





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

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

و ۱۸]. همچنین بررسی ساختار الکترونی نانولولـههـای از جـنس Br توسط روشهای ابتدا بـه سـاکن، سـاختار بهینـه روی سـطح جانبی آن را شبکهٔ مربعی و لوزی پیشنهاد میکند [۲۰و۱۹].

در این تحقیق، ضریب عبور الکترونی یک نانو لولهٔ تک دیوارهٔ نوعی را که از لوله کردن یک ورقه با ساختار شبکهٔ مربعی ساخته شده است، در دو نوع دستگردی مربعی و لوزی، در رژیم پاسخ خطی بررسی میکنیم. همچنین پس از محاسبهٔ ضریب عبور، اثر عوامل مختلف بر روی رفتار رسانندگی این نانو لولهها بررسی میشود. در نوشتن هامیلتونی سامانه نیز، از رهیافت بستگی قوی در تقریب نزدیکترین همسایه استفاده میکنیم [۲۱]. محاسبهٔ ضریب عبور سامانههای مورد بررسی با توجه به فرمول لانداؤر [۲۲]، که بیان کنندهٔ یک رابطهٔ خطی میان رسانش و ضریب عبور است و با استفاده از روش تابع گرین [۳۳] انجام خواهد شد. معروف ترین نانو لوله ها نانو لوله های کربنی هستند که دیواره های آنها از شش گوش های کربنی، با همان ترتیب موجود در لایه های شش گوشی گرافنی، تشکیل شده است. اصول اولیهٔ تعیین هندسهٔ نانو لوله های کربنی ایده آل به طور مفصل در مقاله ها شرح داده شده است [۱]. در این میان، خواص الکترونی نانو لوله های کربنی تک دیواره و نیز کاربرد آنها در صنعت الکترونی ک بسیار مورد توجه است [۲–10]. علاوه بر نانو لوله های کربنی، انواعی از نانو لوله های معدنی (غیر آلی) نیز با آرایش اتمی شش گوشی وجود شش گوشی نیز بررسی می شوند. به تازگی، ویلسون و همکاران شرح مفصلی از دسته بندی و پایداری نانو لوله های مبنی بر شبکهٔ مربعی ارایه داده اند. این شرح مربوط به نانو لوله های دارای است [۷]



شکل ۱. سامانهٔ متصل. $i \ e \ f$ به ترتیب، معرف مکان اتم ها در راستای عمود و افق هستند. $\omega_{0L(R)} e \ f_{0L(R)} e$ به ترتیب انرژی جایگ اهی ناحیه های مرکزی و هادی چپ (راست)، $\beta_{WX} e \ f_{WY}$ انتگرال های پرش ناحیهٔ وسط در راستای طولی و عرضی و به همین ترتیب برای هادی های چپ(L) و راست (R) و $\beta_{CL(R)}$ انتگرال پرش اتصال چپ (راست) هستند. a ثابت شبکه است.

$$(1) - \beta_{\alpha X} (\psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1}) - \beta_{\alpha Y} (\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j}) = \circ,$$

$$(1) - \beta_{\alpha Y} (\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j}) = \circ,$$

$$(1) - \beta_{\alpha Y} (\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j}) = \circ,$$

$$(1) - \beta_{\alpha Y} (\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j}) = \circ,$$

$$(1) - \alpha = R \quad \mu = N \quad$$

$$\begin{split} \psi_{i+\gamma,j} &= \psi_{i,j} e^{ik_{\alpha Y}a}, \\ \psi_{i-\gamma,j} &= \psi_{i,j} e^{-ik_{\alpha Y}a}, \end{split} \tag{(Y)}$$

که در آن، $k_{\alpha Y}$ مؤلفهٔ بردار موج در راستای عمود است و به صورت (M - 1, ..., M) و m = 0, 1, ..., M - 1 معین می شود. پس از جایگذاری روابط (۲) در معادلهٔ (۱) و اندکی سادهسازی خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \left(\varepsilon - \varepsilon_{\alpha} - \gamma \beta_{\alpha Y} \cos k_{Y} a\right) \psi_{i,j} \\ &- \beta_{\alpha X} \left(\psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1}\right) = \circ, \end{aligned} \tag{(Y)}$$

معادلهٔ فوق مشابه معادلهٔ مربوط به یک زنجیرهٔ خطی [۲۴] است، با این تفاوت که انرژیهای جایگاهی آن به صورت تابعی از عدد کوانتومی *m* تغییر میکنند، یعنی $\varepsilon_{\circ} \to \varepsilon_{\alpha m} = \varepsilon_{\alpha_{\circ}} + r\beta_{\alpha Y} \cos\left(\frac{r\pi m}{M}\right).$

$$\begin{array}{c} \varepsilon_{0} \\ \varepsilon_{0} \\ \hline \\ \rho_{Y} \\ \hline \\ \rho_{X} \\ \rho_{X}$$

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

سامانهٔ با ساختار شبکهٔ مربعی شکل ۱ را در نظر بگیرید. ایس سامانه از سه ناحیهٔ مجزا تشکیل شده است که با جملههای پرش β_{cL} (چپ) و β_{CR} (راست) به هم اتصال یافتهاند. ایس نواحی عبارتاند از: ناحیهٔ مرکزی (W): یک شبکهٔ 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 نواحیهٔ مذکور، n ثابت شبکه است.

اتم ij را در یک شبکهٔ مربعی ایـدهآل، (کـه ∞ → N) در نظر می گیریم، مطابق شکل ۲ ایـن اتـم بـا چهـار اتـم همـسایه (همسایههای اول) برهمکنش دارد. برای اتم مـذکور بـا در نظـر گرفتن تقریب نزدیکترین همسایهها میتوان نوشت



شکل ۳. زنجیرهٔ خطی *m*ام با انرژی جایگاهی *E*_{Wm}. با توجه به مقادیر گسستهٔ *M m* زنجیرهٔ خطی همانند شکل خواهیم داشت کـه انـرژیهـای جایگاهی آنها به ترتیب برابر با عناصر مجموعهٔ {*E*_{W0},*E*_{W1},...,*E*_{WM}} است.



در این بخش به محاسبهٔ ضریب عبور نانو لولهٔ مورد بحث پرداخته و اثر عواملی همچون اندازه، نقصهای شبکهای متقارن، اعمال ولتاژ و غیره را بر روی رفتار رسانندگی آن بررسی می کنیم. 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 می دهیم.

М

با قرار دادن همهٔ 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 لولهٔ 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 می شود که نمودار ضریب عبور برای



برای ۴ = M (زوج) و ۳ = M (فرد).

بنابراین در این مرحله مسئلهٔ نانو لولـه بـا شـبکهٔ مربعـی را بـه مسئلهٔ M زنجیرهٔ خطی با انرژیهـای جایگـاهی وابـسته بـه m تبدیل کردهایم (شکل ۳).

میدانیم که ضریب عبور برای سامانهٔ شکل ۳ با رابطـهٔ زیـر به دست میآید [۲۵]

$$\begin{split} T_m(\varepsilon) &= \operatorname{FIm}(\Sigma_{Lm})\operatorname{Im}(\Sigma_{Rm}) | G_{\operatorname{N},m} |^{\operatorname{F}}, \quad (\operatorname{F}) \\ & \geq \operatorname{sc}(\operatorname{Ii}(G_{\operatorname{N},m}) + \Sigma_{L(R)}) | G_{\operatorname{N},m} |^{\operatorname{F}}, \quad (\operatorname{F}) \\ & \leq \operatorname{sc}(\operatorname{Ii}(G_{\operatorname{N},m}) + \Sigma_{L(R)}) | G_{\operatorname{N},m} | G_{\operatorname{N},$$

مرکزی در حضور هادیها است و با رابطهٔ زیر به دست می آید [۲۶]

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

$$\frac{\sin N\Phi_{Wm}}{\sin\Phi_{Wm}} + \frac{\Sigma_{Lm}\Sigma_{Rm}}{\beta_{WX}^{\mathsf{v}}} \frac{\sin(N-1)\Phi_{Wm}}{\sin\Phi_{Wm}},$$
(9)



شکل ۶. نمودار ضریب عبور یک نانو لولهٔ ایـدهآل بـا شـبکهٔ مربعـی برای چند قطر مختلـف (M). Mهـا در (الـف) کوچـک و در (ب) بزرگ انتخاب شده است (حالت حدی شبکهٔ دو بعدی).

در اینجا به بروسی اثر اندازه و قطر بر خواص ترابرد نانو لولهٔ 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 شبکهٔ دو بعدی، برای صفحهٔ مربعی، نزدیک میشویم (شکل ۶-ب).

در این بخش، با متفاوت قرار دادن مقدار انرژی پرش یکی از اتصالها (مثلاً چپ) از بقیهٔ انرژیهای پرش در کل سامانه مطابق شکل ۷ به بررسی خواص ترابردی نانو لوله با ساختار شبکهٔ مربعی در حضور یک نقص پیوندی متقارن می پردازیم.

در شکل ۸ نمودارهای ضریب عبور برای یک نانو لولـه کـه تمام انرژیهای پرش و جایگاهی آن به ترتیب برابـر بـا یـک و صفر الکترون-ولـت اسـت، در حالـت ایـدهآل و در دو مـورد



مورد زوج، متقارن و برای مورد فرد نامتقارن است. همچنین بیشینهٔ عبور برای مورد زوج و فرد به ترتیب برابر با ۱–*M و M* است. محاسبات نشان میدهد که برای مورد ایـدهآل وقتـی *M* است محاسبات نشان میدهد که برای مورد ایـدهآل وقتـی گافی در نمودارهای رسانش مشاهده نمی شود.

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 = N) در این حالت کانالهای رسانش مربوط به هر مد، با تقویت اثر یکدیگر به طور عمده در یک بازهٔ انرژی مشترک رخ میدهند. بنابراین تقریباً در تمام انرژیها، به استثنای محدودههای کوچک انرژی در ابتدا و انتهای پنجرهٔ مجاز انرژی، ترابرد الکترونی بیشینه خواهیم داشت. در شکل ۶-ب نیز برای یک مورد که ۱۲ = M است، مقدار انرژی پرش در راستای افق را نسبت به مقدار آن در راستای عمود، کوچکتر – یک دهم برابر-انتخاب شده است. مشاهده می شود در نمودار ضریب عبور کانالهای رسانش تفکیک شده و یا به عبارتی باعث ایجاد چند گاف در طیف رسانش گشتهاند.

www.SID.ir



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



Energy (eV)

شکل ۸. نمودار ضریب عبور یک نانو لولهٔ ایدهآل با ساختار شبکهٔ مربعی (خط پر) و در حضور یک نقـص شـبکهای متقـارن بـرای چنـد مقـدار مختلف: *β*_{CL} = ۰/۸ eV و *β*_{CL} = ۰/۸ eV.



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

خواهد شد. این دو نقص به فاصلهٔ *N* اتم در راستای طولی از هم قرار گرفتهاند. ابتـدا بـا در نظـر گـرفتن ν eV = (β_{CL(R}) و N = ۹، نمـودار ضـریب عبـور در مقایـسه بـا حالـت ایـده آل (eV = ۱/۰ eV) در شـکل ۱۰-الـف رسـم شـد. مـشاهده میشود که در حضور نقصها، ترابرد در هر کانال کاهش یافتـه و به صورت نوسانی خواهد بود. با افزایش فاصلهٔ بین دو نقص، بر تعداد این نوسانها و تیزی نمودارها افزوده میشـود (شکل ۰۱-ب).

در ادامه به محاسبه و بررسی ضریب عبور الکترونـی یـک نانو لولهٔ نوعی تک دیواره با شبکهٔ لوزی میپردازیم. حضور نقص پیوندی متقارن با انرژی پرش eV ۰/۵ و eV ۰/۵ ۹۷ هم مقایسه شده است. با توجه به نمودار در می یابیم که ایجاد یک نقص پیوندی متقارن در شبکهٔ نانو لوله، رسانش کاهش یافته و مقدار آن در هر کانال رسانش کمتر از رسانش حالت ایده آل خواهد بود. با افزایش قدرت انرژی پرش نقص، رسانش کاهش بیشتری یافته، اما تقارن نمودار همچنان حفظ می شود.

مطابق شکل ۹ با تغییر انرژیهای پرش اتـصالهای چـپ و راست، دو نقص پیوندی متقارن در شبکهٔ نانو لولهٔ ایدهآل ایجاد



شکل ۱۰. (الف) نمودار ضریب عبور یک نانو لولهٔ ایـدهآل بـا سـاختار شـبکهٔ مربعـی (خـط پـر) و در حـضور دو نقـص شـبکهای متقـارن B_{CL(R)} = ۰/۸ eV . (ب) در این قسمت مانند نمودار قبلی برای دو فاصلهٔ متفاوت بین دو نقص شبکهای متقارن رسم شده است.



شکل ۱۱. شبکهٔ لوزی *B-A*؛ هر یکایاخته در نواحی خطچین شامل دو اتم *A* و *B* است. یکایاختهٔ *ji* در برهمکنش با شش یکایاختهٔ همسایه در شکل نشان داده شده است.

A**-**B

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

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

$$(1 \circ)$$

که در آن (*E_{A(B})* انـرژی جایگـاهی اتـم *A(B)* اسـت. بـرای سادگی ضریب *α* که مشخص کنندهٔ ناحیهٔ مرکزی و هـادیهـا است را حذف کردهایم و همچنین همـهٔ پیونـدها را یکـسان و



شکل ۱۲. نمودار ضریب عبور یک نانو لولهٔ ایدهآل با ساختار شبکهٔ لوزی *A-B* برای دو مورد *F = M و M = ۵، در اینج*ا eV، در اینجا eV انتخاب شده است.

(D)

دارای انرژی پرش β در نظر گرفتهایم. با لوله کردن شبکهٔ دو بعدی مورد بحث، یک نانو لوله حاصل میشود. با توجه به شرایط مرزی دورهای با استفاده از قضیه بلوخ برای اتم B داریم $\psi_{i\pm 1,j}^{(B)} = e^{\pm i k_{Y} a} \psi_{ij}^{(B)},$

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

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

$$(11)$$

$$\begin{split} \varepsilon_m &= \varepsilon_B + \frac{\kappa \beta'}{\varepsilon - \varepsilon_A} \cos^r \frac{\pi m}{M}, \\ \beta_m &= \frac{{}^{\epsilon} \beta^r}{\varepsilon - \varepsilon_A} \cos^r \frac{\pi m}{M}. \\ \text{ ville the transformation of transform$$

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

حال برای محاسبهٔ ضریب عبور نانو لوله، تمامی انرژی های پرش بین اتم ها را برابر با یک الکترون-ولت در نظر می گیریم. شکل ۱۲ نمودار ضریب عبور نانو لولهٔ ایده آل را برای *M*های زوج و فرد نشان می دهد. در اینجا نیز نمودار به صورت پله های منظم بوده و نسبت به محور عمودی (عبوری از مبدأ انرژی) متقارن است. پدیدهٔ مهم قابل مشاهده در این نمودار، وجود یک گاف در طیف رسانش حول انرژی صفر است و نتیجهٔ مهمی که از آن گرفته می شود این است که نانو لوله با شبکهٔ لوزی *B-A* اثر عوامل مختلف بر روی خواص ترابرد این نانو لوله نوعی، همانند نانو لوله با شبکهٔ مربعی است که به دلیل تشابه و طولانی شدن مقاله از آوردن آنها خودداری می کنیم.

در رهیافت بستگی قوی در تقریب نزدیکترین همسایه و با استفاده از روش تابع گرین، ضریب عبور را برای نانو لولهٔ نوعی با طول بینهایت با ساختار شبکهٔ 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

فرد باشد، حول انرژی صفر به ترتیب متقارن یا نامتقارن است. اثر عوامل مختلف بر روی ترابرد الکترونی نانو لولهٔ ایدهآل مذکور بررسی شد؛ رابطهٔ مستقیمی میان رسانش و اندازهٔ قطر نانو لوله مشاهده شد. با افزایش قطر، تعداد کانالهای رسانش بیشتر شده و برای قطرهای بسیار بزرگ به حد شبکهٔ دو بعدی نزدیک می شویم. 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 مشاهدهٔ چند گاف در رسانش فراهم می شود. 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 بازهٔ انرژی همپوشانی کرده و باعث بیشینه شدن ترابرد در این بازه می شود.

با ایجاد یک نقص متقارن در شبکهٔ نانو لولهٔ با ساختار شبکهٔ مربعی، ترابرد در هر کانال رسانش با افزایش مقدار انرژی پرش نقص کاهش مییابد. وجود دو نقص متقارن که به فاصلهٔ *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 فاصلهٔ بین دو نقص بر تعداد و در نتیجه شدت این نوسانات افزوده میشود. در بررسی نانو لولهٔ نوعی ایدهآل با ساختار شبکهٔ لوزی *A*-*B*

نتایج مشابه نانو لوله با شبکهٔ 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 شبکهٔ مربعی همواره رسانا و با شبکهٔ لوزی *A-B* نیمرسانا یا عایق خواهد بود.

از نظر خواص رسانش و چگالی حالتها، رفتار کلی برای نانولولهٔ کربنی و نانولولههای با ساختار شبکهٔ مربعی (لوزی) همخوانی دارد ولی بدیهی است که به دلیل تفاوت در نوع شبکهٔ لانه زنبوری و مربعی (لوزی)، در جزئیات فرقهایی 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 ارایهٔ یک فرمولبندی کاملاً تحلیلی نانولولههایی است که قابلیت جداسازی مدهای رسانشی را به خاطر تقارن هامیلتونی دارا هستند. این رهیافت تنها برای نانولههایی که سطح جانبی آنها دارای ساختار شبکهٔ 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.

(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 singlewall carbon nanotubes", Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2008).
- 16. K D Sattler, "Handbook of Nanophysics: Nanotubes and Nanowires", CRC press (2010).
- C L Bishop, and M Wilson, *Molecular Physics* 106 (2008) 1665.
- 18. K D Sattler, "Handbook of Nanophysics: Nanotubes and nanowires", CRC Press (2011).
- 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.

- M S Dresselhaus, G Dresselhaus, and P Avouris, "Carbon Nanotubes", Springer – Verlag Berlin, Heidelberg (2001).
- 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.
- 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.
- M J Biercuk et al., "Electrical transport in singlewall 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.
- 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