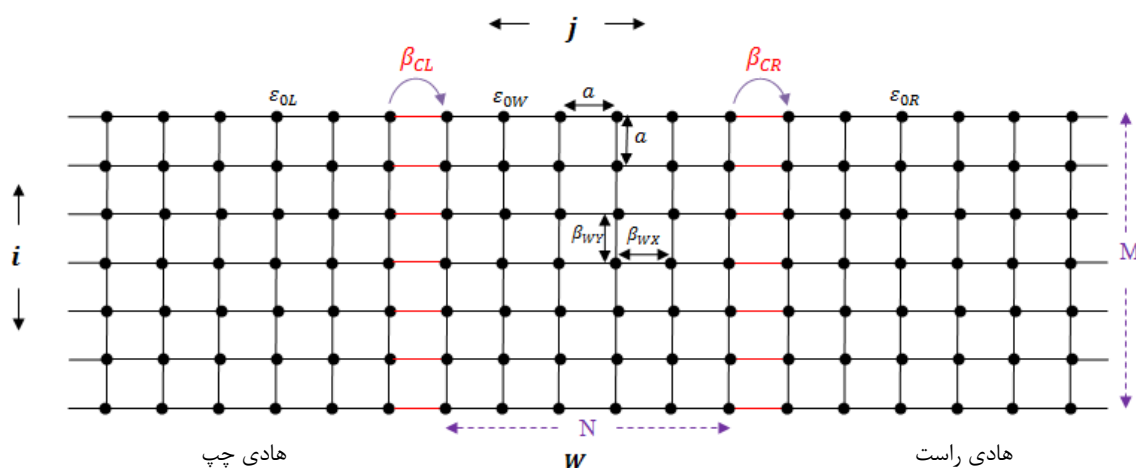


rabani-h@sci.sku.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۹۰/۱۰/۲۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۱/۲/۲۳)

و [۱۸]. همچنین بررسی ساختار الکترونی نانولوله‌های از جنس Br توسط روش‌های ابتدا به ساکن، ساختار بهینه روی سطح جانبی آن را شبکه مربعی و لوزی پیشنهاد می‌کند [۱۹ و ۲۰]. در این تحقیق، ضریب عبور الکترونی یک نانولوله تک دیواره نوعی را که از لوله کردن یک ورقه با ساختار شبکه مربعی ساخته شده است، در دو نوع دست‌گردی مربعی و لوزی، در رژیم پاسخ خطی بررسی می‌کنیم. همچنین پس از محاسبه ضریب عبور، اثر عوامل مختلف بر روی رفتار رسانندگی این نانولوله‌ها بررسی می‌شود. در نوشتن هامیلتونی سامانه نیز، از رهیافت بستگی قوی در تقریب نزدیک‌ترین همسایه استفاده می‌کنیم [۲۱]. محاسبه ضریب عبور سامانه‌های مورد بررسی با توجه به فرمول لاندائور [۲۲]، که بیان‌کننده یک رابطه خطی میان رسانش و ضریب عبور است و با استفاده از روش تابع گرین [۲۳] انجام خواهد شد.

معروف‌ترین نانولوله‌ها نانولوله‌های کربنی هستند که دیواره‌های آنها از شش‌گوش‌های کربنی، با همان ترتیب موجود در لایه‌های شش‌گوشی گرافنی، تشکیل شده است. اصول اولیه تعیین هندسه نانولوله‌های کربنی ایده‌آل به طور مفصل در مقاله‌ها شرح داده شده است [۱]. در این میان، خواص الکترونی نانولوله‌های کربنی تک دیواره و نیز کاربرد آنها در صنعت الکترونیک بسیار مورد توجه است [۲-۱۵]. علاوه بر نانولوله‌های کربنی، انواعی از نانولوله‌های معدنی (غیر آلی) نیز با آرایش اتمی شش‌گوشی وجود دارد [۱۶]. ساختارهای لوله‌ای تک دیواره مبنی بر لایه‌های غیر شش‌گوشی نیز بررسی می‌شوند. به تازگی، ویلسون و همکاران شرح مفصلی از دسته‌بندی و پایداری نانولوله‌های مبنی بر شبکه مربعی ارائه داده‌اند. این شرح مربوط به نانولوله‌های دارای ترکیب  $MX$  ( $M$  معادل فلز قلیایی و  $X$  معادل هالوژن) است [۱۷]



شکل ۱. سامانه متصل.  $i$  و  $j$  به ترتیب، معرف مکان اتم‌ها در راستای عمود و افق هستند.  $\epsilon_{0L(R)}$  و  $\epsilon_{0W}$  به ترتیب انرژی جایگاهی ناحیه‌های مرکزی و هادی چپ (راست)،  $\beta_{WX}$  و  $\beta_{WY}$  انتگرال‌های پرش ناحیه وسط در راستای طولی و عرضی و به همین ترتیب برای هادی‌های چپ (L) و راست (R) و  $\beta_{CL(R)}$  انتگرال پرش اتصال چپ (راست) هستند.  $a$  ثابت شبکه است.

$$(\epsilon - \epsilon_{\alpha_0})\psi_{i,j} - \beta_{\alpha X}(\psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1}) - \beta_{\alpha Y}(\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j}) = 0, \quad (1)$$

که در آن  $\alpha = W$ ،  $j \in \{-\infty, \dots, 0\}$  برای  $\alpha = L$  و  $j \in \{1, \dots, N\}$  برای  $\alpha = R$  است. همچنین  $\beta_{\alpha X(Y)}$  انرژی پرش در راستای افقی (عمودی) است. با لوله کردن شبکه مربعی، نانو لوله مورد نظر حاصل می‌شود که با استفاده از شرایط مرزی دوره‌ای در این راستا داریم

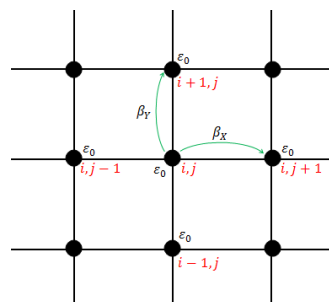
$$\psi_{i+1,j} = \psi_{i,j} e^{ik_{\alpha Y} a}, \quad \psi_{i-1,j} = \psi_{i,j} e^{-ik_{\alpha Y} a}, \quad (2)$$

که در آن،  $k_{\alpha Y}$  مؤلفه بردار موج در راستای عمود است و به صورت  $m = 0, 1, \dots, M-1$  و  $k_Y = 2\pi m / Ma$  معین می‌شود. پس از جایگذاری روابط (۲) در معادله (۱) و اندکی ساده‌سازی خواهیم داشت

$$(\epsilon - \epsilon_{\alpha_0} - 2\beta_{\alpha Y} \cos k_Y a)\psi_{i,j} - \beta_{\alpha X}(\psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1}) = 0, \quad (3)$$

معادله فوق مشابه معادله مربوط به یک زنجیره خطی [۲۴] است، با این تفاوت که انرژی‌های جایگاهی آن به صورت تابعی از عدد کوانتومی  $m$  تغییر می‌کنند، یعنی

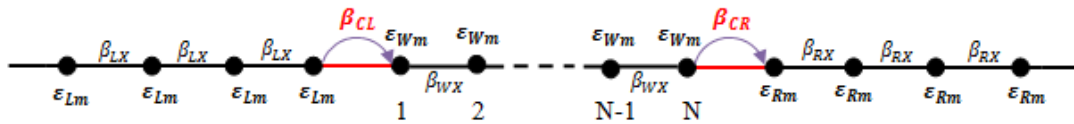
$$\epsilon_0 \rightarrow \epsilon_{\alpha m} = \epsilon_{\alpha_0} + 2\beta_{\alpha Y} \cos\left(\frac{2\pi m}{M}\right).$$



شکل ۲. قسمتی از شبکه مربعی (دو بعدی) ایده‌آل از نمای نزدیک.

سامانه با ساختار شبکه مربعی شکل ۱ را در نظر بگیرید. این سامانه از سه ناحیه مجزا تشکیل شده است که با جمله‌های پرش  $\beta_{CL}$  (چپ) و  $\beta_{CR}$  (راست) به هم اتصال یافته‌اند. این نواحی عبارت‌اند از: ناحیه مرکزی ( $W$ ): یک شبکه مربعی با ابعاد محدود که تعداد اتم‌های آن در راستای طولی و عرضی به ترتیب  $N$  و  $M$  است. هادی‌ها: هادی‌های چپ و راست نیز شبکه‌های مربعی نیمه نامتناهی هستند. در هر سه ناحیه مذکور،  $a$  ثابت شبکه است.

اتم  $ij$  را در یک شبکه مربعی ایده‌آل، (که  $N \rightarrow \infty$ ) در نظر می‌گیریم، مطابق شکل ۲ این اتم با چهار اتم همسایه (همسایه‌های اول) برهم‌کنش دارد. برای اتم مذکور با در نظر گرفتن تقریب نزدیکترین همسایه‌ها می‌توان نوشت



شکل ۳. زنجیره خطی  $m$  با انرژی جایگاهی  $\epsilon_{Wm}$ . با توجه به مقادیر گسسته  $M$  زنجیره خطی همانند شکل خواهیم داشت که انرژی‌های جایگاهی آنها به ترتیب برابر با عناصر مجموعه  $\{\epsilon_{W0}, \epsilon_{W1}, \dots, \epsilon_{W(M-1)}\}$  است.

که در آن  $\Phi_{Wm} = \cos^{-1}[(\epsilon - \epsilon_{Wm}) / \sqrt{2}\beta_{WX}]$  خود انرژی‌های ناشی از حضور هادی‌ها در سامانه متصل شکل ۳ به صورت

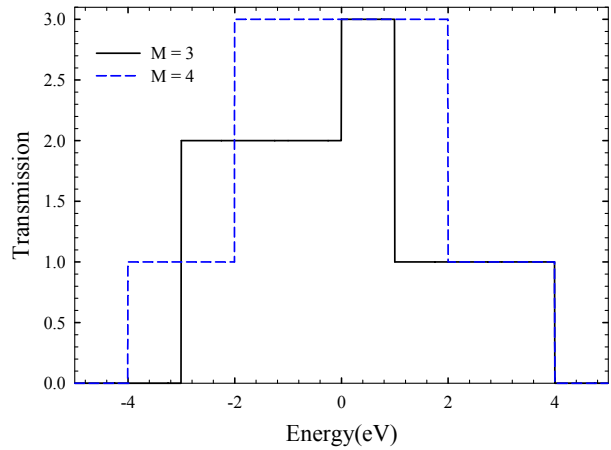
زیر به دست می‌آیند [۲۷]

$$\Sigma_{L(R)m} = \frac{\beta_{CL(R)}^*}{\beta_{L(R)X}} \left[ \frac{\epsilon - \epsilon_{L(R)m}}{\sqrt{2}\beta_{L(R)X}} + \sqrt{\left( \frac{\epsilon - \epsilon_{L(R)m}}{\sqrt{2}\beta_{L(R)X}} \right)^2 - 1} \right]. \quad (۷)$$

و در آخر ضریب عبور کل برای همه مدها به صورت زیر به دست می‌آید

$$T(\epsilon) = \sum_{m=0}^{M-1} T_m. \quad (۸)$$

بنابراین می‌توان در گام بعد به بررسی رفتار رسانش پرداخت.



شکل ۴. نمودار ضریب عبور یک نانو لوله ایده‌آل با شبکه مربعی برای  $M=4$  (زوج) و  $M=3$  (فرد).

بنابراین در این مرحله مسئله نانو لوله با شبکه مربعی را به مسئله  $M$  زنجیره خطی با انرژی‌های جایگاهی وابسته به  $m$  تبدیل کرده‌ایم (شکل ۳).

می‌دانیم که ضریب عبور برای سامانه شکل ۳ با رابطه زیر به دست می‌آید [۲۵]

$$T_m(\epsilon) = 4 \text{Im}(\Sigma_{Lm}) \text{Im}(\Sigma_{Rm}) |G_{N,m}|^2, \quad (۴)$$

که در آن  $\Sigma_{L(R)}$  خود انرژی ناشی از حضور هادی چپ (راست) و  $G_{N,m}$  عنصر مربوط به سطر اول و ستون  $N$  ماتریس گرین سامانه متصل است. عبارت‌های مذکور به عدد کوانتومی  $m$  وابسته هستند. و یا به عبارت دیگر به صورت

$$T_m(\epsilon) = \frac{4 \text{Im}(\Sigma_{Lm}) \text{Im}(\Sigma_{Rm})}{\beta_{WX}^* |\tilde{D}_N^m|^2}, \quad (۵)$$

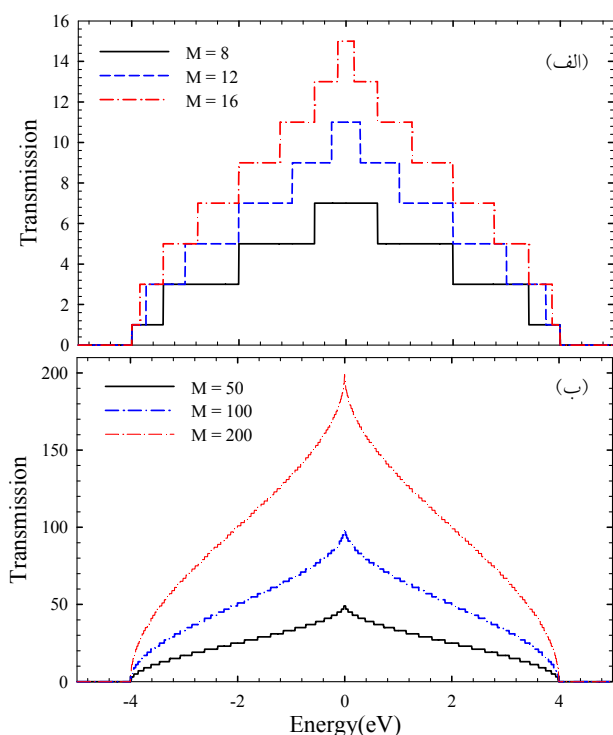
است، که در آن  $\tilde{D}_N^m$  دترمینان وارون ماتریس تابع گرین سامانه مرکزی در حضور هادی‌ها است و با رابطه زیر به دست می‌آید [۲۶]

$$\tilde{D}_N^m = \frac{\sin(N+1)\Phi_{Wm} - \frac{\Sigma_{Lm} + \Sigma_{Rm}}{\beta_{WX}}}{\sin \Phi_{Wm}} + \frac{\sin N\Phi_{Wm} + \frac{\Sigma_{Lm}\Sigma_{Rm}}{\beta_{WX}^*} \frac{\sin(N-1)\Phi_{Wm}}{\sin \Phi_{Wm}}}{\sin \Phi_{Wm}}, \quad (۶)$$

در این بخش به محاسبه ضریب عبور نانو لوله مورد بحث پرداخته و اثر عواملی همچون اندازه، نقص‌های شبکه‌ای متقارن، اعمال ولتاژ و غیره را بر روی رفتار رسانندگی آن بررسی می‌کنیم. ابتدا به بررسی زوج یا فرد بودن تعداد اتم‌ها در راستای عمود بر لوله پرداخته، پس از آن به ترتیب اثر اندازه و قطر آن، اثر انرژی‌های پرش و اثر یک یا دو نقص شبکه‌ای را مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

$M$

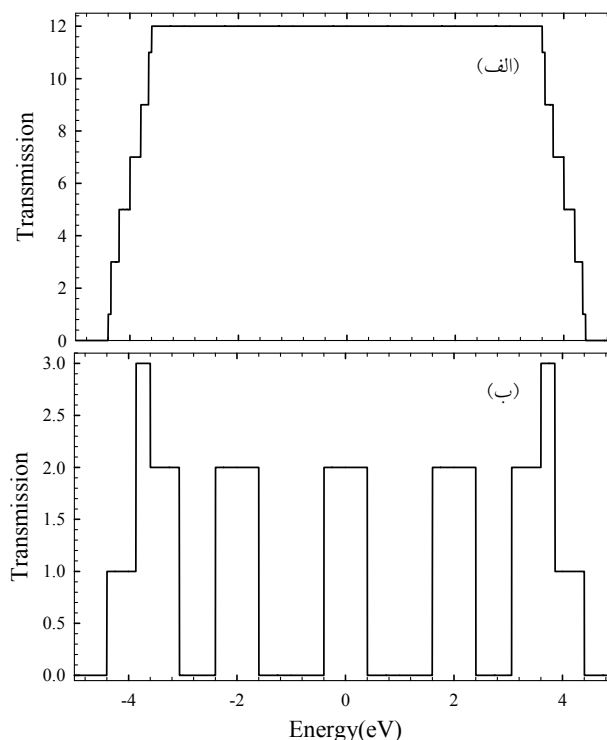
با قرار دادن همه مقادیر انرژی‌های جایگاهی برابر با صفر و همچنین تمام انرژی‌های پرش (از جمله انرژی پرش اتصال‌ها) برابر با یک الکترون-ولت در پیکربندی شکل ۱ یک نانو لوله ایده‌آل حاصل خواهد شد که نمودار ضریب عبور آن به صورت پله‌ای است و در شکل ۴ برای دو مورد  $M$  فرد و زوج ترسیم شده است. مشاهده می‌شود که نمودار ضریب عبور برای



شکل ۶. نمودار ضریب عبور یک نانولوله ایده‌آل با شبکه مربعی برای چند قطر مختلف ( $M$ ).  $M$ ها در (الف) کوچک و در (ب) بزرگ انتخاب شده است (حالت حدی شبکه دو بعدی).

در اینجا به بررسی اثر اندازه و قطر بر خواص ترابرد نانولوله ایده‌آل مربعی می‌پردازیم. شکل ۶-الف نشان می‌دهد که با افزایش قطر، رسانش افزایش می‌یابد زیرا کانال‌های بیشتری برای ترابرد در دسترس خواهند بود. در حد قطرهای بسیار بزرگ، به خواص ترابرد شبکه دو بعدی، برای صفحه مربعی، نزدیک می‌شویم (شکل ۶-ب).

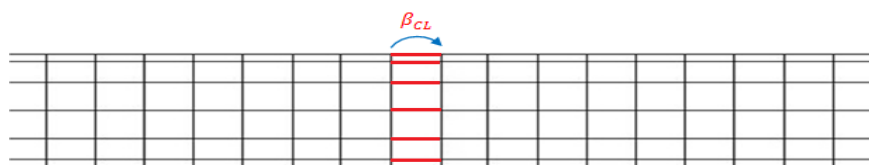
در این بخش، با متفاوت قرار دادن مقدار انرژی پرش یکی از اتصال‌ها (مثلاً چپ) از بقیه انرژی‌های پرش در کل سامانه مطابق شکل ۷ به بررسی خواص تراپردی نانولوله با ساختار شبکه مربعی در حضور یک نقص پیوندی متقارن می‌پردازیم. در شکل ۸ نمودارهای ضریب عبور برای یک نانولوله که تمام انرژی‌های پرش و جایگاهی آن به ترتیب برابر با یک و صفر الکترون-ولت است، در حالت ایده‌آل و در دو مورد



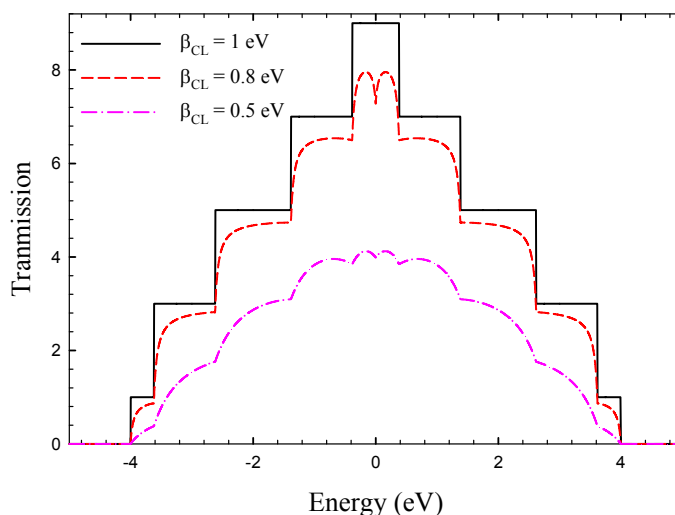
شکل ۵. نمودار ضریب عبور یک نانولوله با شبکه مربعی با  $M=12$  در حالت حدی (الف)  $(\beta_x / \beta_y) = 10$  و (ب)  $(\beta_y / \beta_x) = 10$ .

مورد زوج، متقارن و برای مورد فرد نامتقارن است. همچنین بیشینه عبور برای مورد زوج و فرد به ترتیب برابر با  $M-1$  و  $M$  است. محاسبات نشان می‌دهد که برای مورد ایده‌آل وقتی  $\beta_{\alpha X} = \beta_{\alpha Y}$  نانولوله با شبکه مربعی رسانا است زیرا هیچ گافی در نمودارهای رسانش مشاهده نمی‌شود.

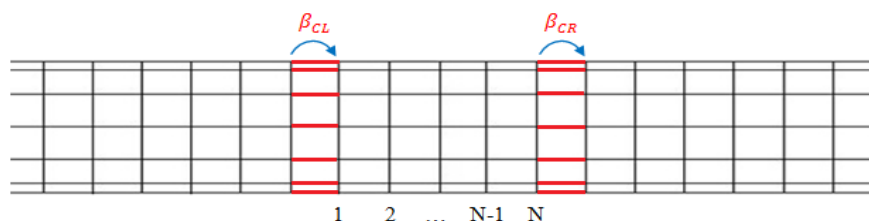
حالتی که مقدار انرژی پرش در راستای افق نسبت به مقدار آن در راستای عمود بزرگتر (مثلاً ده برابر) باشد (شکل ۵-الف برای  $M=12$ ) در این حالت کانال‌های رسانش مربوط به هر مد، با تقویت اثر یکدیگر به طور عمده در یک بازه انرژی مشترک رخ می‌دهند. بنابراین تقریباً در تمام انرژی‌ها، به استثنای محدوده‌های کوچک انرژی در ابتدا و انتهای پنجره مجاز انرژی، ترابرد الکترونی بیشینه خواهیم داشت. در شکل ۶-ب نیز برای یک مورد که  $M=12$  است، مقدار انرژی پرش در راستای افق را نسبت به مقدار آن در راستای عمود، کوچکتر - یک دهم برابر - انتخاب شده است. مشاهده می‌شود در نمودار ضریب عبور کانال‌های رسانش تفکیک شده و یا به عبارتی باعث ایجاد چند گاف در طیف رسانش گشته‌اند.



شکل ۷. نانو لوله با ساختار شبکه مربعی در حضور یک نقص پیوندی متقارن.



شکل ۸. نمودار ضریب عبور یک نانو لوله ایده‌آل با ساختار شبکه مربعی (خط پر) و در حضور یک نقص شبکه‌ای متقارن برای چند مقدار مختلف:  $\beta_{CL} = 0.5 \text{ eV}$  و  $\beta_{CL} = 0.8 \text{ eV}$ .



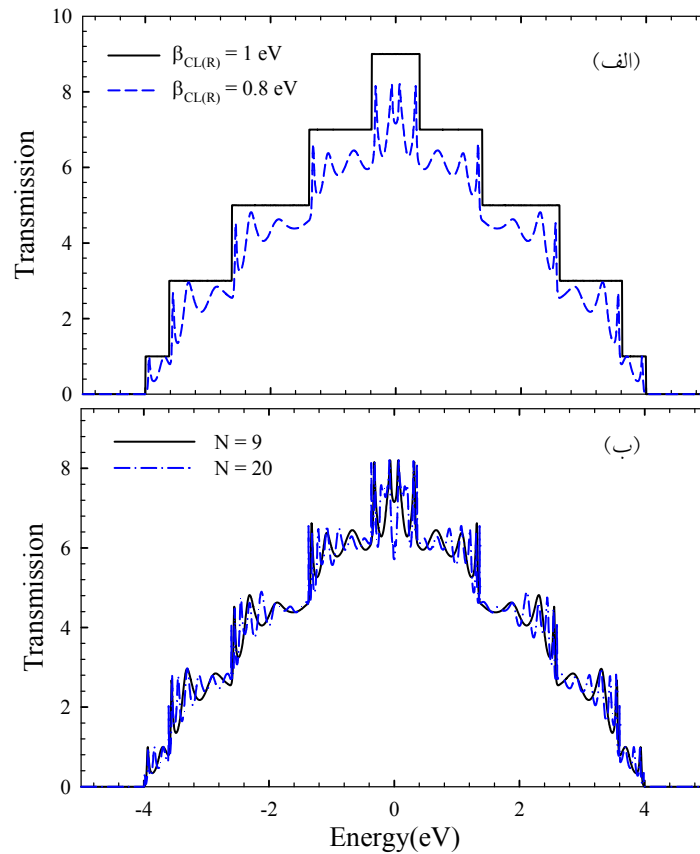
شکل ۹. نانو لوله با ساختار شبکه مربعی در حضور دو نقص پیوندی متقارن.

خواهد شد. این دو نقص به فاصله  $N$  اتم در راستای طولی از هم قرار گرفته‌اند. ابتدا با در نظر گرفتن  $\beta_{CL(R)} = 0.8 \text{ eV}$  و  $N = 9$ ، نمودار ضریب عبور در مقایسه با حالت ایده‌آل در شکل ۱۰-الف رسم شد. مشاهده می‌شود که در حضور نقص‌ها، ترابرد در هر کانال کاهش یافته و به صورت نوسانی خواهد بود. با افزایش فاصله بین دو نقص، بر تعداد این نوسان‌ها و تیزی نمودارها افزوده می‌شود (شکل ۱۰-ب).

در ادامه به محاسبه و بررسی ضریب عبور الکترونی یک نانو لوله نوعی تک دیواره با شبکه لوزی می‌پردازیم.

حضور نقص پیوندی متقارن با انرژی پرش  $0.8 \text{ eV}$  و  $0.5 \text{ eV}$  با هم مقایسه شده است. با توجه به نمودار در می‌یابیم که ایجاد یک نقص پیوندی متقارن در شبکه نانو لوله، رسانش کاهش یافته و مقدار آن در هر کانال رسانش کمتر از رسانش حالت ایده‌آل خواهد بود. با افزایش قدرت انرژی پرش نقص، رسانش کاهش بیشتری یافته، اما تقارن نمودار همچنان حفظ می‌شود.

مطابق شکل ۹ با تغییر انرژی‌های پرش اتصال‌های چپ و راست، دو نقص پیوندی متقارن در شبکه نانو لوله ایده‌آل ایجاد



شکل ۱۰. (الف) نمودار ضریب عبور یک نانو لوله ایده آل با ساختار شبکه مربعی (خط پر) و در حضور دو نقص شبکه ای متقارن  $\beta_{CL(R)} = 0.8 \text{ eV}$ . (ب) در این قسمت مانند نمودار قبلی برای دو فاصله متفاوت بین دو نقص شبکه ای متقارن رسم شده است.

شبکه لوزی نیمه نامتناهی به عنوان هادی های چپ ( $L$ ) و راست ( $R$ ) محدود شده است.

یکایاخته  $ij$  را در شبکه ایده آل، مطابق شکل ۱۱ در نظر می گیریم؛ همان گونه که در شکل دیده می شود این یکایاخته در تقرب نزدیکترین همسایه با شش اتم همسایه برهم کنش دارد.

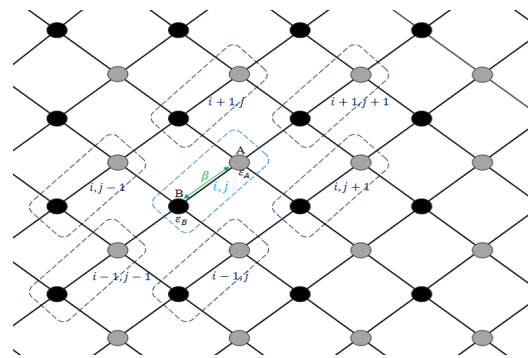
برای اتم های  $A$  و  $B$  درون یکایاخته مذکور داریم

$$(\varepsilon - \varepsilon_A)\psi_{ij}^{(A)} - \beta(\psi_{ij}^{(B)} + \psi_{i,j+1}^{(B)} + \psi_{i+1,j+1}^{(B)} + \psi_{i+1,j}^{(B)}) = 0, \tag{9}$$

و

$$(\varepsilon - \varepsilon_B)\psi_{ij}^{(B)} - \beta(\psi_{ij}^{(A)} + \psi_{i-1,j}^{(A)} + \psi_{i-1,j-1}^{(A)} + \psi_{i,j-1}^{(A)}) = 0. \tag{10}$$

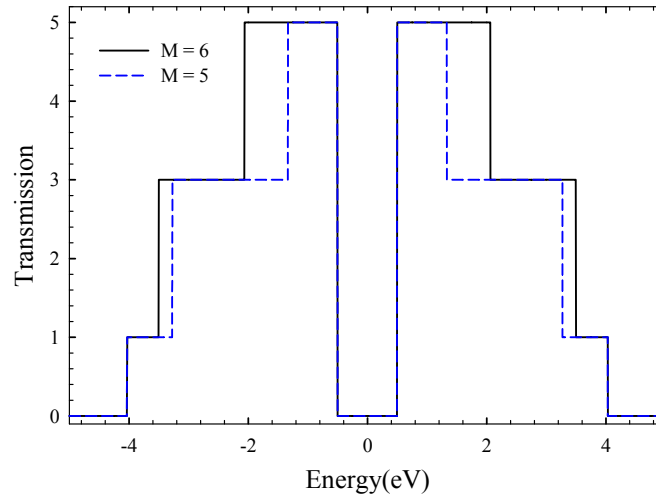
که در آن انرژی جایگاهی اتم  $A$  ( $B$ ) است. برای سادگی ضریب  $\alpha$  که مشخص کننده ناحیه مرکزی و هادی ها است را حذف کرده ایم و همچنین همه پیوندها را یکسان و



شکل ۱۱. شبکه لوزی  $A-B$ ؛ هر یکایاخته در نواحی خط چین شامل دو اتم  $A$  و  $B$  است. یکایاخته  $ij$  در برهم کنش با شش یکایاخته همسایه در شکل نشان داده شده است.

### A-B

سامانه متصل شکل ۱۱ را در نظر بگیرید؛ شبکه لوزی که ساختار آن از دو نوع اتم  $A$  و  $B$  تشکیل شده است. این ساختار مانند شکل ۱ شامل یک ناحیه مرکزی ( $W$ ) است که بین دو



شکل ۱۲. نمودار ضریب عبور یک نانو لوله ایده‌آل با ساختار شبکه لوزی  $A-B$  برای دو مورد  $M=5$  و  $M=6$ ، در اینجا  $\varepsilon_A = -\varepsilon_B = 0.5 \text{ eV}$  انتخاب شده است.

$m$  وابسته شده‌اند. ضریب عبور از همان رابطه (۸) قابل محاسبه است.

حال برای محاسبه ضریب عبور نانو لوله، تمامی انرژی‌های پرش بین اتم‌ها را برابر با یک الکترون-ولت در نظر می‌گیریم. شکل ۱۲ نمودار ضریب عبور نانو لوله ایده‌آل را برای  $M$ ‌های زوج و فرد نشان می‌دهد. در اینجا نیز نمودار به صورت پله‌های منظم بوده و نسبت به محور عمودی (عبوری از مبدأ انرژی) متقارن است. پدیده مهم قابل مشاهده در این نمودار، وجود یک گاف در طیف رسانش حول انرژی صفر است و نتیجه مهمی که از آن گرفته می‌شود این است که نانو لوله با شبکه لوزی  $A-B$  می‌تواند عایق یا نیم‌رسانا باشد. نتایج به دست آمده از بررسی اثر عوامل مختلف بر روی خواص ترابرد این نانو لوله نوعی، همانند نانو لوله با شبکه مربعی است که به دلیل تشابه و طولانی شدن مقاله از آوردن آنها خودداری می‌کنیم.

دارای انرژی پرش  $\beta$  در نظر گرفته‌ایم. با لوله کردن شبکه دو بعدی مورد بحث، یک نانو لوله حاصل می‌شود. با توجه به شرایط مرزی دوره‌ای با استفاده از قضیه بلوخ برای اتم  $B$  داریم

$$\psi_{i\pm 1, j}^{(B)} = e^{\pm ik_y a} \psi_{ij}^{(B)},$$

$$\psi_{i\pm 1, j+1}^{(B)} = e^{\pm ik_y a} \psi_{i, j+1}^{(B)}, \quad (11)$$

که در آن  $k_y = 2\pi m / Ma$  بردار موج عرضی است.  $m = 0, 1, \dots, M-1$  و  $M$  تعداد اتم‌های  $B$  در راستای عرضی است. با پیدا کردن  $\psi_{ij}^{(A)}$  از معادله (۹) و قرار دادن آن در رابطه (۱۰) می‌توان معادله‌ای شامل فقط توابع موج اتم‌های  $B$  پیدا کرد که با استفاده از روابط (۱۱) به عبارت ساده شده زیر می‌رسیم

$$(\varepsilon - \varepsilon_m) \psi_{ij}^{(B)} - \beta_m (\psi_{i, j+1}^{(B)} + \psi_{i, j-1}^{(B)}) = 0. \quad (12)$$

که در آن

$$\varepsilon_m = \varepsilon_B + \frac{\lambda \beta^2}{\varepsilon - \varepsilon_A} \cos^2 \frac{\pi m}{M},$$

$$\beta_m = \frac{\lambda \beta^2}{\varepsilon - \varepsilon_A} \cos^2 \frac{\pi m}{M}.$$

بنابراین همانند قبل، در مورد شبکه مربعی، مسئله نانو لوله با ساختار شبکه لوزی را به مسئله زنجیره‌های خطی تبدیل کردیم، با این تفاوت که در اینجا انرژی‌های پرش نیز به عدد کوانتومی

در رهیافت بستگی قوی در تقریب نزدیک‌ترین همسایه و با استفاده از روش تابع گرین، ضریب عبور را برای نانو لوله نوعی با طول بی‌نهایت با ساختار شبکه مربعی و لوزی بررسی کردیم؛ نتایج نشان می‌دهد که نمودار ضریب عبور در حالت ایده‌آل بسته به این که تعداد اتم‌های سطح مقطع عرضی، زوج یا

نتایج مشابه نانو لوله با شبکه مربعی بود، با این تفاوت که یک گاف رسانش متقارن حول انرژی صفر در نمودار مشاهده شد. نتایج حاصل از بررسی نانو لوله‌های نوعی مذکور نشان می‌دهد که نانو لوله با شبکه مربعی همواره رسانا و با شبکه لوزی  $A-B$  نیم‌رسانا یا عایق خواهد بود.

از نظر خواص رسانش و چگالی حالت‌ها، رفتار کلی برای نانولوله کربنی و نانولوله‌های با ساختار شبکه مربعی (لوزی) همخوانی دارد ولی بدیهی است که به دلیل تفاوت در نوع شبکه لانه زنبوری و مربعی (لوزی)، در جزئیات فرقه‌هایی وجود دارد. منظور از رفتار کلی وقوع گاف انرژی هر دو سامانه است که می‌تواند توسط دستگردی و اندازه قطر نانو لوله کنترل شود. هدف از این پژوهش ارائه یک فرمول‌بندی کاملاً تحلیلی و در عین حال ساده برای بررسی رسانش و خواص تراپردی نانولوله‌هایی است که قابلیت جداسازی مدهای رسانشی را به خاطر تقارن هامیلتونی دارا هستند. این رهیافت تنها برای نانولوله‌هایی که سطح جانبی آنها دارای ساختار شبکه مربعی و لوزی است، قابل اجرا است، در حالی که برای نانولوله‌های کربنی به خاطر عدم امکان تفکیک مدهای رسانشی (به دلیل وجود ساختار لانه زنبوری) امکان‌پذیر نیست.

فرد باشد، حول انرژی صفر به ترتیب متقارن یا نامتقارن است. اثر عوامل مختلف بر روی تراپرد الکترونی نانو لوله ایده‌آل مذکور بررسی شد؛ رابطه مستقیمی میان رسانش و اندازه قطر نانو لوله مشاهده شد. با افزایش قطر، تعداد کانال‌های رسانش بیشتر شده و برای قطرهای بسیار بزرگ به حد شبکه دو بعدی نزدیک می‌شویم. هر گاه مقدار انرژی پرش در راستای محور از مقدار آن در راستای عمود بر محور نانو لوله کمتر باشد اغلب کانال‌های رسانش از هم جدا شده و امکان مشاهده چند گاف در رسانش فراهم می‌شود. در حالتی که مقدار انرژی پرش در راستای محور از مقدار آن در راستای عمود بر محور نانو لوله بیشتر باشد، تقریباً تمام کانال‌ها در یک بازه انرژی همپوشانی کرده و باعث پیشینه شدن تراپرد در این بازه می‌شود.

با ایجاد یک نقص متقارن در شبکه نانو لوله با ساختار شبکه مربعی، تراپرد در هر کانال رسانش با افزایش مقدار انرژی پرش نقص کاهش می‌یابد. وجود دو نقص متقارن که به فاصله  $N$  اتم در راستای طولی، از هم ایجاد شده‌اند باعث کاهش رسانش در هر کانال می‌شود، و نیز رفتار رسانش در کانال‌ها به صورت نوسانی خواهد بود که با افزایش فاصله بین دو نقص بر تعداد و در نتیجه شدت این نوسانات افزوده می‌شود.

در بررسی نانو لوله نوعی ایده‌آل با ساختار شبکه لوزی  $A-B$

- (2004) 325.
13. A Javey, and J Kong, "Carbon nanotube electronics", Springer Science (2009).
  14. M P Anantram, and F. Leonard, *Rep. Prog. Phys.* **69** (2000) 507.
  15. M J Biercuk *et al.*, "Electrical transport in single-wall carbon nanotubes", Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2008).
  16. K D Sattler, "Handbook of Nanophysics: Nanotubes and Nanowires", CRC press (2010).
  17. C L Bishop, and M Wilson, *Molecular Physics* **106** (2008) 1665.
  18. K D Sattler, "Handbook of Nanophysics: Nanotubes and nanowires", CRC Press (2011).
  19. J Kunstmann, and A Quandt, *Phys. Rev. B* **74** (2006) 035413.
  20. J Kunstmann, and A Quandt, *Chem. Phys. Lett.* **402** (2005) 21.
  21. D Qian, W K Liu, and Q Zheng, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **197** (2008) 3291.
  1. M S Dresselhaus, G Dresselhaus, and P Avouris, "Carbon Nanotubes", Springer – Verlag Berlin, Heidelberg (2001).
  2. J W Mintmire, B J Dunlap, and C T White, *Phys. Rev. Lett.* **68** (1992) 631.
  3. N Hamada, S Sawada, and A Oshiyama, *Phys. Rev. Lett.* **68** (1992) 1579.
  4. R Saito *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **60** (1992) 2204.
  5. R Saito *et al.*, *Phys. Rev. B* **46** (1992) 1804.
  6. T W Odom *et al.*, *Nature* **391** (1998) 62.
  7. J W G Wildoer *et al.*, *Nature* **391** (1998) 59.
  8. M Ouyang, J-L Huang, C L Cheung, and C Lieber, *Science* **292** (2001) 702.
  9. M Meyyappan, "Carbon nanotubes: science and applications", Boca Raton: CRC Press, 2005.
  10. M J Biercuk *et al.*, "Electrical transport in single-wall carbon nanotubes", Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2008).
  11. H W C Postma *et al.*, *Science* **293** (2001) 76.
  12. M Terrones, *International Materials Reviews* **49**



- Nanotechnology, Technical University of Denmark (2006).
25. D S Fisher, and P A Lee, *Phys. Rev. B* **23** (1981) 6851.
26. M Mardaani, and K Esfarjani, *Physica E* **25** (2004) 119.
27. M Mardaani, H Rabani, and A Esmaeili, *Solid State Communications* **151** (2011) 928.
22. R Landauer, *Phys. Lett. A* **85** (1986) 91; R Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **32** (1988) 306; M Buttiker, *IBM J. Res. Dev.* **32** (1988) 317.
23. S Datta, *Superlattices and Microstructures* **28** (2000) 4.
24. T Markussen, “*Quantum transport calculations using wave function propagation and the Kubo formula*”, Master Thesis, MIC – Department of Micro and