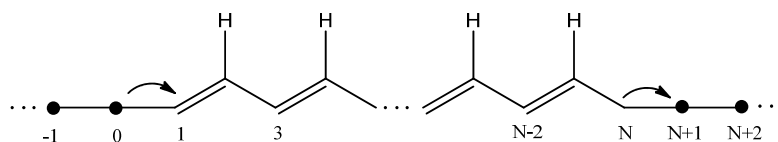


(دریافت مقاله: ۱۳۸۹/۱۰/۴؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۰/۱۰/۲۰)

بعدی هستند، که موضوع رسانش آنها با کشف خواص رسانش بسیار پلی استیلن وارد عرصه علم فیزیک شد، به این معنی که پلی استیلن اولین نسل بسپارهای رسانا به شمار می رود [۱۰] و تا کنون مطالعات زیادی بر روی این بسپار انجام شده است [۸، ۱۱ و ۱۲]. علی رغم تحقیقات زیادی که بر روی بسپارها انجام شده است، هنوز پرسش های اساسی زیادی درباره ویژگی های رسانش این مواد در ذهن دانشمندان وجود دارد. هدف این تحقیق مطالعه تحلیلی ترابرد الکتریکی بسپار پلی استیلن با در نظر گرفتن اثر انرژی های پرش پیوند هیدروژن-کربن است. برای این منظور به مطالعه تحلیلی رسانش الکتریکی یک نانوسیم شانه-مانند با انرژی پرش متناوب متصل به دو هادی

مطالعه و تحقیق درباره سامانه های مولکولی یکی از مهم ترین زمینه های تحقیقاتی در چند دهه اخیر بوده است [۱] و در میان این سامانه های مولکولی سامانه های یک بعدی، مانند سیم های مولکولی نقش مهمی را در پایه و اساس فن آوری نانو ایفا کرده اند [۲-۵]. سامانه های یک بعدی در مقابل تغییرات میدان خارجی یا ویژگی های ذاتی مانند مکان ناخالصی در یک سیم [۶ و ۷] و قدرت دوپارش (اختلاف قدرت پیوندهای یگانه و دوگانه) [۸] بسیار حساس هستند که موجب استفاده آنها در قطعات مولکولی مانند حسگرهای زیستی و شیمیایی شده است [۹]. بسپارها یکی از مواد بسیار مهم در عرصه رساناهای یک



شکل ۱. نمایش طرح‌واره‌ای از یک بسپار شانه-مانند با انرژی پخش متناوب در شاخه اصلی (پلی استیلن) که متصل به دو نیم‌سیم نیمه منتهای است.

یک‌بعدی ایده‌آل پرداخته و تأثیر طول بسپار و قدرت دوپاراش را بر روی رسانش الکتریکی و چگالی حالت‌های انرژی این سامانه به طور تحلیلی بررسی می‌کنیم. مطالعه رسانش الکتریکی براساس رابطه لاندآور در نظریه پاسخ خطی است، که بیان می‌کند رسانش الکترونی سامانه با ضریب عبور الکترونی آن متناسب است [۱۳].

$$\tilde{\epsilon}_C = \epsilon_C + \frac{\beta_{CH}}{\epsilon - \epsilon_H}, \quad (3)$$

که در آن  $\beta_{CH}$  انرژی پخش الکترون برای پیوند هیدروژن-کربن،  $\epsilon_C$  و  $\epsilon_H$  به ترتیب انرژی جایگاهی الکترون در اتم‌های کربن و هیدروژن هستند. هامیلتونی‌های هادی‌ها نیز به صورت زیر هستند [۱۵]

$$H_L = \epsilon_L \sum_{i=-\infty}^{\infty} |i\rangle\langle i| + \beta_L \sum_{i=-\infty}^{-1} (|i\rangle\langle i+1| + |i+1\rangle\langle i|), \quad (4)$$

$$H_R = \epsilon_R \sum_{i=N+1}^{\infty} |i\rangle\langle i| + \beta_R \sum_{i=N+1}^{\infty} (|i\rangle\langle i+1| + |i+1\rangle\langle i|),$$

که در آن  $\beta_{L(R)}$  انرژی پخش بین جایگاه‌های متوالی و  $\epsilon_{L(R)}$  انرژی جایگاهی اتم‌ها در نیم‌سیم سمت چپ (راست) هستند. همچنین هامیلتونی‌های اتصال بسپار به هادی‌ها به این صورت هستند [۱۵]

$$H_{PL} = \beta_{PL} (|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|), \quad (5)$$

$$H_{PR} = \beta_{PR} (|N\rangle\langle N+1| + |N+1\rangle\langle N|),$$

که در آن  $\beta_{PL(R)}$  انرژی پخش بین بسپار و هادی سمت چپ (راست) است. تابع گرین بسپار در حضور هادی‌ها به صورت زیر نوشته می‌شود [۱۶]

$$G_P = \frac{G_{oP}}{I - G_{oP}H_{PL}G_LH_{LP} - G_{oP}H_{PR}G_RH_{RP}}, \quad (6)$$

در این قسمت با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت بستگی قوی به مطالعه نظری یک سامانه شامل یک بسپار که بین دو هادی یک بعدی ایده‌آل قرار گرفته است، می‌پردازیم. مطابق شکل ۱ این بسپار دارای یک ساختار شانه-مانند شامل انرژی‌های پخش متناوب در شاخه اصلی خود است. این مدل را می‌توان برای توصیف خواص تراپدی بسپارهای پلی‌استیلن-مانند به کار برد. هامیلتونی کل سامانه با فرض مشابه بودن دو هادی سمت چپ و راست، در تقریب همسایه‌های اول به صورت زیر است

$$H = H_L + H_{PL} + H_P + H_{PR} + H_R, \quad (1)$$

که در آن  $H_P, H_{PL(R)}, H_{L(R)}$  به ترتیب هامیلتونی نیم‌سیم سمت چپ (راست)، هامیلتونی اتصال بسپار به نیم‌سیم سمت چپ (راست) و هامیلتونی بسپار منزوی است. هامیلتونی بسپار شانه-مانند منزوی به صورت زیر بیان می‌شود

$$H_P = \tilde{\epsilon}_C \sum_{i=1}^N |i\rangle\langle i| + \beta_C \sum_{i=1}^{N-1} (1 + \delta(-1)^{i+1}) (|i\rangle\langle i+1| + |i+1\rangle\langle i|) \quad (2)$$

که در آن  $1 + \delta(-1)^{i+1}$  ضریب انرژی پخش بین جایگاه‌های  $i$  و  $i+1$  است و در واقع نشان دهنده قدرت دوپاراش است. بنابراین

با مشخص شدن عنصر  $(G_P)_{\lambda,N}$ ، در قسمت بعد به کمک روابط تحلیلی (۸) و (۹) به بررسی رسانش و چگالی حالت‌های بسیار شانه‌مانند با انرژی پرش متناوب در زنجیره اصلی (پلی‌استیلن) می‌پردازیم.

در این بخش با استفاده از فرمول‌بندی قبل به بررسی ترابرد الکترونی از یک بسیار شانه‌مانند با انرژی‌های پرش متناوب در شاخه اصلی می‌پردازیم. لازم به ذکر است که این مدل لزوماً برای بررسی خواص ترابردی مولکول پلی‌استیلن نیست و برای تمام بسیارها یا نانو ساختارهای شانه‌مانندی که انرژی پرش آنها متناوب است قابل استفاده است. بنابراین در اینجا پارامترهای مورد نیاز برای انرژی‌های جایگاهی و پرش را به صورت نوعی انتخاب می‌کنیم که این امر در مقالات نظری نیز بسیار رایج است [۱۹ و ۲۰]. البته برای تحلیل و توجیه نتایج تجربی به صورت موردی توسط این رهیافت، دانستن دقیق این پارامترها ضروری است. با توجه به این توضیحات مقادیر انرژی‌های جایگاهی تمام اتم‌های ساختار شامل هادی‌ها را برابر صفر اختیار می‌کنیم. همچنین انرژی پرش بین اربیتال‌های اتمی در هادی‌ها را برابر  $1\text{ eV}$ ، انرژی پرش برای پیوند کربن-هیدروژن را  $0.25\text{ eV}$  و مقدار  $\beta_C$  در رابطه (۲) را  $1\text{ eV}$  انتخاب می‌کنیم. انرژی پرش اتصال‌ها را نیز برابر  $0.25\text{ eV}$  در نظر می‌گیریم.

نمودارهای شکل ۲ (الف) و (ب) رفتار رسانش و چگالی حالت‌های پلی‌استیلن را برحسب انرژی الکترون ورودی برای دو طول مختلف (۹،  $N = 2n + 1 = 7$ ) برای چند مقدار مختلف قدرت دوپارش نشان می‌دهد. همان‌طور که دیده می‌شود در درون پنجره انرژی بسیار، رفتار منحنی‌های چگالی حالت‌ها و رسانش، نوسانی بوده و خارج آن، رفتار رسانش نمایی یا تونل‌زنی است. در خارج از پنجره انرژی بسیار، تغییرات چگالی حالت‌ها برحسب انرژی مستقل از اندازه بسیار است. در مورد منحنی رسانش در ناحیه تشدید افزایش اندازه بسیار اندازه

که در آن تابع گرین بسیار منزوی و  $G_{L(R)}$  تابع گرین هادی چپ (راست) است.

می‌توان ضریب عبور الکتریکی و چگالی حالت‌ها (DOS) را بر حسب آخرین عنصر سطر اول ماتریس تابع گرین سامانه،

$$(G_P)_{\lambda,N}, \text{ به ترتیب توسط روابط زیر بیان کرد [۱۷-۱۹]}$$

$$T(\varepsilon) = 4 \text{Im} \sigma_L \text{Im} \sigma_R |(G_P)_{\lambda,N}|^2, \quad (7)$$

و

$$\text{DOS}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \left. \frac{\partial \ln (G_P)_{\lambda,N}}{\partial \varepsilon'} \right|_{\varepsilon'=\varepsilon}. \quad (8)$$

که در رابطه (۷)  $\sigma_{L(R)}$  خود انرژی بسیار به دلیل اتصال با هادی چپ (راست) بوده و دارای شکل زیر است [۱۵ و ۱۹]

$$\sigma_{L(R)} = \frac{\beta_{PL(R)}^2}{\beta_L} \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_{L(R)}}{2\beta_L} + \sqrt{\left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_{L(R)}}{2\beta_L} \right)^2 - 1} \right), \quad (9)$$

با فرض مشابه بودن هادی‌ها و اتصال‌های سمت چپ و راست  $\sigma_L = \sigma_R$  خواهد بود که از این پس از نوشتن اندیس  $L$  و  $R$  برای آن خودداری می‌کنیم. با نگاهی به روابط (۷) و (۸) می‌توان فهمید که برای ارائه فرمول‌بندی تحلیلی مسئله نیاز به شکل تحلیلی عنصر  $(G_P)_{\lambda,N}$  است. بدین منظور از رهیافت ذکر شده در مرجع [۲۰] استفاده می‌کنیم و داریم

$$(G_P)_{\lambda,N} = \frac{(1 - \delta^2)^{(N-1)/2}}{\beta_C \tilde{D}_N(\varepsilon, \sigma)}, \quad (11)$$

که در آن  $\tilde{D}_N(\varepsilon, \sigma)$  دترمینان وارون ماتریس تابع گرین بسیار در حضور هادی‌ها است و به کمک بسط تابع دترمینان به ازای  $N$ ‌های فرد به شکل زیر بیان می‌شود

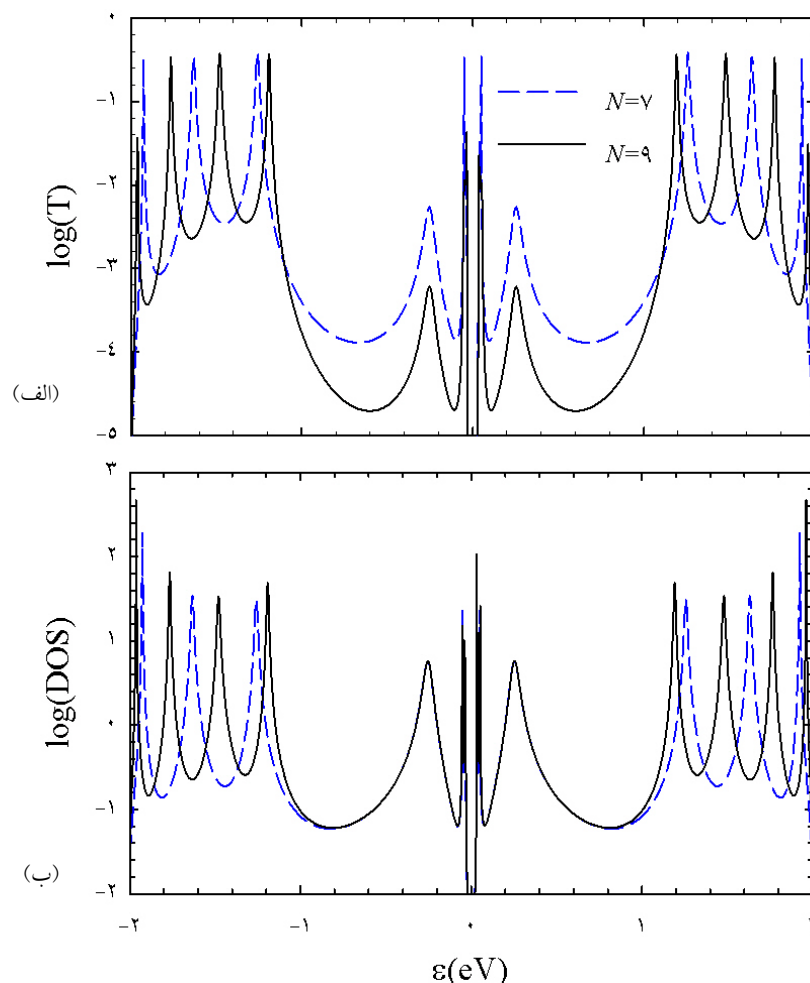
$$\begin{aligned} (\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_C) \tilde{D}_N(\varepsilon, \sigma) &= ((\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_C) - 2\sigma) D_N(\varepsilon) \\ &+ \sigma \left( \sigma(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_C) - 2(1 + \delta^2) \right) D_{N-2}(\varepsilon), \end{aligned} \quad (12)$$

که در آن  $D_N$  دترمینان وارون ماتریس تابع گرین یک بسیار منزوی به طول  $N$  است و با رابطه زیر داده می‌شود [۲۰]

$$D_N(\varepsilon) = \frac{(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_C)(1 - \delta^2)^{(N-1)/2} \sin[(N+1)\phi/2]}{\beta_C \sin(\phi/2)}, \quad (13)$$

که در آن

$$\cos \phi = \frac{(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_C)^2 - 2\beta_C^2(1 + \delta^2)}{2\beta_C^2(1 - \delta^2)}$$

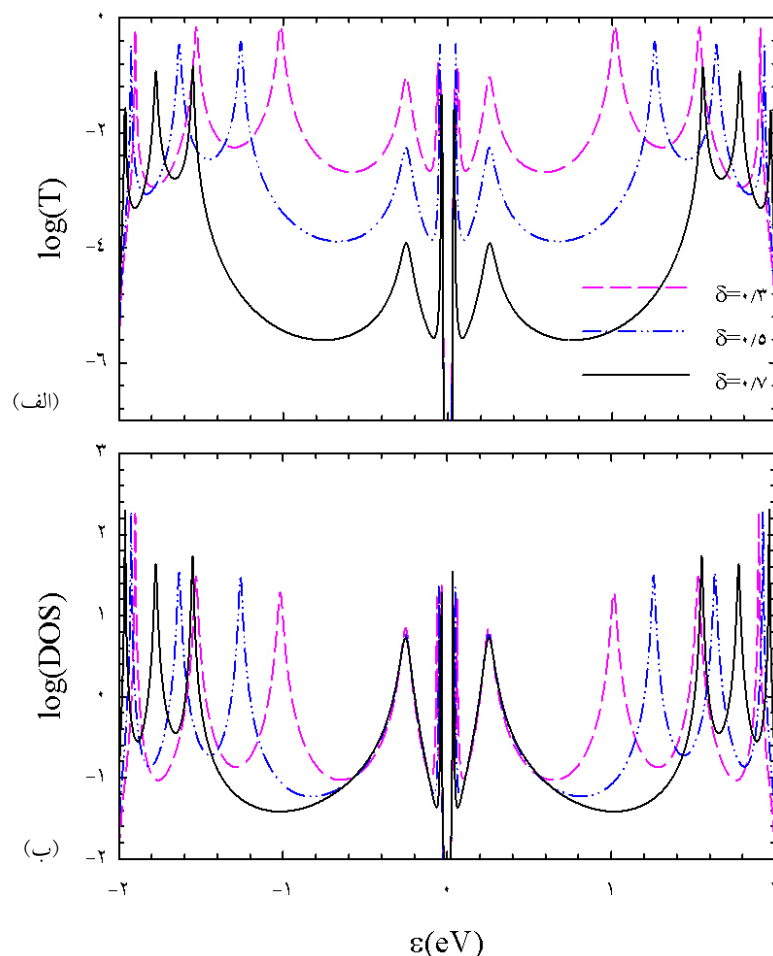


شکل ۲. (الف)  $\log(T)$  و (ب)  $\log(\text{DOS})$  بر حسب انرژی الکترون ورودی برای پلی‌استیلن-مانند دو طول متفاوت ( $N=2n+1=7,9$ ) که متصل به دو سیم همگن و مشابه است. در اینجا همه انرژی‌های جایگاهی برابر صفر در نظر گرفته شده است. انرژی پرش برای نیم‌سیم‌ها برابر  $\beta_{L(R)} = 1\text{eV}$ ، انرژی پرش برای بسیار:  $4\beta_{CH} = \beta_C = 1\text{eV}$ ، انرژی پرش بین دو جایگاه  $z$  و  $z+1$  به صورت  $1/2(-1)^z$  و جمله انرژی پرش بین نیم‌سیم‌ها و بسیار  $0.25\text{eV}$  هستند.

میانی، انرژی جایگاهی بهنجار شده اتم کربن به بی‌نهایت میل می‌کند.

در این قسمت سعی بر این است که با در نظر گرفتن انرژی‌های پرش متفاوت برای پیوندهای یگانه و دوگانه (قدرت دوپارش)، رسانش را بررسی کنیم. نمودارهای شکل ۳ (الف) و (ب) تغییرات  $\log T$  و  $\log(\text{DOS})$  را بر حسب انرژی الکترون ورودی برای دو مقدار مختلف قدرت دوپارش ( $\delta$ )، برای یک بسیار

قله‌های تشدید را کاهش نداده و فقط تعداد آنها زیادتر می‌کند. مشاهده می‌شود که هرچه طول بسیار بیشتر شود رسانش تونل‌زنی در ناحیه گاف کمتر می‌شود. این نمودار دارای سه گاف انرژی است، گاف میانی به دلیل ساختار شانه-مانند بسیار و گاف‌های سمت راست و چپ به دلیل ساختار متناوب این دستگاه است. بدیهی است با قرار دادن مقدار صفر برای انرژی پرش پیوند کربن-هیدروژن گاف مرکزی در دو گاف دیگر محو شده و بسیار تنها یک گاف از خود نشان می‌دهد. تونل‌زنی در گاف میانی بسیار ضعیف‌تر از دو گاف سمت راست و چپ است زیرا حول انرژی صفر در گاف



شکل ۳. (الف)  $\log(T)$  و (ب)  $\log(DOS)$  برحسب انرژی الکترون ورودی برای یک بسیار پلی‌استیلن-مانند شامل هفت اتم کربن و متصل به دو هادی فلزی ایده‌آل برای چند مقدار متفاوت قدرت دوپارش ( $\delta = 0.3, 0.5, 0.7$ ). در اینجا همه انرژی‌های جایگاهی برابر صفر در نظر گرفته شده است. انرژی پرش برای نیم‌سیم‌ها برابر واحد ( $\beta_{L(R)} = 1\text{eV}$ )، انرژی پرش برای بسیار:  $\beta_{CH} = \beta_C = 4\text{eV}$ ، و جمله انرژی پرش بین نیم‌سیم‌ها و بسیار  $0.25\text{eV}$  است.

پلی‌استیلن-مانند شامل هفت اتم کربن نشان می‌دهد. نمودارها دارای سه گاف در طیف خود هستند که گاف مرکزی به دلیل ساختار شانه-مانند و دو گاف کناری به علت وجود تناوب در انرژی‌های پرش است، به همین دلیل تغییر قدرت دوپارش تنها بر اندازه دو گاف کناری تأثیر خواهد گذاشت. با افزایش مقدار قدرت دوپارش از  $0.3$  به  $0.7$ ، درون این گاف‌ها تونل‌زنی الکترون سخت‌تر می‌شود. همچنین ناحیه تشدید دارای قله‌های تیزتری می‌شود.

نانوساختار شانه-مانند با انرژی پرش متناوب در شاخه اصلی (پلی‌استیلن)، سه گاف انرژی مشاهده شد که گاف میانی به علت ساختار شانه-مانند این بسیار بوده و رسانش در این منطقه به صفر می‌رسد و دو گاف سمت راست و چپ به علت وجود پیوندهای یگانه و دوگانه به صورت متناوب (دوپارش) در این بسیار است که با افزایش قدرت دوپارش گاف‌های وسیع‌تر و عمیق‌تری در طیف رسانش مشاهده شد و همچنین قله‌های منطقه تشدید تیزتر شدند. با افزایش طول بسیار رسانش تونل‌زنی تضعیف شد، ولی چگالی حالت‌ها در خارج پنجره انرژی با افزایش طول بسیار هیچ تغییری نمی‌کند.

در طیف رسانش و چگالی حالت‌ها برحسب انرژی برای

شهرکرد قدردانی می شود.

بدین وسیله از حمایت‌های مالی معاونت پژوهشی دانشگاه

11. W P Su, J R Schrieffer and A J Heeger, *Phys. Rev. Lett.* **42** (1979) 1698.
12. C Joachim and J F Vinuesa, *Europhys. Lett.*, **33** (1996) 635.
13. R Landauer, *Phys. Lett. A* **85** (1981) 91.
۱۴. م. مردانی، ح. ربانی و آ. اسماعیلی، کنفرانس فیزیک ایران ۱۳۸۹ (۲۸۲۸).
15. S Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", Cambridge University Press, Cambridge (1997).
16. P A Lee and D S Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **47** (1981) 882.
17. D S Fisher and P A Lee, *Phys. Rev. B* **35** (1987) 979.
18. P D Kirkman and J B Pendry, *J. Phys. C* **17** (1984) 4327.
19. M Mardaani, H Rabbani and A Esmaeili, *Solid State Commun.* **151** (2011) 928.
20. M Mardaani and K Esfarjani, *Chem. Phys.* **317** (2005) 43.
21. D Nozaki, H M Pastawski and G Cuniberti, *New J. Phys.* **12** (2010) 063004.
1. G Cuniberti, G Fagas and K Richter, "Introducing Molecular Electronics", Berlin and Heidelberg: Springer (2005).
2. L De Cola, "Molecular Wires: From Design to Properties", Berlin Heidelberg: Springer (2005).
3. Y Calev, H Cohen, G Cuniberti, A Nitzan and D Porath, *Isr. J. Chem.* **44** (2004) 133.
4. N D Lang, *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997) 1357.
5. E Shapir, J Yi, H Cohen, A Kotlyar, G Cuniberti and D Porath, *J. Phys. Chem. B* **109** (2005) 14270.
6. C K Chiang, C R Fincher Jr, Y W Park, A J Heeger, H Shirakawa, E-J Louis, S C Gau and A G MacDiarmid, *Phys. Rev. Lett.* **39** (1977) 1098.
7. C K Chiang, M A Dury, S C Gau, A J Heeger, E-J Louis, A G MacDiarmid, Y W Park and H Shirakawa, *J. Am. Chem. Soc.* **100** (1978) 1013.
8. D Nozaki, H M Pastawski and G Cuniberti, *New Journal of Physics* **12** (2010) 063004.
9. Y Cui, Q Wei, H Park and C M Lieber, *Science* **293** (2001) 1289.
10. H Shirakawa, E J Louis, A G MacDiarmid, C K Chiang and A J Heeger, *J.C.S. Chem. Comm.* **16** (1977) 578.