

Moh.mardaani@gmail.com :

(دریافت مقاله: ۱۳۸۷/۱۲/۴ ؛ پذیرش: ۱۳۸۸/۵/۲۴)

( )

فرض کنید یک دستگاه فیزیکی مانند یک نانو تیوب تک دیواره مانند شکل ۱ که در اینجا آن را با نماد  $A$  نشان می‌دهیم، در رهیافت بستگی قوی با هامیلتونی  $H_A$  مشخص شود، برای دستگاه مذکور تابع گرین به صورت زیر تعریف می‌شود

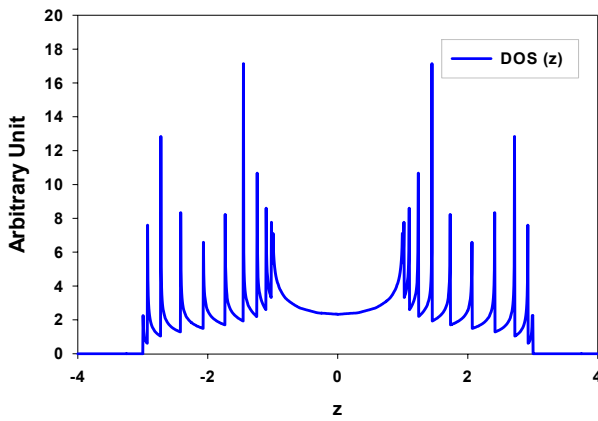
$$(zI - H_A)G_A = I, \quad (1)$$

در رابطه بالا  $z$  بیانگر انرژی،  $I$  عملگر (ماتریس) واحد و  $G_A$  نمایشگر تابع گرین است. حال فرض می‌کنیم، یک دستگاه، به صورت عام به دو زیر دستگاه  $A$  و  $B$  تقسیم شود، هامیلتونی دستگاه مذکور را به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$H = H_A + H_B + H_{AB}, \quad (2)$$

در رابطه بالا  $H_{AB}$  هامیلتونی برهم‌کنش بین دو زیر سیستم  $A$  و  $B$  است، با توجه به تعریف تابع گرین، وارون تابع گرین  $A$  در حضور  $B$ ، و وارون تابع گرین  $B$  در حضور  $A$  را

امروزه، تحقیقات تجربی و نظری گسترده‌ای در زمینه سیستم‌های نانو ساختار انجام شده است [۱-۳]، به خصوص با کوچک شدن اجزاء تشکیل دهنده وسایل الکترونیکی بررسی نانو ساختارها اهمیت فزاینده‌ای در علوم پیدا کرده است. در این مقاله برای محاسبه رسانش الکتریکی یک نانوتیوب، با استفاده از رابطه لانداور - بو تیکر که رسانش یک دستگاه کوانتومی ( $\sigma$ ) را به ضریب عبور الکترونی آن در انرژی فرمی مربوط می‌سازد  $\sigma = (2e^2/h)T(\epsilon_F)$ ، رسانش کوانتومی یک نانوتیوب را به تابع گرین آن در حضور محیط مربوط می‌کنیم، سپس به کمک این رهیافت، به محاسبه کمیت‌های مختلف فیزیکی یک نانو تیوب می‌پردازیم. به کمک این روش چگالی حالت‌ها و رسانش الکتریکی را تابع انرژی به دست می‌آوریم. بدین منظور لازم است به مطالعه رهیافت تابع گرین بپردازیم.



شکل ۲. چگالی حالت‌های الکترونی یک نانو لوله کربنی ایده‌ال. در اینجا تعداد سلول‌ها در یک سطح مقطع برابر  $N_C = 20$  است.

برای مطالعهٔ رسانش دستگاه در حضور پتانسیل متقارن (تقارن استوانه‌ای)، می‌توان تبدیل یکانی پیدا کرد که مدهای مختلف رسانش را از هم جدا نماید. و مسئله سیم کوانتومی شبه یک بعدی، به مسئله زنجیرهای یک بعدی بدون برهم‌کنش، اما با انرژی‌های جایگاهی متفاوت و وابسته به عدد کوانتومی  $m$  معرف مد، تبدیل می‌شود. بنابراین اگر هامیلتونی نانو لوله کربنی را به صورت زیر بنویسیم در این صورت در رهیافت بستگی قوی خواهیم داشت:

$$H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_i t_{i,i+1} (|i\rangle\langle i+1| + h.c.), \quad (8)$$

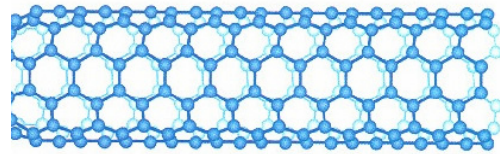
که در رابطه بالا  $\varepsilon_i = 0$  انرژی جایگاه و  $t_{i,i+1} = 1$  انرژی جهش نامیده می‌شوند؛ ضمناً برای سادگی همه پارامترها بر حسب انرژی جهش نانو تیوب بدون بعد شده‌اند.

بعد از تبدیل متعامد هامیلتونی نانولوله به هامیلتونی یک سلول دو اتمی کاهش یافته و بنابراین برای مد  $m$  ام وارون تابع گرین به صورت زیر خواهد شد [۵]

$$G_{(\pm)}^{-1}(z) = \begin{pmatrix} z - e^{+i\theta_m} & -(1 + e^{\pm ika}) \\ -(1 + e^{\pm ika}) & z - e^{-i\theta_m} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

بنابراین چگالی حالت‌های الکترونی با توجه به رابطه ۹ به صورت شکل ۲ به دست می‌آید.

با توجه به تعریف تابع گرین، وارون تابع گرین قسمت مرکزی نانو تیوب به طول  $N_z$  در حضور ناخالصی  $\varepsilon_i = \delta$  و



شکل ۱. نمایشگر یک نانو تیوب ایده‌ال.

می‌توان به صورت زیر نوشت

$$G_A^{-1}(z) = G_{A_0}^{-1}(z) - H_{AB} G_{B_0}(z) H_{AB}, \quad (3)$$

که در این رابطه  $G_{A_0}^{-1}(z)$ ،  $G_{A(B)}^{-1}(z)$ ،  $H_{AB}$  به ترتیب وارون تابع گرین زیر دستگاه  $A(B)$  در حضور زیرسیستم  $B(A)$ ، وارون تابع گرین  $A(B)$  ایزوله، و  $H_{AB}$  هامیلتونی برهم‌کنش بین دو دستگاه  $A$  و  $B$  و  $z$  معرف انرژی است. جمله دوم در رابطه بالا، خود انرژی دستگاه  $A$  در حضور دستگاه  $B$  نیز نامیده می‌شود. به عبارت دیگر عملگر خود انرژی به صورت زیر معرفی می‌شود [۴]

$$\sigma_A(z) = H_{AB} G_{B_0}(z) H_{AB}. \quad (4)$$

لازم به ذکر است که سیستم  $A$  می‌تواند از نظر فیزیکی نانو تیوب و دستگاه  $B$  می‌تواند یک نانو الکتروود، نانو تیوب با طول نسبتاً طولانی باشد. هامیلتونی کل دستگاه اعم از نانو تیوب ( $H_{NT}$ )، هامیلتونی اتصال ( $H_{LNT}$  و  $H_{RNT}$ ) و هامیلتونی نیم سیم‌های چپ و راست ( $H_L$  و  $H_R$ )، به صورت زیر مشخص می‌شود:

$$H = H_L + H_{LNT} + H_{NT} + H_{NTR} + H_R. \quad (5)$$

به کمک رابطه زیر می‌توان ضریب عبور الکترونی را به توابع گرین پیشرفته و تاخیر یافته سیم کوانتومی مربوط ساخت، به عبارت دیگر داریم

$$T(z) = Tr \left( \Gamma_L G^{(+)} \Gamma_R G^{(-)} \right), \quad (6)$$

در رابطه فوق  $G^{(\pm)}$  تابع گرین نقطه کوانتومی در حضور دو نیم سیم و  $\Gamma_{L(R)}$  که متناسب با سرعت گروه الکترون در دو نیم سیم است معرف تفاضل بخش موهومی جمله خود انرژی نقطه کوانتومی به ازای تابع گرین پیشرفته و تاخیر یافته در حضور نیم سیم چپ و راست است، این جمله را می‌توان به صورت زیر محاسبه نمود:

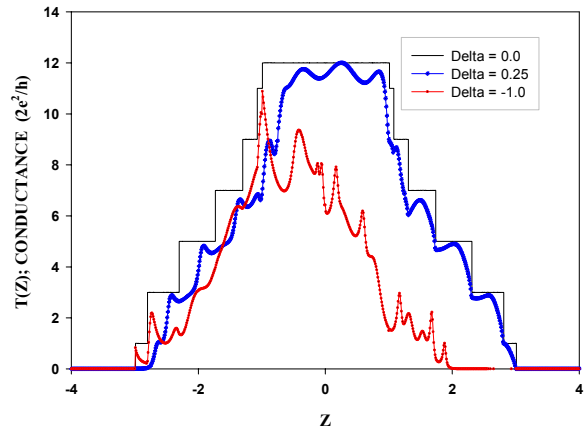
$$\Gamma_{L(R)}(z) = i \left( \sigma_{L(R)}^{(+)}(z) - \sigma_{L(R)}^{(-)}(z) \right), \quad (7)$$

کـــه در آن  $D_{N,m}(z) = \sin(N_z + 1)\phi_m / \sin \phi_m$  و  $\cos \phi_m = (y_m y_m^* - 2) / 2$  ضریب رسانش برای نانو تیوب در حضور ناخالصی به صورت جمع روی مدها خواهد بود

$$T(z) = \sum_{m=1}^{N_C} T_m(z). \quad (14)$$

شکل ۳ نمودار ضریب رسانش را برای یک نانو تیوب ایده‌ال ( $\delta = 0$ ) و یک نانو تیوب در حضور ناخالصی الکتریکی با پتانسیل یکنواخت مثبت یا منفی نشان می‌دهد ( $\delta = 0/25$  و  $\delta = -1$ ). همان‌طور که در شکل دیده می‌شود با افزایش قدرت ناخالصی علاوه بر اینکه تعداد کانال‌های رسانش کم می‌شود دامنه رسانش نیز کاهش می‌یابد. برای ناخالصی با پتانسیل مثبت و منفی پنجره انرژی به ترتیب از چپ و راست محدود می‌شود به عبارت دیگر سازوکار رسانش در ابتدا و انتهای پنجره انرژی به علت وجود پتانسیل از رزناسی به تونل زنی تبدیل می‌شود. اگر قدرت پتانسیل خارجی زیاد شود اندازه پنجره مجاز انرژی به سمت صفر میل می‌کند. به عبارت دیگر جریان عبوری از نانوتیوب خاموش خواهد شد.

در این مقاله ما رسانش الکتریکی یک نانو لوله کربنی ایده‌ال و یک نانو لوله کربنی در حضور پتانسیل خارجی یکنواخت را به کمک فرمالیزم تابع گرین رسانش این دستگاه به دست آورده‌ایم. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که در حضور پتانسیل خارجی علاوه بر محدودتر شدن ناحیه رسانش تشدید، تعداد مدهای رسانش و در نتیجه رسانش کل نیز کاهش یافته است. بستگی به ناخالصی دهنده (گیرنده) ساز و کار رسانش در ابتدا (انتهای) پنجره انرژی از تشدید به تونل زنی تبدیل خواهد شد.



شکل ۳. رسانش الکتریکی یک نانو لوله کربنی ایده‌ال و نیز یک نانو لوله کربنی در حضور پتانسیل خارجی یکنواخت است در اینجا  $N_C = 12$  و  $N_z = 10$ .

متصل به نانو تیوب‌های چپ و راست را می‌توان به صورت زیر نوشت [۶ و ۷]

$$G_m^{(-)(\pm)}(z) = \begin{pmatrix} y_m & -1 - \sigma_m & \dots & \dots & \dots \\ -1 & y_m^* & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & y_m & -1 \\ \dots & \dots & \dots & -1 - \sigma_m & y_m^* \end{pmatrix}_{(2N_z) \times (2N_z)} \quad (10)$$

که در آن  $y_m = z - \delta - \exp[2mi\pi / N_C]$ ،  $\delta$  بیانگر قدرت پتانسیل خارجی است همچنین خود انرژی سیم کوانتومی به خاطر نیم سیم چپ و راست به صورت زیر است

$$\sigma_m = \exp(i\theta_m); \quad (11)$$

$$\theta_m = \text{Arcos} (z^2 - 2 \cos(2m\pi / N_C) - 1) / 2$$

با توجه به رابطه (۶) می‌توان ضریب عبور را به صورت زیر نوشت:

$$T_m(z) = 4 \text{Im} \sigma_{L,m} \text{Im} \sigma_{R,m} |G_{\nu, N-1, m}|^2. \quad (12)$$

اگر مولفه  $G_{\nu, N-1, m}$  را در رابطه (۱۲) قرار دهیم با توجه به محاسبات مرجع [۴] خواهیم داشت:

$$T_m(z) = \frac{4 y_m y_m^* \text{Im} \sigma_{L,m} \text{Im} \sigma_{R,m}}{|D_{N,m} - (\sigma_{L,m} + \sigma_{R,m}) D_{N-2,m} + \sigma_{L,m} \sigma_{R,m} D_{N-4,m}|^2}, \quad (13)$$

4. M Mardaani and K Esfarjani, *Physica E* **25** (2004) 119.
5. M Mardaani and H Mardaani, *Physica E* **33** (2006) 147.
6. M Mardaani and A A Shokri, *Chem. Phys.* **324** (2006) 541.
7. A A Shokri and M Mardaani, *Solid State Communications* **137** (2006) 53.
1. M C Petty, M R Bryce and D Bloor, *Introduction to Molecular Electronics*, Oxford University Press, Oxford (1995).
2. P Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots*, John Wiley, New York (2000).
3. S Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press (1997).