$

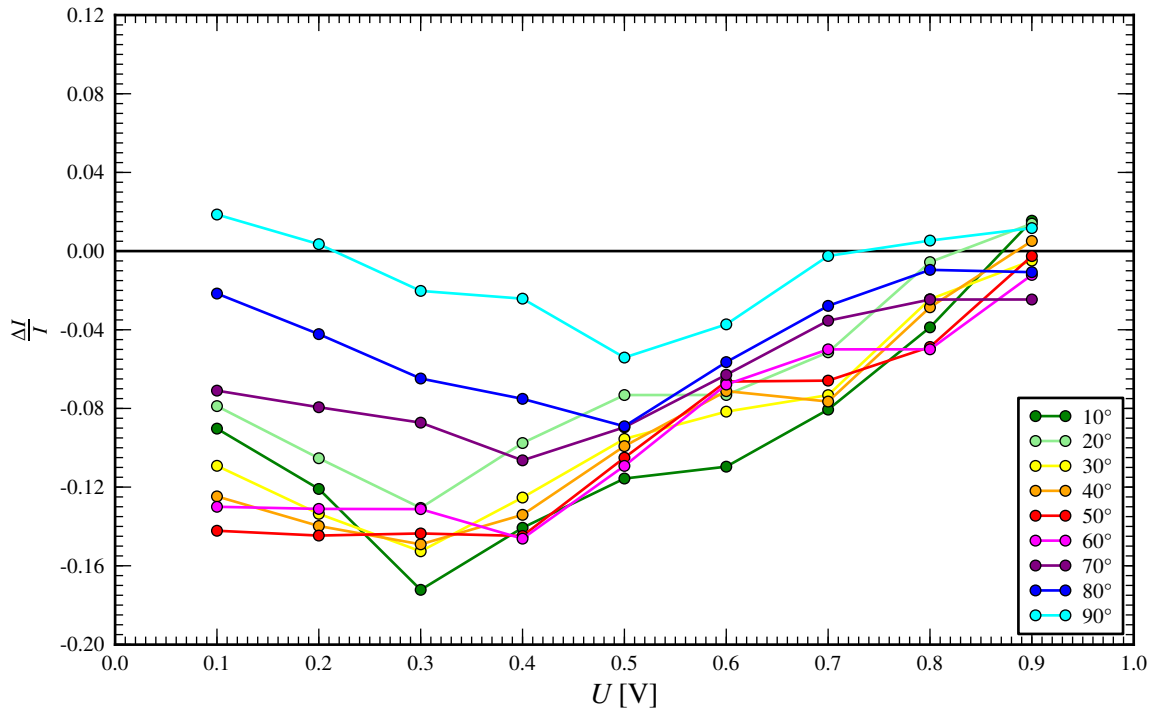


Abb. 5.25: Relative Änderung der Strom-Spannungs-Kennlinie durch den Kreuzungseffekt:

$$\left(\frac{\Delta I}{I}\right)_{\times} = \frac{I_{tot} - (I_{lin} + I_{kr})}{I_{lin} + I_{kr}} \text{ für das CNT der Konfiguration } \{0,6,0\} \text{ für verschiedene Winkel.}$$

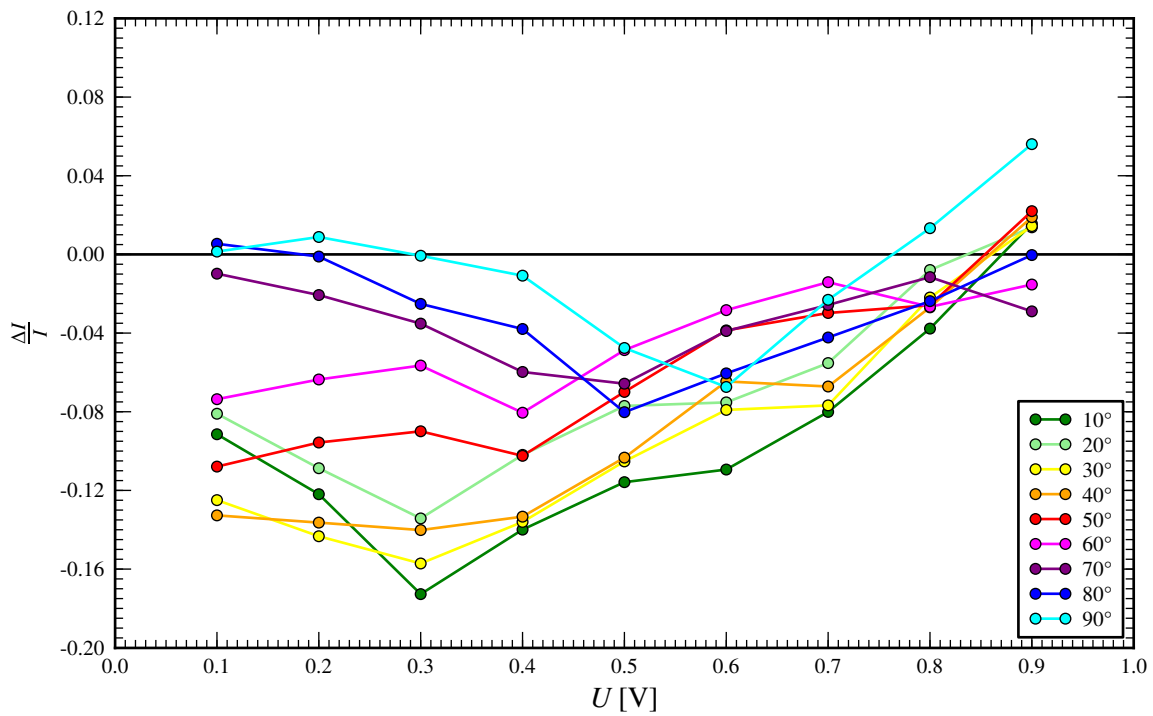


Abb. 5.26: Relative Änderung der Strom-Spannungs-Kennlinie durch den Kreuzungseffekt:

$$\left(\frac{\Delta I}{I}\right)_{\times} = \frac{I_{tot} - (I_{lin} + I_{kr})}{I_{lin} + I_{kr}} \text{ für das CNT der Konfiguration } \{1,4,2\} \text{ für verschiedene Winkel.}$$

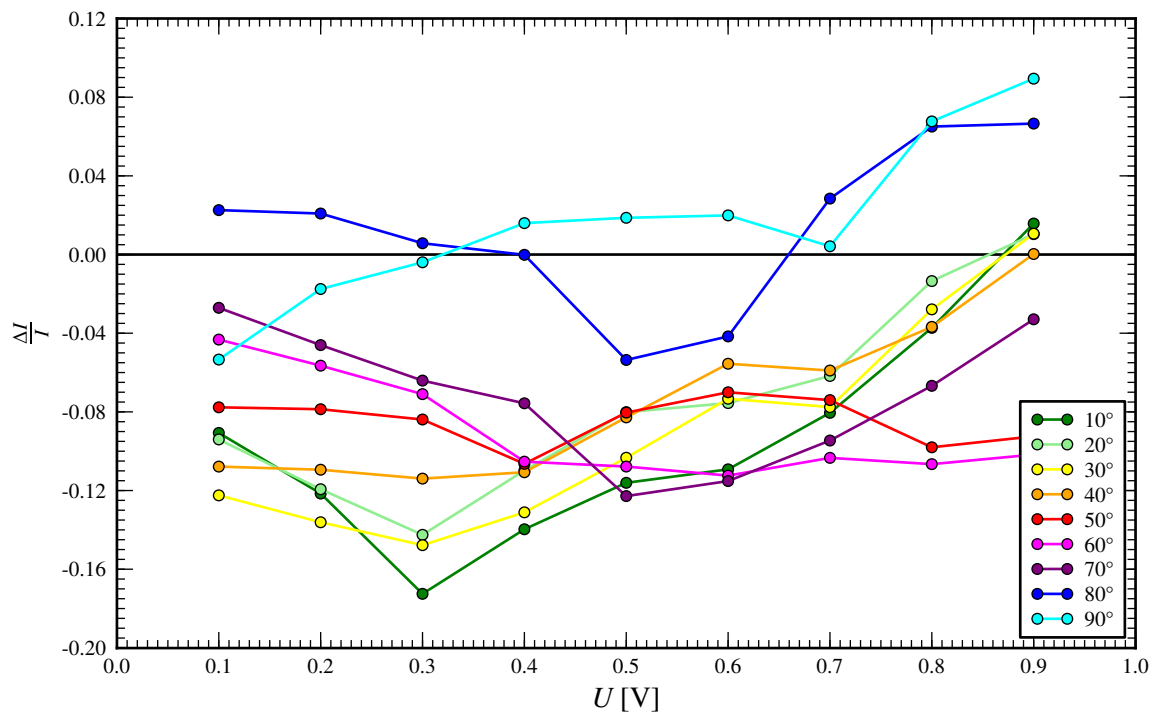


Abb. 5.27: Relative Änderung der Strom-Spannungs-Kennlinie durch den Kreuzungseffekt:

$$\left(\frac{\Delta I}{I}\right)_{\times} = \frac{I_{tot} - (I_{lin} + I_{kr})}{I_{lin} + I_{kr}} \text{ für das CNT der Konfiguration } \{2, 2, 4\} \text{ für verschiedene Winkel.}$$

5.4 Unterbrochenes System

Der Einfluss der Kreuzungsregion geschieht neben der bereits untersuchten Abschwächung des Stromflusses auch in die entgegengesetzte Richtung. Für zwei nicht zusammenhängende Elektroden kann es durch die Kreuzungsregion zum Stromfluss zwischen zwei benachbarten, aber voneinander getrennten CNTs kommen. Als Beispiel wurde das zusammengesetzte System der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ und dem Kreuzungswinkel $\alpha = 90^\circ$ berechnet. Dabei wurde die rechte Elektrode (zuzüglich Elektrodenkopie und Abstandshalter) des linearen und die linke Elektrode (zuzüglich Elektrodenkopie und Abstandshalter) des gekrümmten CNTs entfernt. Die Elektronendichte in der yz -Ebene ist in Abb. 5.28 dargestellt. Die Geometrieänderung und die offenen Enden sind dabei erkennbar. Durch die Geometrieoptimierung ist das offene Ende des gekrümmten CNTs in ein Kräfteminimum relaxiert und somit annähernd linear geworden. Die Krümmung in der unteren Hälfte hat sich ebenfalls etwas verringert, wodurch der Kreuzungswinkel kleiner geworden ist. Jedoch scheint die Wechselwirkung mit dem benachbarten linearen CNT stark genug zu sein, um das gekrümmte CNT daran haften und sich nicht vollständig entkrümmen zu lassen. In der Realität sind zwar keine offenen Enden anzutreffen, sondern stets mit Wasserstoff abgesättigte oder fullerenartig abgerundete Enden, da sich diese jedoch nicht in der für die Leitung relevanten Region befinden und einen geringen Einfluss haben sollten, wurde auf diesen zusätzlichen Aufwand verzichtet.

Abb. 5.29 zeigt die Zustandsdichte des unterbrochenen Systems. Im Vergleich mit Abb. 5.7 zeigt sich, dass das Plateau im Energieintervall $-1,1 \text{ eV} < E - E_F < -0,4 \text{ eV}$ bis auf eine kleine Welligkeit erhalten bleibt. Die Van-Hoove-Singularitäten und der gesamte restliche Verlauf im dargestellten Bereich weicht hingegen einem stärker und unsystematisch schwankendem Verhalten.

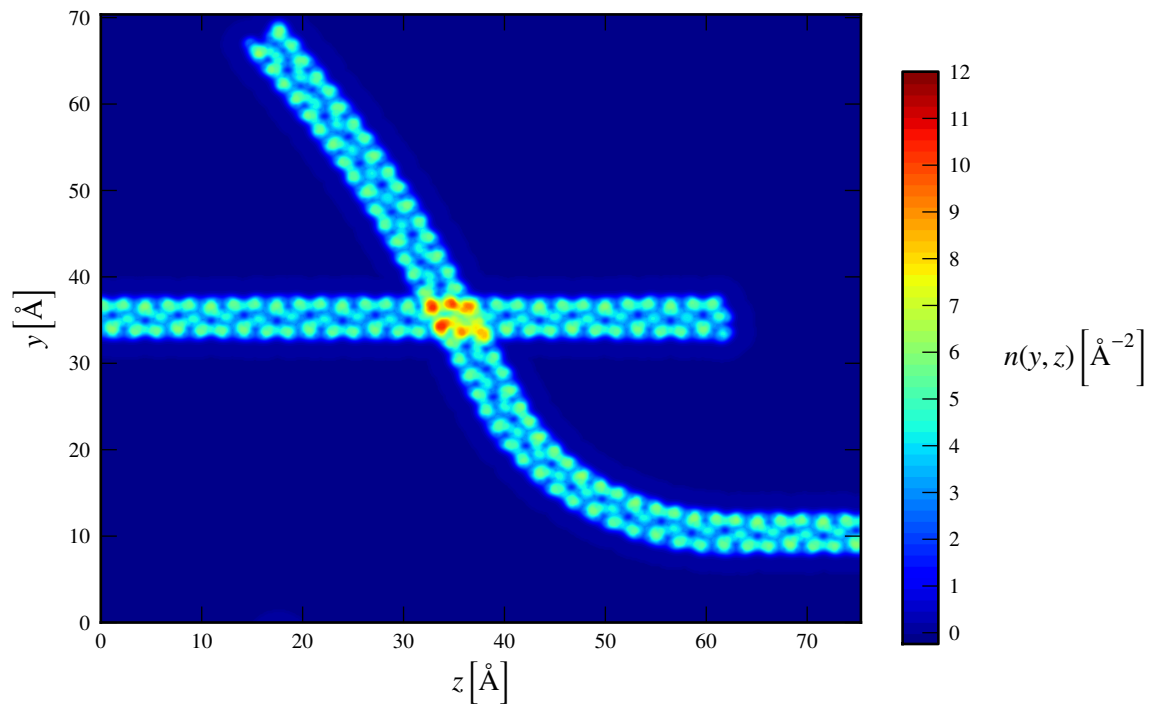


Abb. 5.28: Elektronendichte des unterbrochenen Systems.

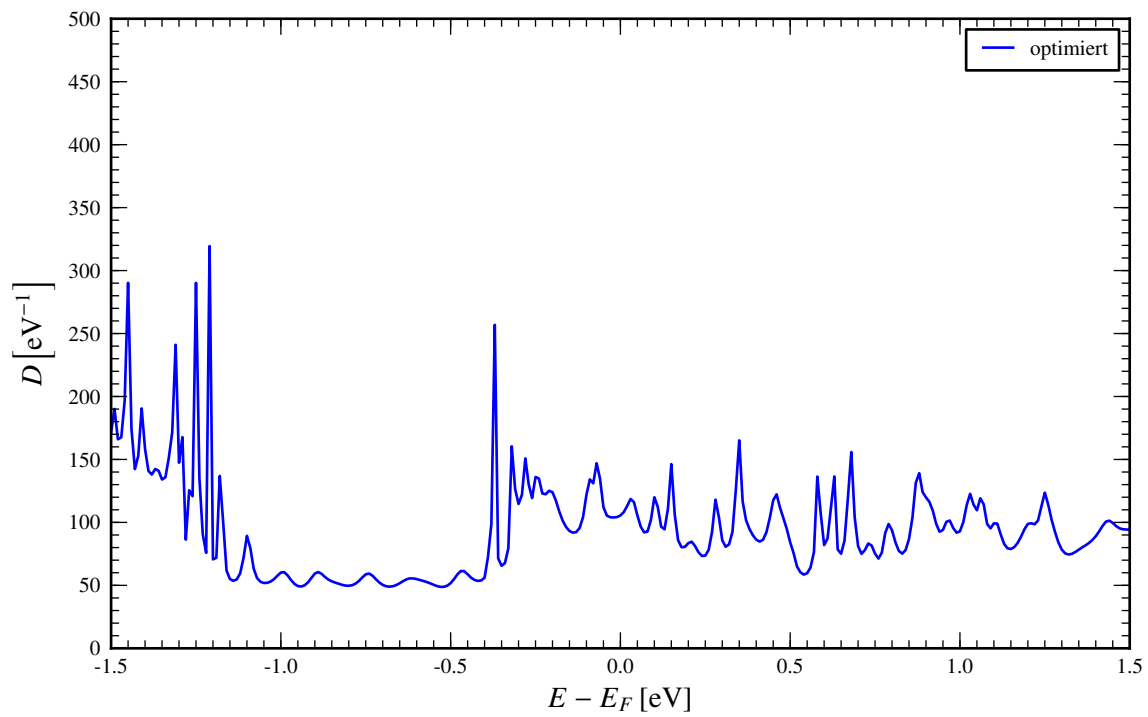


Abb. 5.29: Zustandsdichte des unterbrochenen Systems.

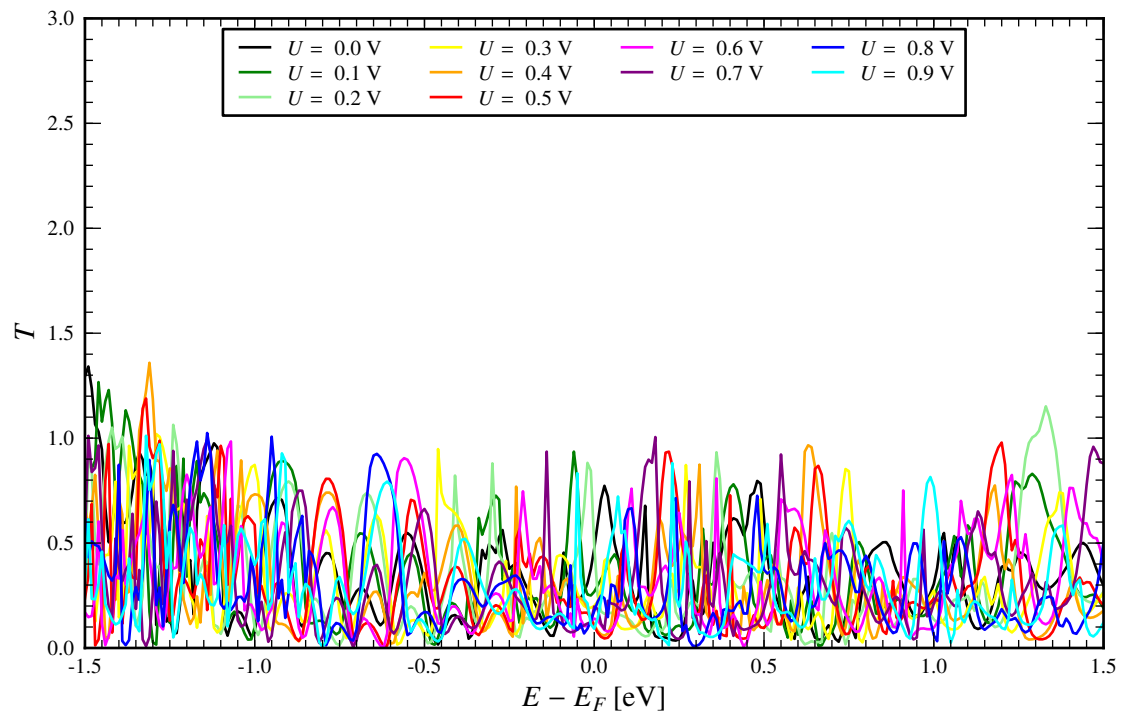


Abb. 5.30: Transmissionsspektrum des unterbrochenen Systems.

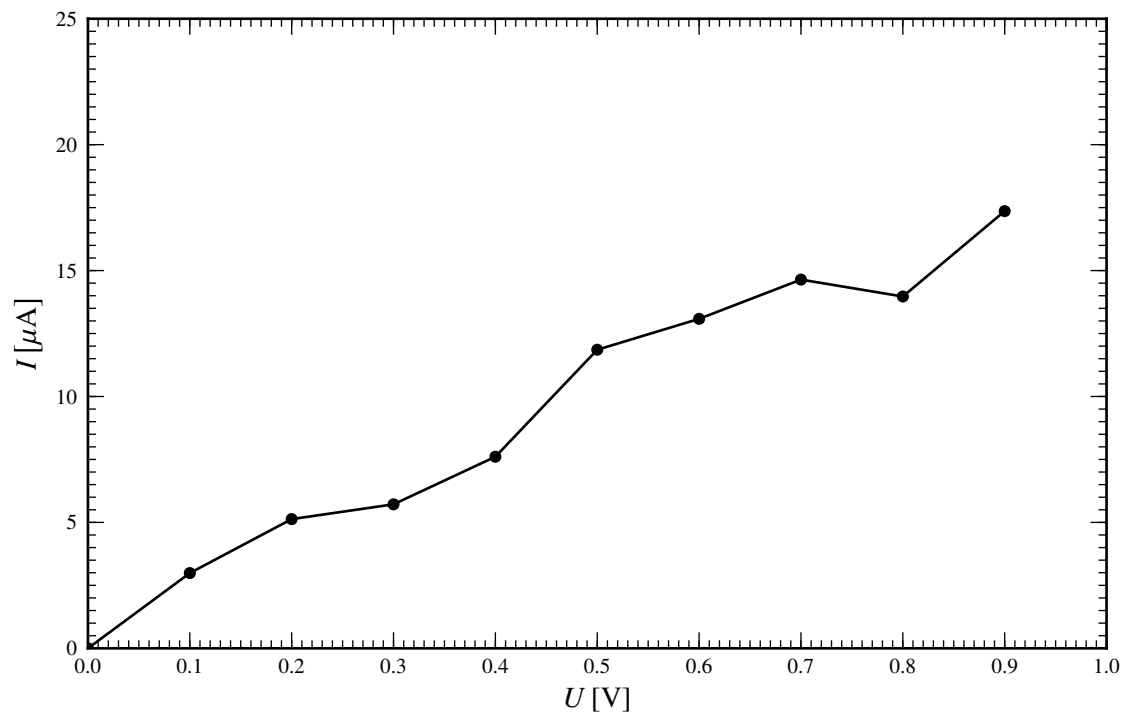


Abb. 5.31: Strom-Spannungs-Kennlinie des unterbrochenen Systems.

In Abb. 5.30 sind die Transmissionsspektren des unterbrochenen Systems für Spannungen von 0,0 V bis 0,9 V abgebildet. Im Vergleich zum verbundenen System, siehe Abb. 5.12, ist die Transmission bei allen Energien wie erwartet stark vermindert. Jedoch ist diese nie über einen größeren Bereich Null, sondern schwankt energie- und spannungsabhängig im Bereich $0 < T < 1$. Dadurch ist bei angelegter Spannung ein geringer Stromfluss zu erwarten, welcher in den unterbrochenen Einzelsystemen nicht fließen würde und auf eine Wechselwirkung zwischen beiden CNTs und Tunneleffekte in der Kreuzungsregion zurückzuführen ist. Die zugehörige Strom-Spannungs-Kennlinie ist in Abb. 5.31 gezeigt. Der Verlauf ist in etwa linear, da das Transmissionsspektrum keine wesentlichen Änderungen aufweist. Durch die Oszillationen verursacht, gibt es allerdings kleine Schwankungen im Kurvenanstieg, wodurch die Kurve um ihr linear verlaufendes gleitendes Mittel schwankt. Vergleicht man die Werte mit dem nicht unterbrochenen System, d.h. der grünen Kurve in Abb. 5.21, so lässt sich für $U = 0,9$ V (dort besteht kaum eine Abhängigkeit des Stromflusses vom Kontaktwinkel, siehe Abb. 5.16) der Stromfluss im unterbrochenen System auf etwa 7% des Stromflusses des verbundenen Systems abschätzen.

Als Vergleich soll hier der Tunnelstrom I_T durch eine konstante Potentialbarriere der Höhe V_B und der Länge l_B dienen. Unter der Näherung kleiner Spannungen ergibt sich eine Stromdichte von [11]

$$J_T = \frac{e^2}{h} \cdot \frac{1}{l_B} \sqrt{\frac{2m_e V_B}{h^2}} e^{-2 \cdot l_B \sqrt{\frac{2m_e V_B}{h^2}}} \cdot U \quad (5.13)$$

Der entsprechende Tunnelstrom ergibt sich mittels $I_T = J_T \cdot A$, wobei A die stromdurchflossene Fläche bezeichnet. Die Länge der Potentialbarriere sollte kleiner als der CNT-Abstand von 3 Å sein, kann jedoch schwer abgeschätzt werden. Eine effektive Barrierelänge wird daher mit obiger Formel ermittelt. Die Fläche A kann aus Abb. 5.28 abgelesen werden und beträgt etwa $A = 5 \text{ Å} \cdot 4 \text{ Å} = 20 \text{ Å}^2$. Eine Barrierenhöhe ist schwer abschätzbar. Dazu müsste die Ionisierungsenergie berechnet werden. Als sehr grobe Abschätzung soll hier die Austrittsarbeit von atomarem Kohlenstoff $V_B = W_A^{(C)} = 4,81 \text{ eV}$ genügen [12]. Da die Elektronen nicht aus dem Material ins Vakuum entfernt werden müssen, um auf das jeweils andere CNT zu gelangen, ist die effektive zu überwindende Barrierenhöhe eigentlich geringer, bessere Werte sind jedoch nicht verfügbar. Bei der Spannung $U = 0,1$ V ergab die Simulation (Abb. 5.31) einen Tunnelstrom von $I_T = 3,0 \text{ µA}$. Löst man mit diesen Schätzwerten obige Gleichung, so ergibt sich für die Barrierelänge ein effektiver Wert von $l_B = 2,14 \text{ Å}$. Dies ist etwas kleiner als der CNT-Abstand und somit ein plausibler Wert.

5.5 Halbleitendes System

Im folgenden seien noch (in weniger umfassendem Maße) die elektronischen und Transporteigenschaften eines halbleitenden Systems angeführt. Dazu wurde ein aus (4,2)-CNTs (65 Atome pro Einheitszelle) bestehendes System mit kleiner Bandlücke (eigene Rechnung: $E_B = 0,18 \text{ eV}$) in der Konfiguration $\{0, 1, 0\}$ und ein aus (7,0)-CNTs (28 Atome pro Einheitszelle) bestehendes System mit größerer Bandlücke (eigene Rechnung: $E_B = 0,45 \text{ eV}$) in der Konfiguration $\{0, 5, 0\}$ berechnet.

Abb. 5.32 und 5.33 zeigen die mittels Gaußverbreiterung geglätteten Zustandsdichten des optimierten gekrümmten (4,2)-CNTs und des optimierten (4,2)-CNT-Gesamtsystems. Im Vergleich mit Abb. 5.6 und 5.7 zeigt sich das gleiche Verhalten. Es ist kein signifikanter Unterschied in qualitativen Verhalten festzustellen. Die Bandlücke bleibt unverändert (die

abfallenden Ausläufer sind dabei lediglich Artefakte der Gaußverbreiterung). Gleiches gilt für die Zustandsdichten der Systeme aus (7,0)-CNTs in Abb. 5.34 und 5.35.

Abb. 5.36 und 5.37 zeigen die mittels Gaußverbreiterung geglätteten Transmissionsspektren des optimierten gekrümmten (4,2)-CNTs und des optimierten (4,2)-CNT-Gesamtsystems. Im Vergleich mit Abb. 5.9 und 5.12 zeigt sich, dass hier mit Zunahme des Kontaktwinkels α und somit mit Zunahme der Krümmung die Transmission im gesamten Energiebereich abfällt, im Gegensatz zum metallischen (4,1)-System, bei dem dies nur in einem 0,8 eV breiten Energiebereich um die Fermienergie auftrat. Auch geschieht diese Verminderung wesentlich stärker, sodass beim gekrümmten CNT bereits bei $\alpha = 60^\circ$ (der entsprechende Krümmungsradius beträgt etwa 11 Å) die Transmission im Mittel auf die Hälfte reduziert ist. Gleiches gilt für die Transmissionsspektren der Systeme aus (7,0)-CNTs in Abb. 5.38 und 5.39.

Abb. 5.40, 5.41 und 5.42 zeigten die Differenz der integrierten Elektronendichten des (4,2)-Systems in der Seitenansicht, Frontansicht und Draufsicht. Da im Gegensatz zum metallischen System (siehe Abb. 5.13, 5.14 und 5.15), bei dem der Effekt mit abnehmendem Winkel zunimmt, dieser hier mit zunehmendem Winkel zunimmt, ist beispielhaft $\alpha = 90^\circ$ gewählt. Die schwarzen Punkte markieren wieder die Atompositionen. Der Versatz zwischen den Atompositionen in der xy -Ansicht zeigt, dass hier die Optimierung zu einer stärkeren Verschiebung geführt hat, d.h. das halbleitende System ist in der idealen Konfiguration offenbar weniger stabil als das metallische System. Wie erwartet ist die periodische Erhöhung der Elektronendichte des metallischen Systems im halbleitenden System nicht vorhanden. Es bildet sich sogar eine starke Verminderung derer (blaue Bereiche) in der Kreuzungsregion an der dem linearen CNT zugewandten Seite des gekrümmten CNTs aus (in der yz -Ansicht sind dies diejenigen Bereiche in der Innenseite der gekrümmten Abschnitte). Weiterhin ist auch an der abgewandten Seite eine Verminderung der Elektronendichte vorhanden (siehe xy - und xz -Ansicht). Demzufolge ist diese innerhalb des gekrümmten CNTs stark erhöht. Bei den parallelen Abschnitten, ist im Verhältnis zur Kreuzungsregion keine wesentliche Änderung erkennbar. Des Weiteren ist der Effekt im Vergleich zum metallischen System wesentlich größer. Man beachte die um einen Faktor 1750 bzw. 2333 größere Farbachse der xz - bzw. yz -Ansicht.

Abb. 5.43, 5.44 und 5.45 zeigen die entsprechenden Differenzen der integrierten Elektronendichten des (7,0)-Systems. Zu bemerken ist, dass für $\alpha = 60^\circ$ und größere Kreuzungswinkel das gekrümmte CNT durch die Optimierung in den Innenseiten eingeknickt und stellenweise aufgebrochen ist, obwohl der Krümmungsradius zirka um einen Faktor 3 größer ist als der des (4,2)-Systems. Daher wurde beispielhaft das System mit $\alpha = 50^\circ$ abgebildet. Während das gekrümmte, chirale (4,2)-System in der Kreuzungsregion nur leicht und in den Darstellungen kaum erkennbar eingedrückt wurde, ist dies beim gekrümmten, nicht chiralen (7,0)-System in wesentlich stärkerem Maße erfolgt. Beide Tatsachen deuten darauf hin, dass chirale CNTs stabiler gegenüber äußeren Einflüssen sind als Zick-Zack-CNTs. Ursache dafür ist vermutlich, dass in der hier verwendeten Geometrie ein Drittel der Bindungen der Zick-Zack-CNTs parallel zur gekrümmten Achse liegen und somit bei gegebenem Krümmungsradius maximal gestreckt bzw. gestaucht werden. Vermutlich sind in dieser Hinsicht die Sesselform-CNTs durch die Bindungen senkrecht zur gekrümmten Achse am stabilsten. Die yz -Ansicht zeigt, dass sich, wie auch beim (4,2)-System, durch die Krümmung ebenfalls die Elektronendichte von der Innenseite des gekrümmten Abschnittes zur Außenseite verschiebt, die Verminderung jedoch nicht in den Kreuzungsbereich hineinragt, da keine dementsprechenden Auffälligkeiten in der xy - und xz -Ansicht vorhanden sind. Die geringen Änderungen in der xz -Ansicht und die recht starken Verminderungen bzw. Erhöhungen in der xy -Ansicht kommen dabei lediglich durch die Integration

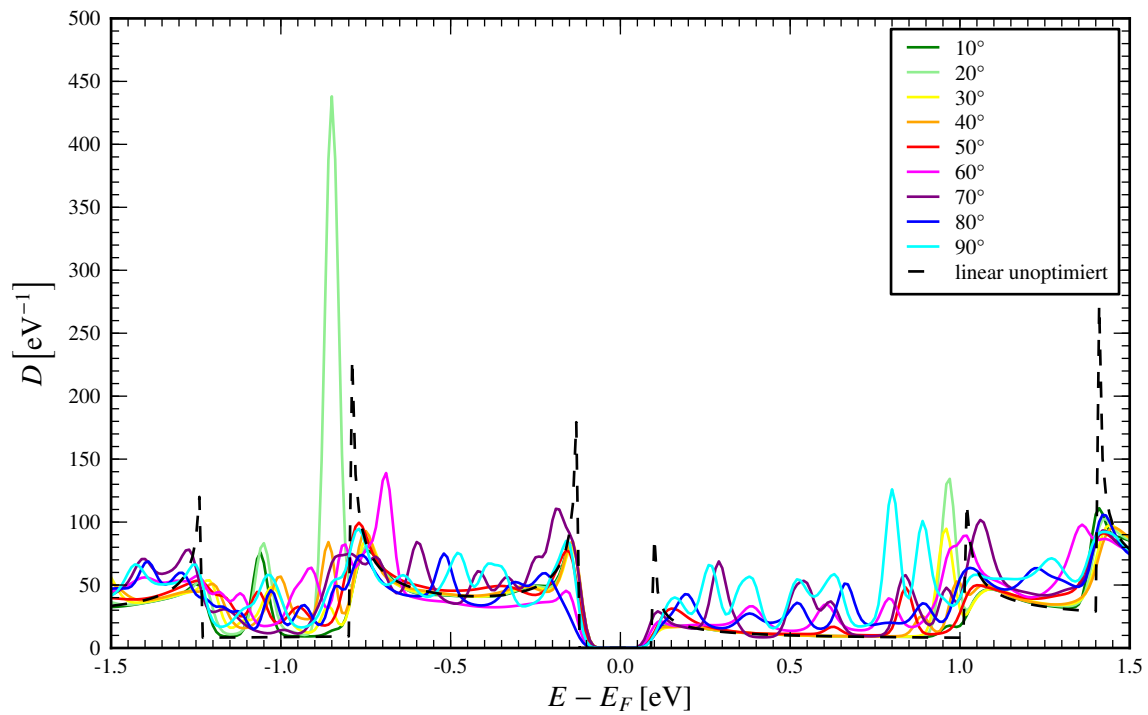


Abb. 5.32: Gaußverbreiterte Zustandsdichte $D(E)$ des gekrümmten (4,2)-CNTs.

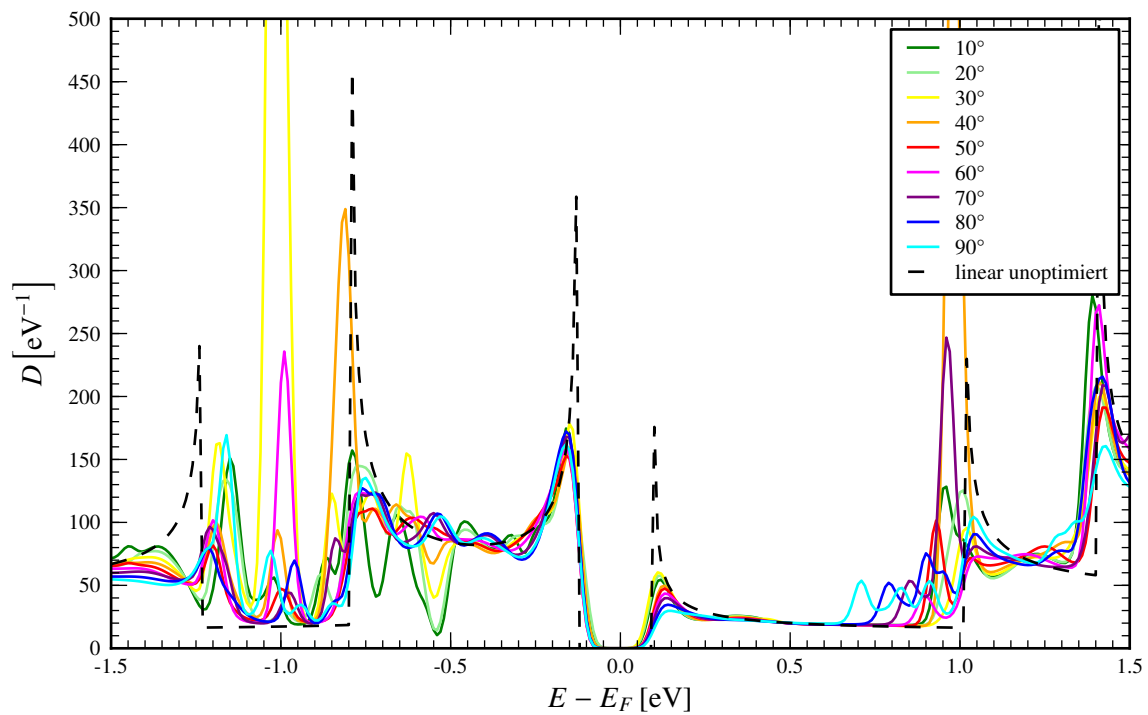


Abb. 5.33: Gaußverbreiterte Zustandsdichte $D(E)$ des Gesamtsystems aus (4,2)-CNTs.

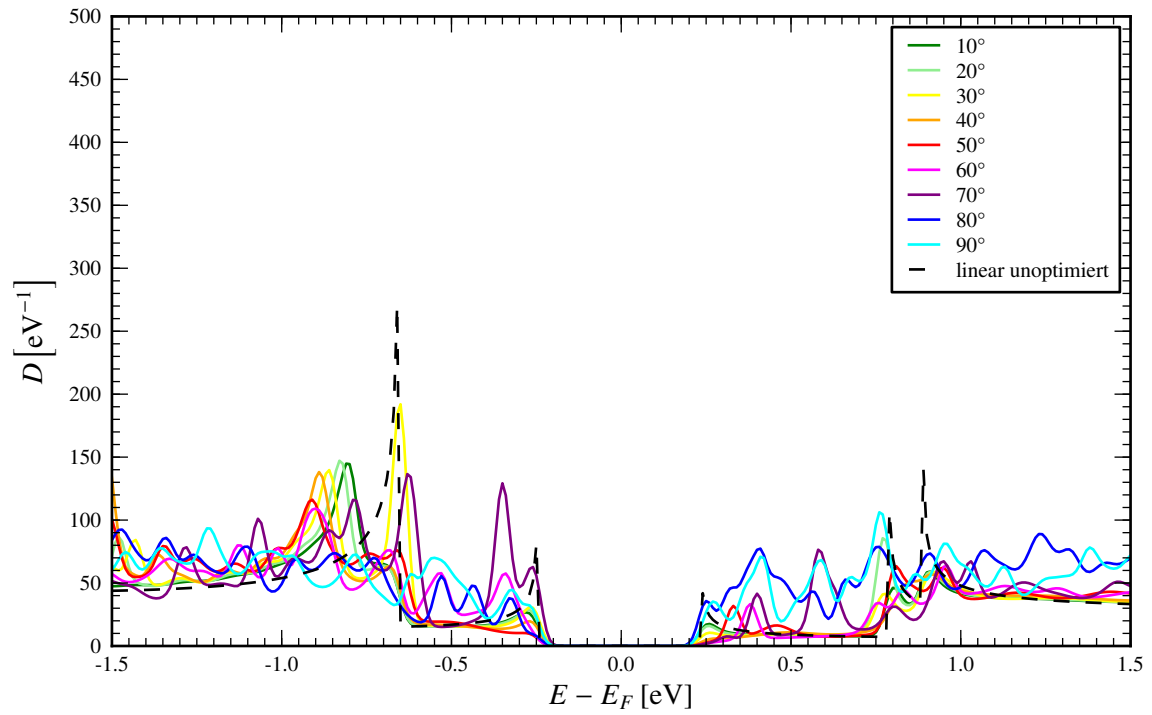


Abb. 5.34: Gaußverbreiterte Zustandsdichte $D(E)$ des gekrümmten (7,0)-CNTs.

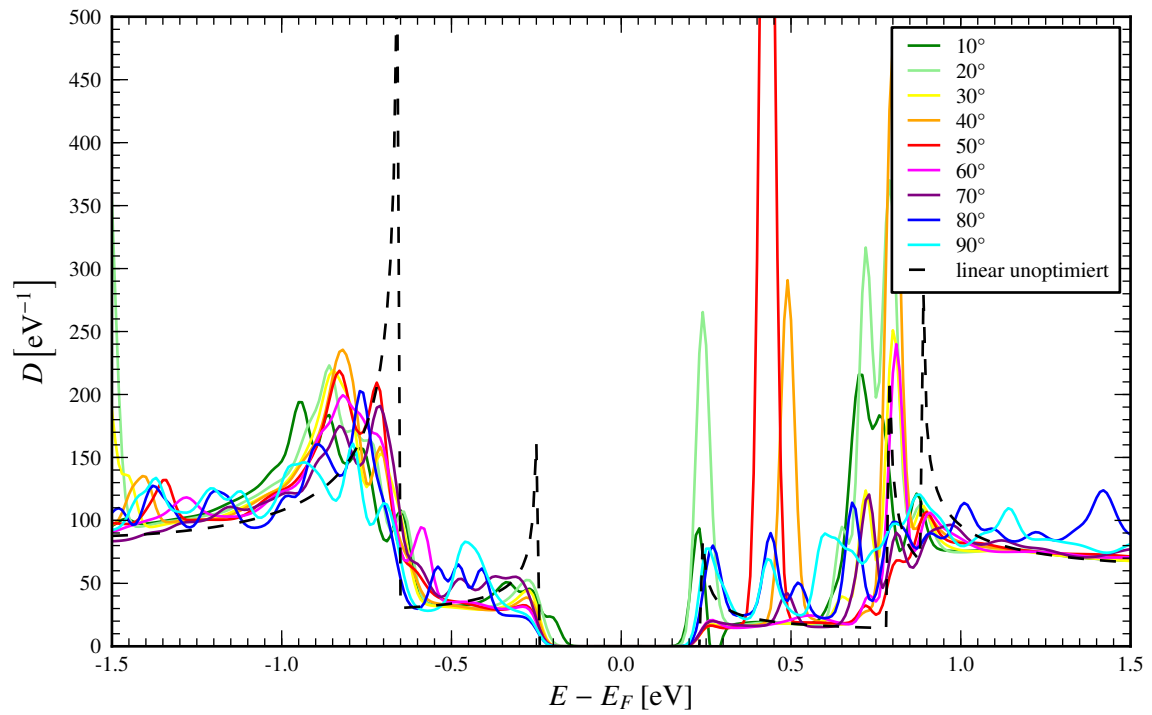


Abb. 5.35: Gaußverbreiterte Zustandsdichte $D(E)$ des Gesamtsystems aus (7,0)-CNTs.

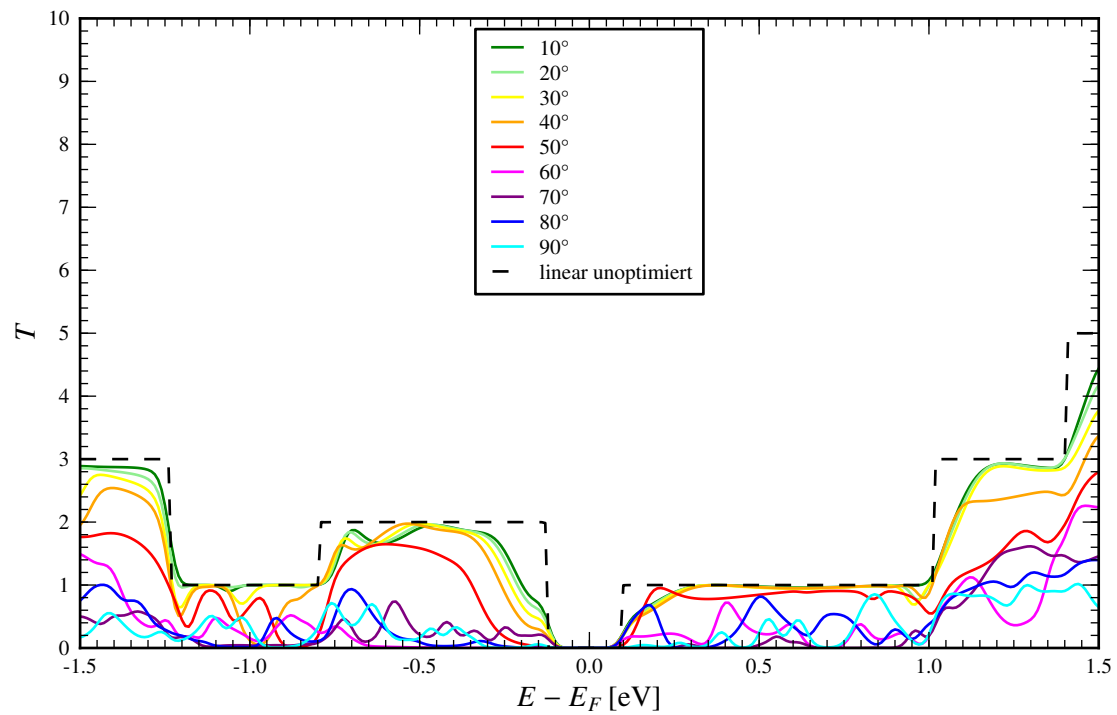


Abb. 5.36: Gaußverbreitetes Transmissionsspektrum $T(E)$ des gekrümmten (4,2)-CNTs.

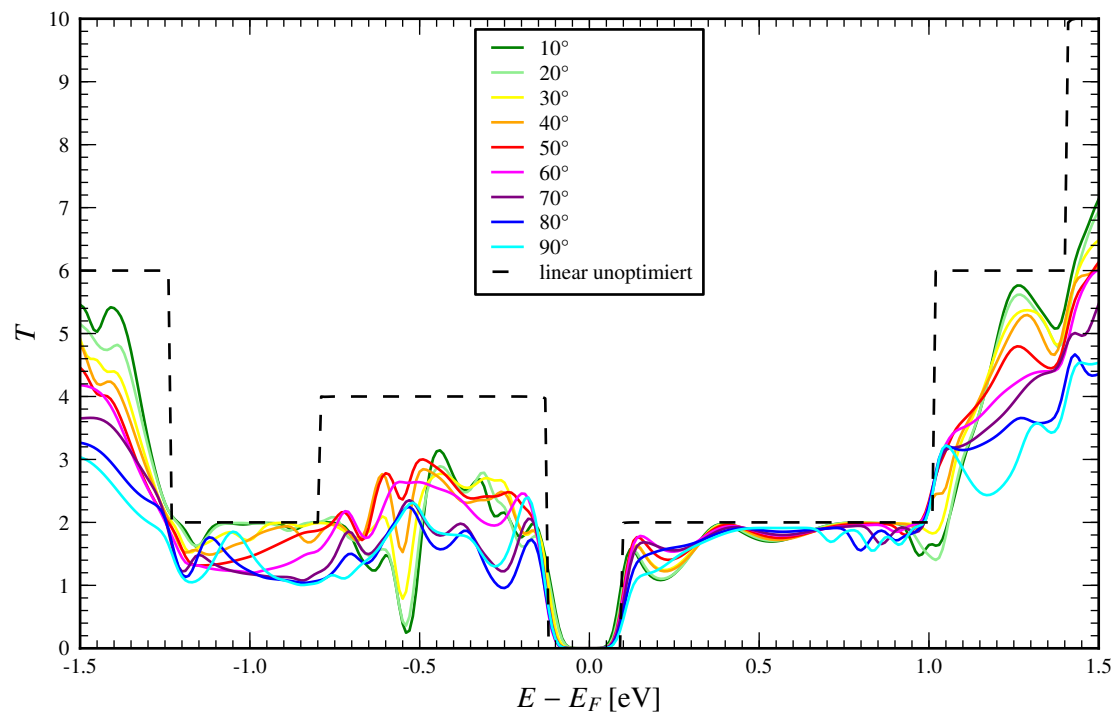


Abb. 5.37: Gaußverbreitetes Transmissionsspektrum $T(E)$ des Gesamtsystems aus (4,2)-CNTs.

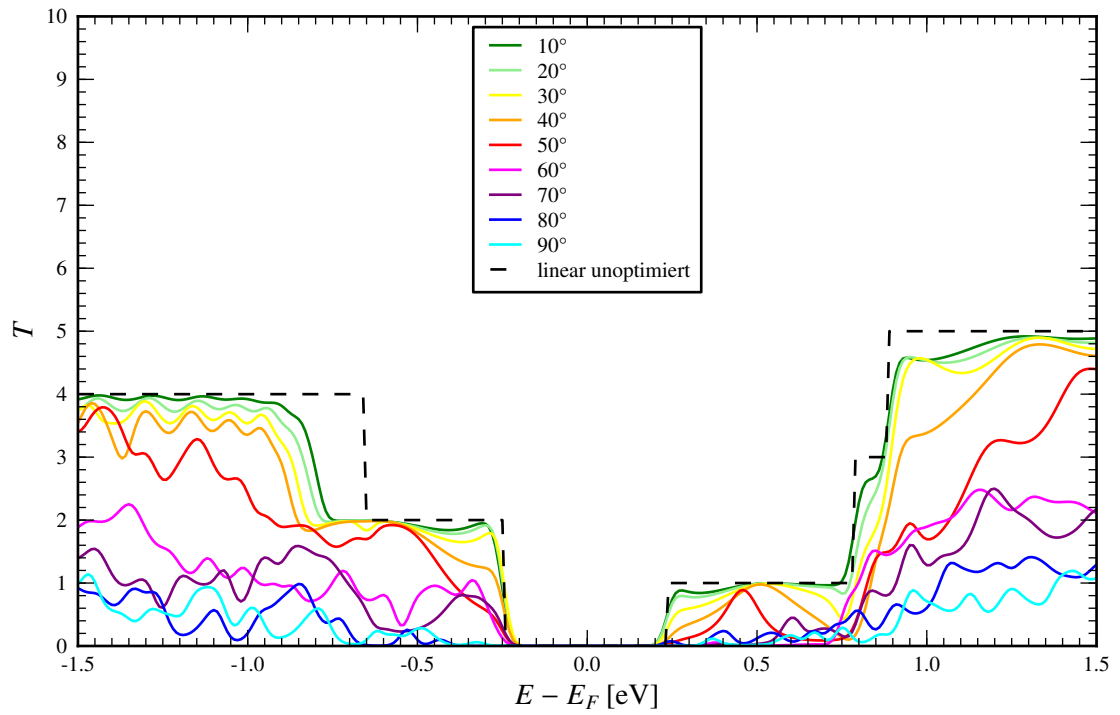


Abb. 5.38: Gaußverbreitertes Transmissionsspektrum $T(E)$ des gekrümmten (7,0)-CNTs.

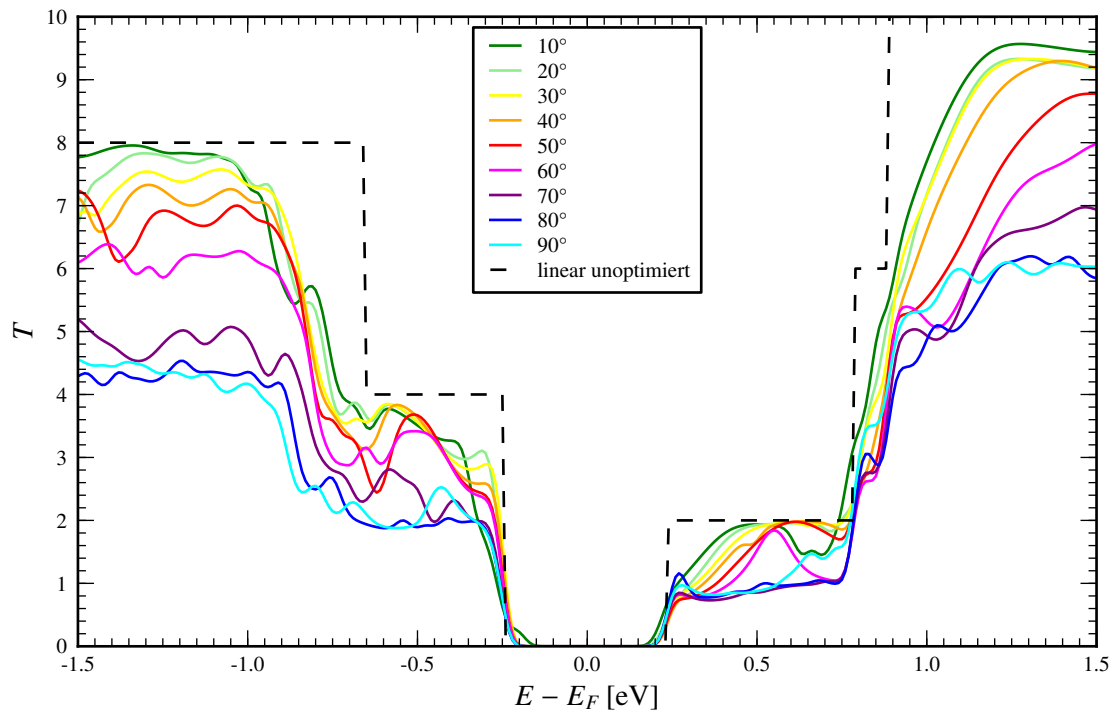


Abb. 5.39: Gaußverbreitertes Transmissionsspektrum $T(E)$ des Gesamtsystems aus (7,0)-CNTs.

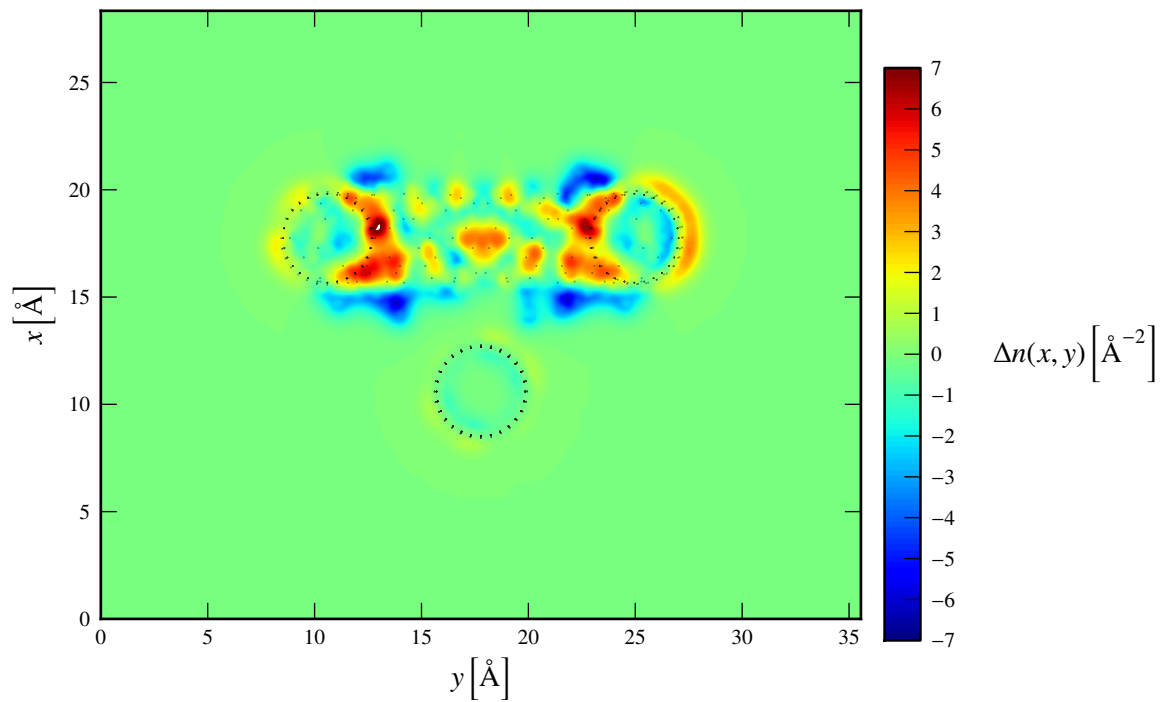


Abb. 5.40: Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(x, y)$ für das (4,2)-System bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 90^\circ$.

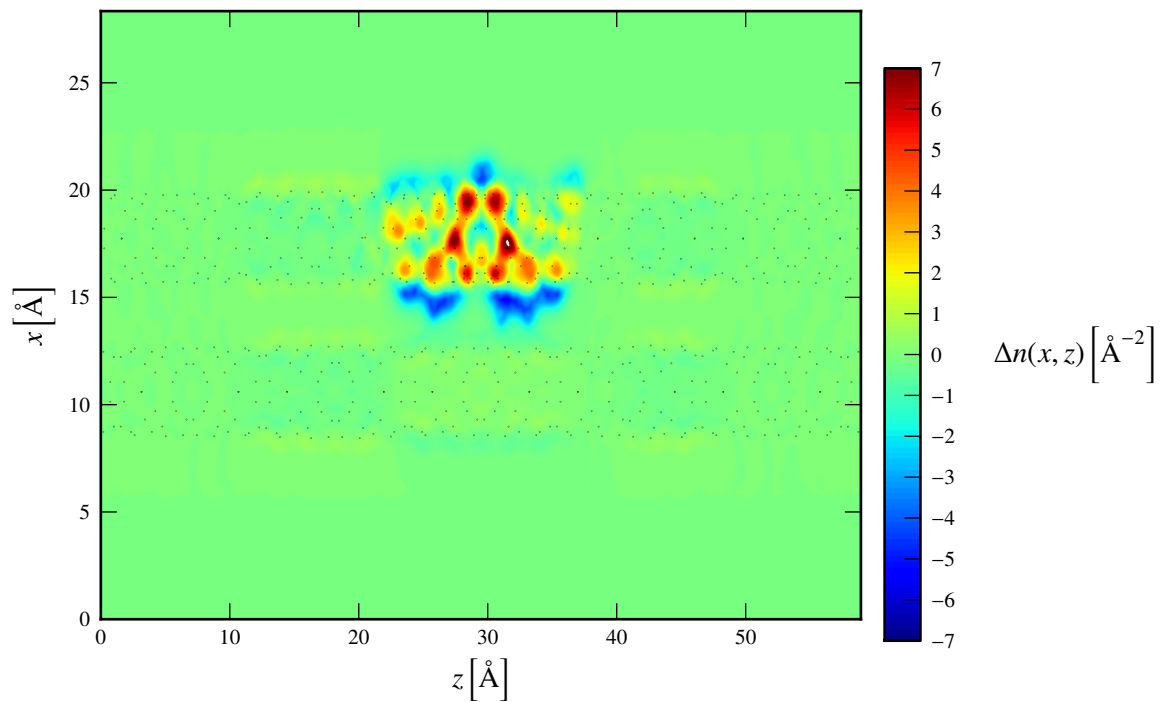


Abb. 5.41: Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(x, z)$ für das (4,2)-System bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 90^\circ$.

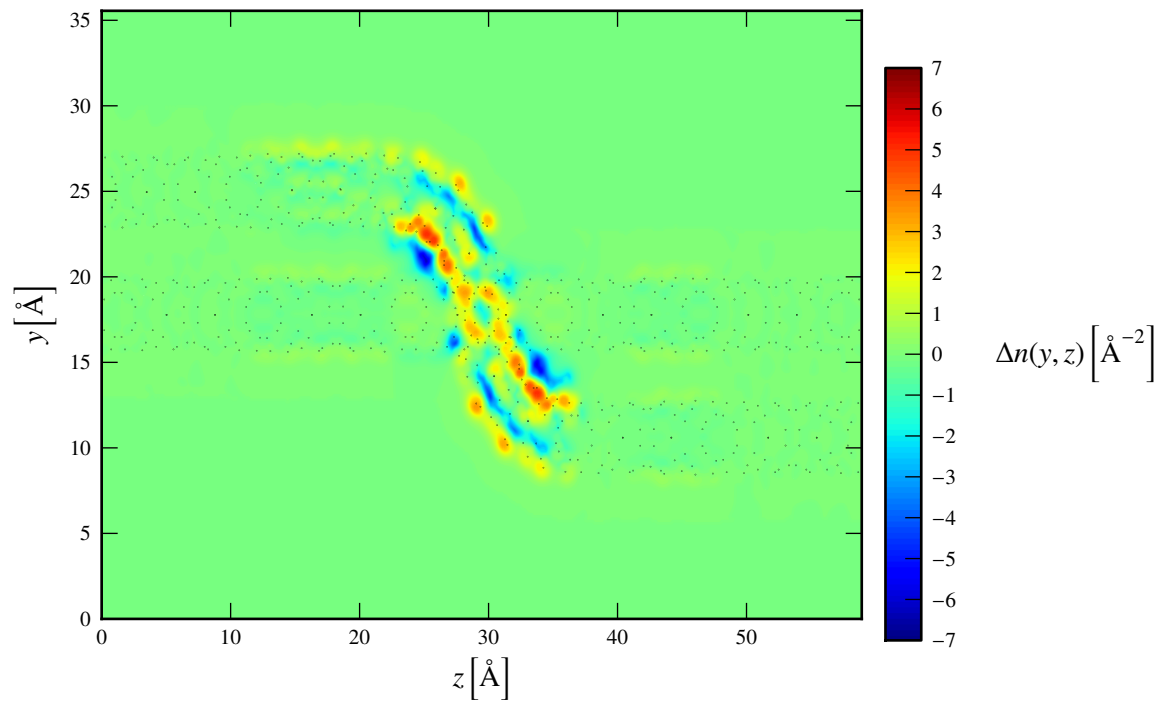


Abb. 5.42: Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(y, z)$ für das (4,2)-System bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 90^\circ$.

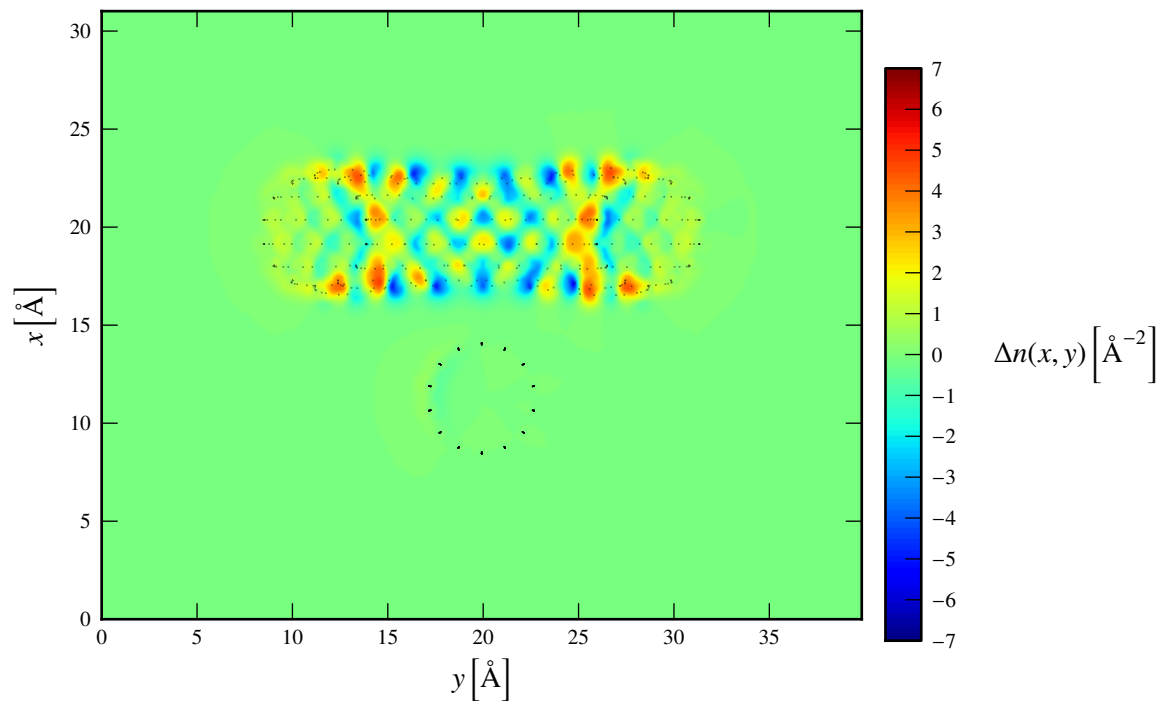


Abb. 5.43: Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(x, y)$ für das (7,0)-System bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 50^\circ$.

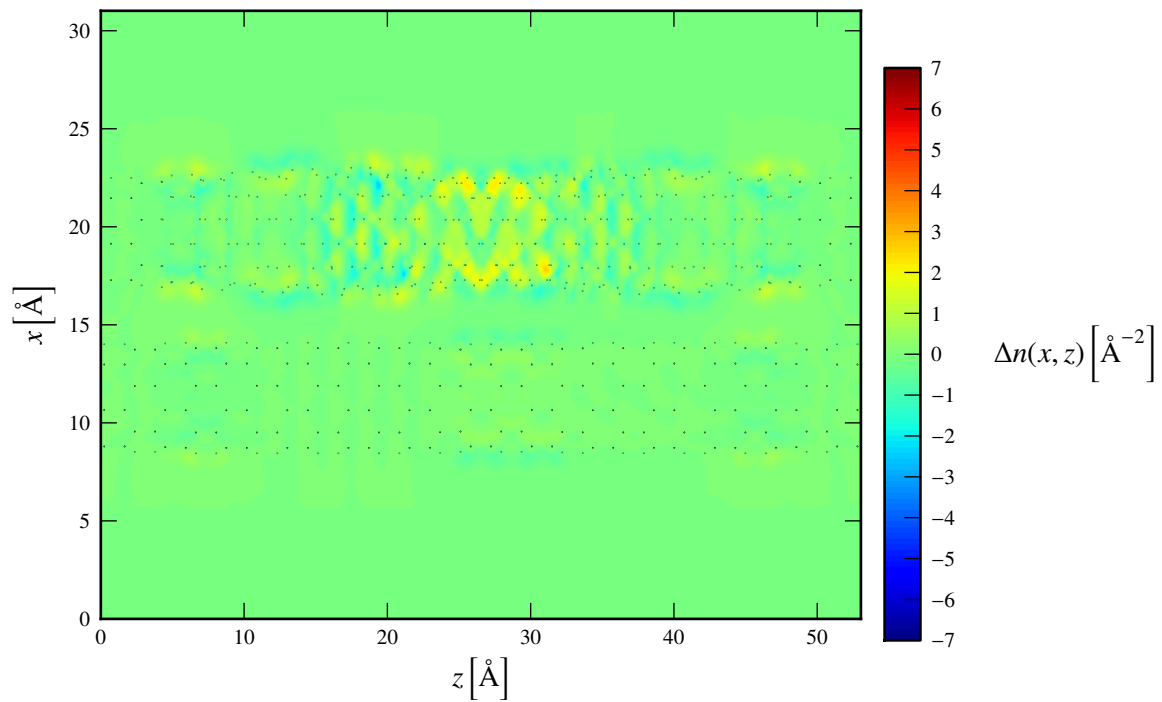


Abb. 5.44: Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(x, z)$ für das (7,0)-System bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 50^\circ$.

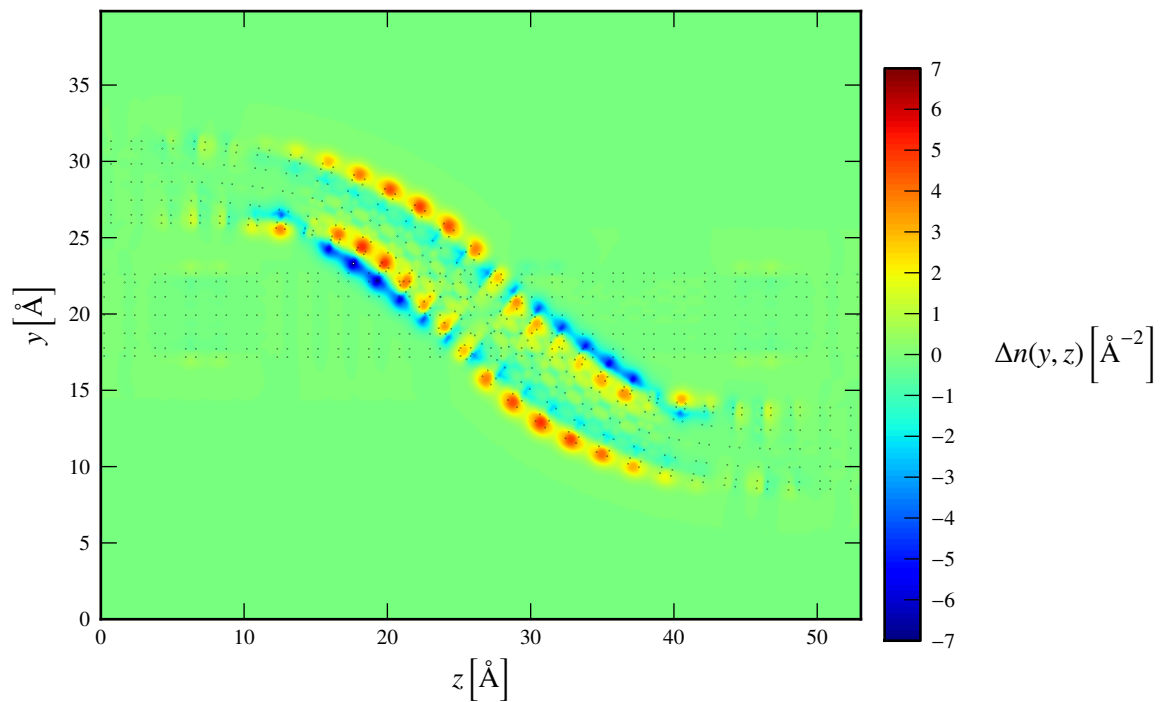


Abb. 5.45: Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(y, z)$ für das (7,0)-System bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 50^\circ$.

und die bezüglich z unterschiedliche Ausdehnung der verminderten und erhöhten Gebiete zustande und beinhalten keine weitergehende Struktur.

Abb. 5.46, 5.47 und 5.48 zeigen die Transmissionsspektren $T(E, U)$ für verschiedene Spannungen U für das lineare (4,2)-CNT, das gekrümmte (4,2)-CNT und das Gesamtsystem aus (4,2)-CNTs. Dabei ist beispielhaft der Kreuzungswinkel $\alpha = 50^\circ$ gewählt. Es zeigt sich bei sämtlichen Grafiken, sowohl des (4,2)-CNTs als auch des im qualitativen $T(E, U)$ -Verlauf völlig identischen (7,0)-CNTs, dass sich die Plateaus um die angelegte Spannung verschmälern, bis diese schließlich nicht mehr vorhanden sind und daraus resultierend sich die Bandlücke um die angelegte Spannung verbreitert. Somit ist auch bei höheren Spannungen kein signifikanter Stromfluss zu erwarten. Lediglich die Ausläufer der Fermi-verteilung liefern kleine Beiträge. Da der Abstand des Integrationsfensters zur Bandkante konstant bleibt, ist auch dieser Strom konstant. Auf die Darstellung der Strom-Spannungs-Kennlinien wurde hier verzichtet, da die Rechnungen für Spannungen ungleich Null sehr schlecht bzw. für große Winkel gar nicht konvergiert sind und somit zwar die Transmissionsspektren aussagekräftig, aufgrund der zunehmend ungenauen Berechnung derer mit zunehmender Spannung vor allem im Bandlückenbereich allerdings die Aussagen über den Strom bei höheren Spannungen und größeren Winkeln und somit auch alle Folgerungen bezüglich der Ängerungen durch den Krümmungs- und Kreuzungseffekt nicht gerechtfertigt wären. Als verlässlichster Wert sei der Strom des linearen CNTs bei $U = 0,1$ V aufgeführt. Für das (4,2)-CNT beträgt dieser 35 nA und für das (7,0)-CNT 0,43 nA.

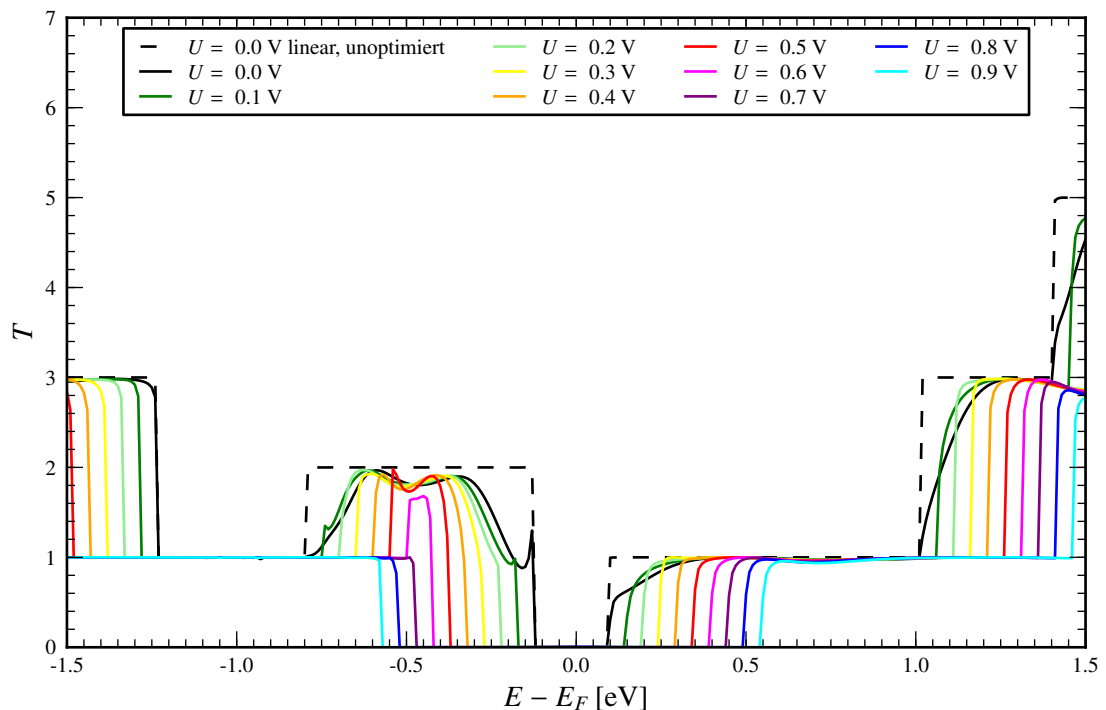


Abb. 5.46: Transmissionsspektren $T(E, U)$ des linearen (4,2)-CNTs für verschiedene Spannungen.

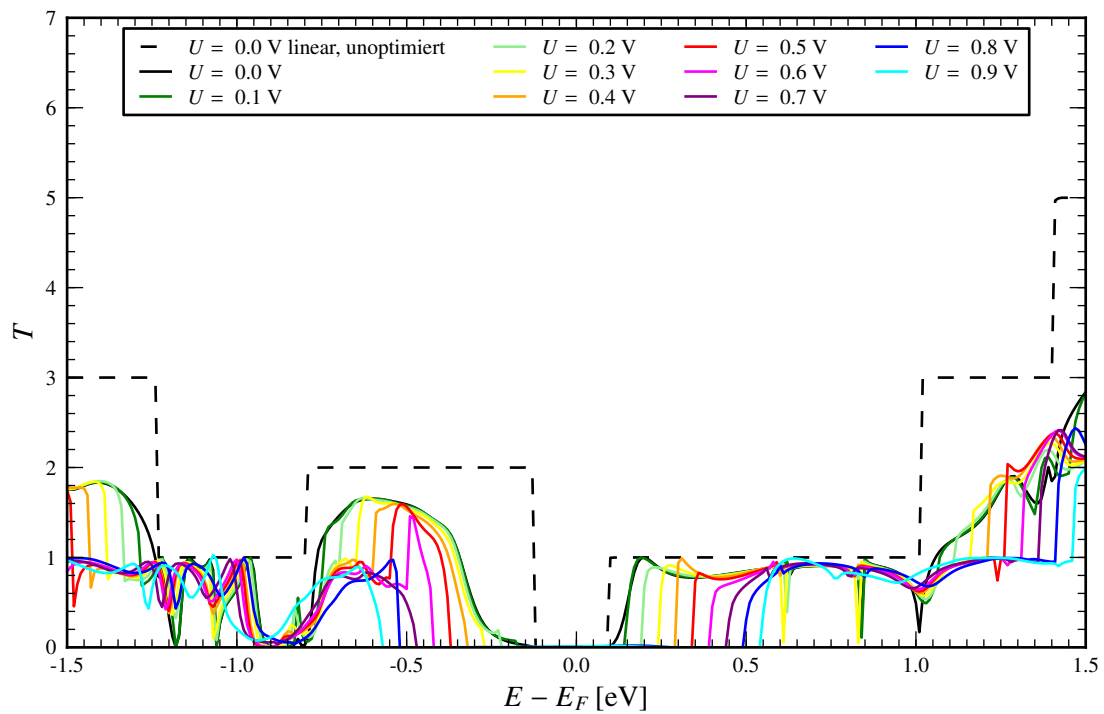


Abb. 5.47: Transmissionsspektren $T(E, U)$ des gekrümmten (4,2)-CNTs bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 50^\circ$ für verschiedene Spannungen.

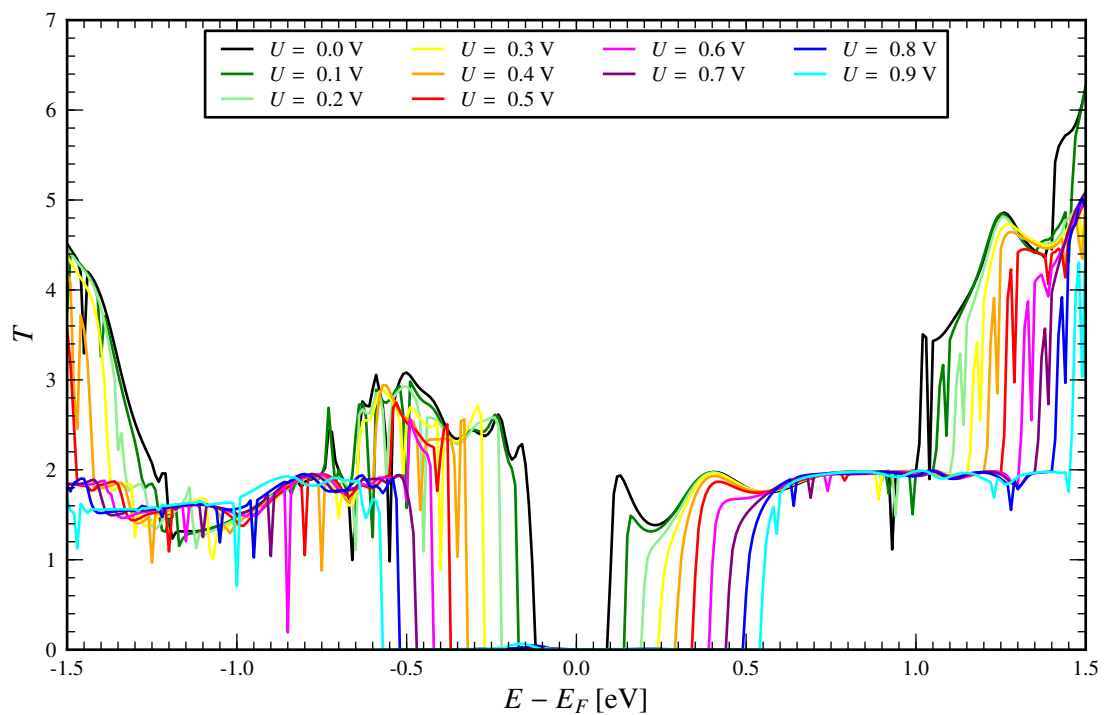


Abb. 5.48: Transmissionsspektren $T(E, U)$ des Gesamtsystems aus (4,2)-CNTs bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 50^\circ$ für verschiedene Spannungen.

6 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde untersucht, welchen Einfluss zwei an Elektroden gekoppelte, 3 Å nah beieinanderliegende Kohlenstoffnanoröhrchen auf das Transportverhalten im Vergleich zu den einzelnen CNTs haben. Berechnet wurden Elektronendichten, Zustandsdichten, Transmissionsspektren für verschiedene Spannungen und Stromspannungskennlinien. Als theoretische Grundlage hierfür wurde die Dichtefunktionaltheorie, die Theorie der Nichtgleichgewichtsgreensfunktion und die Landauer-Büttiker-Formel verwendet. Die Berechnungen wurden mit der Software ATOMISTIX TOOLKIT 12.2.0 durchgeführt [8, 9].

Der Großteil bestand in der systematischen Untersuchung eines Systems aus metallischen (4,1)-CNTs durch Variation diverser Parameter. Hierzu wurden folgende geometrische Abmessungen variiert: (1) Der Krümmungsradius wurde variiert, indem bei der festen Anzahl von sechs Einheitszellen je Elektrode die Anzahl der gekrümmten Einheitszellen auf zwei, vier oder sechs gesetzt und die übrigen konstant gehalten wurden. (2) Zur Untersuchung des Einflusses von Krümmung und Kreuzung wurde jeweils nur das lineare, nur das gekrümmte oder das zusammengesetzte Gesamtsystem berechnet. (3) Zur weiteren Untersuchung des Einflusses des Kreuzungsbereiches wurde der Kontaktwinkel zwischen linearem und gekrümmten CNT variiert.

Die Betrachtung der Gesamtenergie zeigte, dass das CNT mit kleinster Krümmung auch die geringste Gesamtenergie besitzt, das System somit stets durch Minimierung der wirkenden Kräfte ins Energieminimum strebt und damit eine Bestätigung für ein korrektes physikalisches Verhalten gegeben ist.

Die Zustandsdichte zeigte für das gekrümmte und das Gesamtsystem lediglich die erwartete Abschwächung der van-Hove-Singularitäten sowie eine Verschiebung derer. Eine signifikante Veränderung bei der Variation des Kontaktwinkels war nicht ersichtlich.

Das Transmissionsspektrum des gekrümmten CNT zeigte mit Zunahme der Krümmung in Umgebung der Fermienergie eine Abnahme des Plateaus $T = 4$ auf das Umgebungsniveau $T = 2$. Für alle anderen Energiewerte zeigte sich keine Abhängigkeit. Des Weiteren zeigte sich, dass bei Unterschreiten des kritischen Krümmungsradius $7 \text{ Å} < R_{krit} < 8 \text{ Å}$ ein abruptes Abfallen der Transmission auf $T < 1$ im gesamten Energiebereich stattfindet.

Die Veränderung der Elektronendichte durch das Zusammenfügen der Einzelsysteme konnte durch Differenzbildung deutlich gemacht werden. Es kommt zur Umverteilung der Elektronen, wobei in der Mitte der Kreuzungsregion eine Erhöhung der Elektronendichte entsteht, welche in lateraler Richtung auf der Länge des Kontaktes mit einer Wellenlänge von etwa 2 Å oszilliert.

Die Strom-Spannungs-Kennlinie zeigte mit zunehmender Krümmung zusätzlich zur erwarteten Stromabnahme eine qualitative Änderung des Kurvenverlaufes von linear ansteigend und anschließend in Sättigung gehend bei kleinen Krümmungen zu schwächer linear ansteigend im gesamten Bereich bei stärkeren Krümmungen. Dies ließ sich mit qualitativ unterschiedlichen Transmissionsspektren begründen. Der Einfluss von Krümmung und

Kreuzung auf den Stromfluss wurde durch Differenzbildung und anschließende Normierung auf das isolierte System bestimmt. Bezüglich des Krümmungseffektes weist das gekrümmte CNT in der Konfiguration mit sechs gekrümmten Einheitszellen bei einem Kreuzungswinkel von $\alpha = 50^\circ$ und Spannungen von $U < 0,5$ V einen Stromverlust von 11% auf. Der Effekt nimmt zu größeren Spannungen hin ab. Bezüglich des Kreuzungseffektes sind quantitative Aussagen aufgrund der stark schwankenden Datenpunkte schwierig. Für kleine Spannungen liegt der Stromverlust im Bereich von 8% bis 16% und nimmt ebenfalls zu höheren Spannungen hin ab. Ein Vergleich zeigt, dass für Kreuzungswinkel $\alpha \lesssim 50^\circ$ der Kreuzungseffekt dominiert, während für $\alpha \gtrsim 50^\circ$ der Krümmungseffekt dominiert.

Weiterhin wurde untersucht, ob es bei einem System, bei dem die Elektroden nicht verbunden sind durch Tunnelprozesse zum Transport kommt. hierzu wurde die rechte Elektrodenregion des linearen und die linke Elektrodenregion des gekrümmten CNTs entfernt. Dabei zeigte sich eine geringe, aber deutlich von Null verschiedene Transmission $0 < T < 1$, welche mit der Energie und der Spannung variiert. Der daraus resultierende Stromfluss beträgt bei $U = 0,9$ V etwa 7% des Stromflusses des unverbundenen Systems.

Abschließend wurden zwei halbleitende Systeme, eines aus (4,2)-CNTs und eines aus (7,0)-CNTs, berechnet. Bei beiden ist das Verhalten der Zustandsdichte analog dem des metallischen Systems. Bei den Transmissionsspektren beider halbleitender Systeme tritt mit zunehmendem Kontaktwinkel α eine Verminderung im gesamten Energiebereich ein, welche zudem größer ist als die des metallischen Systems. Die Betrachtung der Elektronendichte zeigt bei beiden halbleitenden Systemen eine starke Verschiebung, welche drei Größenordnungen stärker ist als die des metallischen Systems. Weiterhin ist die ideale Konfiguration des halbleitenden Systems weniger stabil als die des metallischen und die der Sesselform-CNTs stabiler als die der Zick-Zack-CNTs. Es zeigen sich jedoch Unterschiede in der Verteilung der Regionen verminderter/erhöhter Elektronendichte zwischen dem (4,2)- und dem (7,0)-System. So bildet sich im (4,2)-System ein großes Gebiet mit einer verringerten Elektronendichte an der dem linearen CNT zugewandten Seite des gekrümmten CNTs aus. Beim (7,0)-System ist dies nicht festzustellen. Die spannungsabhängigen Transmissionsspektren zeigen bei beiden Systemen eine Erhöhung der Bandlücke um den Betrag der angelegten Spannung, sodass keine Erhöhung des Stromflusses zustande kommt. Für das einzelne lineare (4,2)-CNT fließt ein Strom von 35 nA und für das einzelne lineare (7,0)-CNT fließt ein Strom von 0,43 nA.

Die in dieser Arbeit erlangten Resultate beziehen sich auf eine spezielle Geometrie, die sich aus Software-Restriktionen, der Minimierung der Systemgröße und den speziellen Leitungseigenschaften (metallisch/halbleitend) der Kohlenstoffnanoröhrchen ergab. Ob die Aussagen auf Systeme mit anderen Chiralitäten übertragbar sind, ist aufgrund der Komplexität des Systems nicht klar. Daher müssten zur Erhärtung fortführend weitere Rechnungen angestellt werden. Ebenfalls bedarf das halbleitende System einer eingehenden Untersuchung, da die diesbezüglich gewonnenen Ergebnisse nur wenig zufriedenstellend sind. Des Weiteren spielt in der Realität die hier vernachlässigte Elektron-Phonon-Kopplung eine wichtige Rolle, sodass Rechnungen, die dies berücksichtigen, wichtige Korrekturen liefern würden.

7 Anhang

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Parameter für die Geometrieoptimierung	15
Tab. 3.2	Parameter für die DFT-Rechnungen	15
Tab. 3.3	Zusätzliche Parameter für die Berechnung der Elektronendichte . . .	15
Tab. 3.4	Zusätzliche Parameter für die Berechnung der Zustandsdichte und des 0 V-Transmissionsspektrums	16
Tab. 3.5	Zusätzliche Parameter für die Berechnung der spannungsabhängigen Transmissionsspektren	16
Tab. 3.6	Parameter für die Berechnung von Bandstruktur, Zustandsdichte und Transmissionsspektrum des unendlichen CNT	16
Tab. 4.1	Übersicht über Atomzahl, Umfang und Länge verschiedener CNT . .	20

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Schematische Darstellung eines Kohlenstoffnanoröhrchenfeldeffekttransistors	5
Abb. 1.2	Vereinfachter schematischer Aufbau zweier mit CNTs verbundener Elektroden	5
Abb. 2.1	CNT-Einheitszelle als Ausschnitt der Graphen-Ebene	7
Abb. 2.2	Einheitszellen des $(4,n)$ -CNT	8
Abb. 2.3	Bandstruktur von Graphen	9
Abb. 2.4	Bandstruktur, Zustandsdichte und Transmissionsspektrum am Beispiel des $(4,1)$ -CNT	9
Abb. 4.1	Konfigurationen durch Variation der Länge von Kontakt, Krümmung und mittlerer Verbindung	19
Abb. 4.2	Konfigurationen durch Betrachtung der Einzelsysteme und des Gesamtsystems	19
Abb. 4.3	Konfigurationen durch Variation des Kontaktwinkels	19

Abb. 4.4	Untersuchtes System mit einem (4,1)-CNT im Kugel-Modell	20
Abb. 5.1	Winkelabhängigkeit der Gesamtenergie pro Atom	21
Abb. 5.2	Integrierte Elektronendichte der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für $\alpha = 30^\circ$.	22
Abb. 5.3	Integrierte Elektronendichte der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für $\alpha = 60^\circ$.	23
Abb. 5.4	Integrierte Elektronendichte der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für $\alpha = 90^\circ$.	23
Abb. 5.5	Zustandsdichte des linearen CNT	24
Abb. 5.6	Zustandsdichte des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für die verschiedenen α	25
Abb. 5.7	Zustandsdichte des Gesamtsystems der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für die verschiedenen α	25
Abb. 5.8	Transmissionsspektrum des linearen CNT	26
Abb. 5.9	Transmissionsspektrum der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für die verschiedenen α	27
Abb. 5.10	Transmissionsspektrum der Konfiguration $\{1, 4, 2\}$ für die verschiedenen α	27
Abb. 5.11	Transmissionsspektrum Konfiguration $\{2, 2, 4\}$ für die verschiedenen α .	28
Abb. 5.12	Transmissionsspektrum des Gesamtsystems der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für die verschiedenen α	28
Abb. 5.13	Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(x, y)$ der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für $\alpha = 10^\circ$	29
Abb. 5.14	Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(x, z)$ der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für $\alpha = 10^\circ$	30
Abb. 5.15	Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(y, z)$ der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für $\alpha = 10^\circ$	30
Abb. 5.16	Strom-Spannungs-Kennlinie des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für verschiedene Winkel	31
Abb. 5.17	Strom-Spannungs-Kennlinie des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{1, 4, 2\}$ für verschiedene Winkel	32
Abb. 5.18	Strom-Spannungs-Kennlinie des gekrümmten CNT der Konfiguration $\{2, 2, 4\}$ für verschiedene Winkel	32
Abb. 5.19	Transmissionsspektren des linearen CNT für verschiedene Spannungen .	34
Abb. 5.20	Transmissionsspektren der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für verschiedene Spannungen für $\alpha = 90^\circ$	34
Abb. 5.21	Strom-Spannungs-Kennlinien und deren Differenz der Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für $\alpha = 30^\circ$	36
Abb. 5.22	Relative Änderung der Strom-Spannungs-Kennlinie durch den Krümmungseffekt für die Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für verschiedene Winkel .	36
Abb. 5.23	Relative Änderung der Strom-Spannungs-Kennlinie durch den Krümmungseffekt für die Konfiguration $\{1, 4, 2\}$ für verschiedene Winkel .	37
Abb. 5.24	Relative Änderung der Strom-Spannungs-Kennlinie durch den Krümmungseffekt für die Konfiguration $\{2, 2, 4\}$ für verschiedene Winkel .	37
Abb. 5.25	Relative Änderung der Strom-Spannungs-Kennlinie durch den Kreuzungseffekt für die Konfiguration $\{0, 6, 0\}$ für verschiedene Winkel .	38
Abb. 5.26	Relative Änderung der Strom-Spannungs-Kennlinie durch den Kreuzungseffekt für die Konfiguration $\{1, 4, 2\}$ für verschiedene Winkel .	38
Abb. 5.27	Relative Änderung der Strom-Spannungs-Kennlinie durch den Kreuzungseffekt für die Konfiguration $\{2, 2, 4\}$ für verschiedene Winkel .	39
Abb. 5.28	Elektronendichte des unterbrochenen Systems	40
Abb. 5.29	Zustandsdichte des unterbrochenen Systems	40
Abb. 5.30	Transmissionsspektrum des unterbrochenen Systems	41

Abb. 5.31	Strom-Spannungs-Kennlinie des unterbrochenen Systems	41
Abb. 5.32	Zustandsdichte des gekrümmten (4,2)-CNTs	44
Abb. 5.33	Zustandsdichte des Gesamtsystems aus (4,2)-CNTs	44
Abb. 5.34	Zustandsdichte des gekrümmten (7,0)-CNTs	45
Abb. 5.35	Zustandsdichte des Gesamtsystems aus (7,0)-CNTs	45
Abb. 5.36	Transmissionsspektrum des gekrümmten (4,2)-CNTs	46
Abb. 5.37	Transmissionsspektrum des Gesamtsystems aus (4,2)-CNTs	46
Abb. 5.38	Transmissionsspektrum des gekrümmten (7,0)-CNTs	47
Abb. 5.39	Transmissionsspektrum des Gesamtsystems aus (7,0)-CNTs	47
Abb. 5.40	Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(x, y)$ für das (4,2)-System bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 90^\circ$	48
Abb. 5.41	Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(x, z)$ für das (4,2)-System bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 90^\circ$	48
Abb. 5.42	Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(y, z)$ für das (4,2)-System bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 90^\circ$	49
Abb. 5.43	Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(x, y)$ für das (7,0)-System bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 50^\circ$	49
Abb. 5.44	Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(x, z)$ für das (7,0)-System bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 50^\circ$	50
Abb. 5.45	Integrierte Elektronendichtedifferenz $\Delta n(y, z)$ für das (7,0)-System bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 50^\circ$	50
Abb. 5.46	Transmissionsspektren des linearen (4,2)-CNTs für verschiedene Spannungen	51
Abb. 5.47	Transmissionsspektren des gekrümmten (4,2)-CNTs bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 50^\circ$ für verschiedene Spannungen	52
Abb. 5.48	Transmissionsspektren des Gesamtsystems aus (4,2)-CNTs bei einem Kreuzungswinkel $\alpha = 50^\circ$ für verschiedene Spannungen	52

Literaturverzeichnis

- [1] *Bild eines kohlenstoffnanoröhrchenfeldeffekttransistor*, URL http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/7/74/Transistor_CNFET.jpg. (Zitiert auf S. 5).
- [2] J. SOMMER: *Ab initio Berechnungen des Elektronentransports in metallbeschichteten Kohlenstoffnanoröhrchen*, Bachelorarbeit, Institut für Physik, Technische Universität Chemnitz (Oktober 2011). (Zitiert auf S. 7).
- [3] P. R. WALLACE: *The band theory of graphite*, Phys. Rev. 71 (1947), S. 622–634, doi:10.1103/PhysRev.71.622, URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.71.622>. (Zitiert auf S. 8).
- [4] K. CAPELLE: *A Bird's-Eye View of Density-Functional Theory* (November 2006), URL <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0211443>. (Zitiert auf S. 9).
- [5] P. HOHENBERG und W. KOHN: *Inhomogeneous electron gas*, Phys. Rev. 136 (1964), S. B864–B871, doi:10.1103/PhysRev.136.B864, URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.136.B864>. (Zitiert auf S. 10).
- [6] W. KOHN und L. J. SHAM: *Self-consistent equations including exchange and correlation effects*, Phys. Rev. 140 (1965), S. A1133–A1138, doi:10.1103/PhysRev.140.A1133, URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.140.A1133>. (Zitiert auf S. 12).
- [7] M. BÜTTIKER ET AL.: *Generalized many-channel conductance formula with application to small rings*, Phys. Rev. B 31 (1985), S. 6207–6215, doi:10.1103/PhysRevB.31.6207, URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.31.6207>. (Zitiert auf S. 13).
- [8] QUANTUM WISE A/S: *Atomistix ToolKit Version 12.2.0*, URL <http://www.quantumwise.com>. (Zitiert auf S. 15 und 53).
- [9] QUANTUM WISE: *Atomistix ToolKit: Manual Version 12.2.0* (2012), URL <http://www.quantumwise.com/documents/manuals/latest/ReferenceManual/ReferenceManual.pdf>. (Zitiert auf S. 15 und 53).
- [10] R. MORADIAN, S. BEHZAD und S. AZADI: *Ab initio density functional theory investigation of electronic properties of semiconducting single-walled carbon nanotube bundles*, Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures 40 (2008), Nr. 10, S. 3055–3059, doi:10.1016/j.physe.2008.04.006, URL http://ac.els-cdn.com/S1386947708001586/1-s2.0-S1386947708001586-main.pdf?_tid=1fff3cad2a07d7487ed4ada80ba0952b&acdnat=1341932305_5ea2ceb6e06e2e6f561246f7a6a4d7a4. (Zitiert auf S. 18).
- [11] P. MÜNSTER: *Abbildungsprozesse beim STM auf atomarer Skala: Simulation und Experimente*, Diplomarbeit, Institut für Angewandte Physik, Universität Karlsruhe (September 1997), URL <http://pmrb.free.fr/work/diplom/screen.pdf>. (Zitiert auf S. 42).
- [12] WIKIPEDIA: *Kohlenstoff*, 02.10.2012, 21:09 Uhr, URL <http://de.wikipedia.org/wiki/Kohlenstoff>. (Zitiert auf S. 42).