مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۶، شمارهٔ ۲، تابستان ۱۳۹۵





**حسن ربانی <sup>او۲</sup>، محمد مردانی <sup>او۲</sup> و سمانه مقبل <sup>۱</sup>** ۱. گروه فیزیک، دانشکدهٔ علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد ۲. مرکز پژوهشی فناوری نانو، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

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

(دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۵/۶ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۳۹۴/۱۰/۱۹)

## چکیدہ

ىلاددانىر. بردوانىر بۇھە

در این مقاله مبتنی بر روش تابع گرین در رهیافت تنگابست، ترابرد الکترونی یک نانونوار گرافنی شامل یک نقص پیوندی و همچنین یک نانوسیم پلیاستیلنی شامل یک پیوند اضافی، مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان میدهد که رسانش الکترونی نسبت به تغییر مکان نقص پیونـدی در موارد تشدیدی و غیر تشدیدی، رفتاری متفاوتی از خود نشان میدهد. تنها در مواردی که پیوندهای دوگانه داریـم، بـا تغییـر مکـان پیونـد مقـدار رسانش در انرژی صفر، تغییر میکند. به خصوص در نانوسیم پلیاستیلنی این تغییرات بیشتر مشاهده میشود. میزان جابهجایی مکان ضد تشدیدها در طیف رسانش، نسبت به تغییر محل نقص پیوندی نیز قویاً به نوع و شکل ساختار سامانه مرکزی وابسته است.

**واژههای کلیدی:** نانونوار گرافن، پلیاستیلن، حرکت پیوند، نقص، تنگابست، رسانش الکترونی

## ۱. مقدمه

یکی از جذابترین حیطه های تحقیقاتی در علوم نانو، استفاده از دستگاه های مولکولی به عنوان ابزارهای الکترونیکی است. بسپارها یکی از بهترین مواد برای فعالیت به عنوان رساناهای یک بعدی هستند [۱]. عایق بودن بسپارها<sup>۱</sup> به پیوند کووالانسی موجود بین اتمها در زنجیرهای مولکولی ارتباط دارد. اما تحقیقات انجام شده در سالهای اخیر نشان داد که امکان ایجاد خاصیت هدایت الکتریکی در امتداد محور مولکولها وجود

1. Polymers

دارد. این نوع پلیمرها اساساً از پلیاستیلن تشکیل شدهاند [۲]. در همین راستا بررسی خواص ترابردی الکترونی از درون سامانههای مولکولی متصل بین الکترودهای فلزی، از مهمترین موضوعات نانوفیزیک به شمار میرود [۳]. به طور کلی نانومواد با پایههای کربنی نظیر گرافن دوبعدی و نانونوارها نیز به دلیل خواص منحصر به فرد الکتریکی، نوری، گرمایی و مکانیکی در سالهای اخیر بیش از پیش مورد توجه دانشمندان قرار گرفتهاند [۴]. عوامل گوناگونی میتوانند بر روی رسانش الکترونی نانولولهها تأثیرگذار باشند که از مهمترین آنها میتوان تغییر دما، ایجاد ناخالصی و یا نقصهای هندسی را نام برد. نتایج این

$$H_{L_{(\Upsilon)}} = \mathsf{V}_{L_{(\Upsilon)}} \sum_{i} d_{i}^{\dagger} d_{i} + \mathsf{S}_{L_{(\Upsilon)}} \sum_{\langle ij \rangle} d_{i}^{\dagger} d_{j} + \text{h.c.}, \tag{(f)}$$

که در آن i انرژی جایگاهی الکترون روی اتم i ام، N تعداد اتمهای کربن در نانونوار،  $\langle ij \rangle$  به معنای جمع روی شمارهٔ جایگاه نزدیکترین همسایهها و  $i_{ij}$  انرژی پرش الکترون بین دو جایگاه اتمی i و j است که برای پیوندهای یگانه و دوگانهٔ کربن – کربن به ترتیب s و S و اختیار می شود.  $i^{7}$  و  $i^{7}$  و  $i^{7}$  به ترتیب عملگرهای خلق و فنا در جایگاه اتم iام است. همچنین  $(\gamma)_{I}V$  و  $(\gamma)_{I}V$  به ترتیب انرژی های جایگاهی و پرش الکترون در هادی اول (دوم) است و نیز  $(\gamma)_{I}V$  انرژی پرش الکترون در اتصال بین هادی اول (دوم) و نانونوار تعریف می شود. تابع گرین نانونوار در حضور هادی ها به صورت زیر نوشته می شود (0) (1) (1) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (3) (2) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3) (3)

$$\Sigma_{L_{1(\tau)}} = \frac{\mathsf{S}_{WL_{1(\tau)}}}{\mathsf{S}_{L_{1(\tau)}}} \exp\left(ik_{L_{1(\tau)}}a\right),\tag{9}$$

که در آن a ثابت شبکه و  $k_{L_{1(1)}}$  عدد موج را نشان می دهد که از رابطهٔ پاشندگی حاکم بر هادی ها چنین محاسبه می شود [۹]  $k_{L_{1(1)}}a = \cos^{-1}(V/TS_{L_{1(1)}}),$  (۷) (۷) (V)  $v = cos^{-1}(V/TS_{L_{1(1)}}),$  (۷) (V) (V)

گرین است.

در ادامه به بررسی دو ساختار مولکولی، یکی یک نانونوار کربنی شامل یک نقص پیوندی (شکل ۱) و دیگری، یک نانو ساختار پلیاستیلنی تا شده شامل یک پیوند کربن – کربن اضافی (شکل ۲) را مورد بررسی قرار میدهیم. بنزنهای نانونوار را ساختاری (شکل ۱) تشدیدی (قسمت الف) یا غیرتشدیدی (قسمت ب) در نظر می گیریم. در این شکل، یک تهی جای از تکدیوارهٔ حلقه های بنزنی حرکت میکند. در این حالت، جابه جایی دیواره ها در راستای طول نانونوار گرافنی به گونه ای تحقیقات نشان میدهد که یک نقص یا یک ناخالصی منفرد میتواند به طور جدی خواص ترابردی سامانه های شبه یکبعدی را تحت تأثیر قرار دهد [۴- ۶].

وابستگی ترابرد الکترونی به وجود نقص های هندسی در سیمهای مولکولی و استفاده از آن به صورت رئوستای مولکولی یکی از موضوعات مورد توجه در حوزهٔ نانو فناوری به شمار میرود به طوری که کارهای تجربی و نظری زیادی بر خواص رسانندگی گرمایی و الکترونی نانونوارهای گرافنی در حضور نقصها و در رفتگیهای هندسی در مجلات معتبر علمی به چاپ رسیده است [۷]. به عنوان مثال کشف حرکت نسبی دیوارههای پیوندی در نانولولههای چند جدارهٔ کربنی در دههٔ اخیر، بلافاصله این ایده را به دنبال داشت، که از دیوارههای کربنی موجود در نانولولهای می وان به عنوان یک پارامتر قابل تغییر در بررسی خواص سامانههای نانوالکترومکانیکی بهره جست [۸].

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین و رهیافت تنگابست به بررسی اثر حرکت نقص پیوندی بر رسانش الکترونی یک نانونوار گرافنی و همچنین اثر وجود یک پیوند اضافی کربن-کربن بر رسانش الکترونی یک نانوسیم پلیاستیلن تا شده می پردازیم.

## ۲. مدل و فرمول بندی

هامیلتونی تکذرهای برای توصیف یک نانو نوار و الکترودهای متصل شده به آن در رهیافت تنگابست با در نظر گرفتن تقریب نزدیکترین همسایه عبارت است از

 $H = H_{L_{\gamma}} + H_{L_{\gamma}} + H_W + H_{WL_{\gamma}} + H_{WL_{\gamma}}, \qquad (1)$ 

که در آن  $H_{L_1}$ ,  $H_L$  و  $H_W$  به ترتیب هامیلتونی هادی اول، هادی دوم و نانونوار و  $H_{WL_{1(1)}}$  هامیلتونی اتصال نانونوار به هادی اول (دوم) را نشان میدهند. این هامیلتونی ها در نمایش عملگرهای خلق و فنا به شکل زیر تعریف می گردند

$$H_W = \sum_{i=1}^{N} \mathsf{v}_i c_i^{\dagger} c + \sum_{\langle ij \rangle} \mathsf{s}_{ij} (c_i^{\dagger} c_j + \text{h.c.}), \tag{Y}$$

$$H_{WL_{\gamma}} = S_{WL_{\gamma}} c_{\gamma}^{\dagger} d_{s} + \text{h.c.},$$

$$H_{WL_{\gamma}} = S_{WL_{\gamma}} c_{N}^{\dagger} d_{N+\gamma} + \text{h.c.},$$
(7)

227



شکل۱. یک نانونوار کربنی متصل به دو هادی ساده در غیاب یک پیوند در دو مورد (الف) تشدیدی و (ب) غیر تشدیدی.



**شکل۲.** یک چندپار پلیاستیلنی متصل به دو هادی ساده در حضور یک پیوند کربن- کربن اضافی در دو مورد (الـف) تشـدیدی و (ب) غیـر تشدیدی.

شکل فرض شده است.

در بخش بعد با استفاده از فرمول بندی ارائه شده، به محاسبهٔ ضریب عبور الکترونی این ساختارها پرداخته و اثر حرکت نقص پیوندی را مورد مطالعه قرار خواهیم داد. لازم به ذکر است که در انجام محاسبات خود، انـرژیهای پـرش الکتـرون در پیونـدهای یگانـه و دوگانـهٔ کـربن – کـربن را بـه ترتیـب eV ۸٫۰ = s یگانـه و ایرژی پرش الکترون بین مولکول و الکتـرود اول (دوم) برابر eV ۸٫۰ = م٫۰ و انرژی الکترودهای متصل شده است که به نظر می رسد یک جای خالی از این دیواره ها از سمت راست به چپ درون نانونوار گرافنی در حرکت است. در چنین حالتی اصطلاحاً می توان گفت که با جابه جایی تهی جای یک تک دیوارهٔ متحرک در راستای محور نانونوار و تغییر پیکربندی سامانهٔ گرافنی، رفتار رسانش الکترونی سامانه تغییر خواهد کرد. چندپار پلی استیلن در شکل ۲ نیز برای دو حالت تشدیدی (قسمت الف) و غیر تشدیدی (قسمت ب) بررسی شده که در اینجا حرکت یک پیوند کربن – کربن اضافی مطابق جلد ۱۶، شمارهٔ ۲



**شکل۳.** (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) نمودار لگاریتم ضریب عبور الکترونی برحسب انرژی برای پیکربندیهای نشان داده شده در، (الف) شکل ۱ (الف)، و (ب) شکل ۱ (ب). نمودارهای ضخیم متعلق به حالت ایدهآل ساختار مربوطه هستند.

الکترونی به دلیل وجود مسیرهای متفاوت در حلقه های بنزنی است. بدیهی است که انرژی هایی که در آنها ضد تشدیدها اتفاق میافتند، بستگی به اندازه، مکان و تعداد حلقه ها دارد. از این رو است که جابه جایی مکان ضد تشدیدها در طیف رسانش را برای ساختارهای متفاوت شاهد هستیم.

شکل های ۴ (الف) و (ب) لگاریتم ضریب عبور الکترونی را برحسب انرژی به ترتیب برای ساختارهای نشان داده شده در شکل ۲ (الف) و ۲ (ب) نشان میدهد. در اینجا نیز به علت تقارن نمودارها حول انرژی صفر، تنها قسمت مثبت انرژی نمایش داده شده و همچنین نمودارهای مربوط به موارد ایده آل نیز با خط ضخیم برای مقایسه آمده است. از شکل ۴ (الف) مشاهده می شود که ضریب عبور الکترونی در انـرژی صـفر بـرای تمامی پیکربندی های شکل ۲ (الف) مقدار یکسانی اختیار میکند. ولی در مورد شکل ۲ (ب)، بـا توجـه بـه اینکـه سـامانهٔ ایــدهآل پلــیاســتیلن اســت، ســاز و کــار رسـانش در بــازهٔ eV [۹,۰/۴] تونل زنی است. دیده می شود کـه هـر چـه پیونـد کربن- کربن اضافی به سمت هادی ها نزدیک شود، مقدار رسانش بیشتر شده و در مورد ساختار شمارهٔ ۵، ضریب عبور به مقدار واحد مىرسد. به عبارتى در اين مورد حالت اتصال كوتاه رخ داده است. با توجه به این که حالت ایده آل شکل ۲ (الف)، یک زنجیرهٔ خطی است، بنابراین درههای ضد تشدیدی که ناشی s<sub>L<sub>1(۲)</sub> =۱ eV در نظر گرفته شده است. همچنین انرژی جایگاهی اتمهای کربن و هادیها صفر اختیار شده است.</sub>

## ۳. نتایج محاسبات عددی

در شکلهای ۳ (الف) و (ب) تغییرات لگاریتم ضریب عبور الکترونی برحسب انرژی به ترتیب برای ساختارهای نشان داده شده در شکلهای ۱ (الف) و ۱ (ب) رسم شده است. به منظور مقایسه، نمودار مربوط به موارد ایدهآل نیز در شکل آمده است. با توجه به متقارن بودن رفتار رسانش الکترونے حول انرژی صفر، منحنی ها تنها در بازهٔ مثبت انرژی eV [۰,۲] نمایش داده شده است. از نمودارهای شکل ۳ (الف) این نتیجه بر می آید که مقدار رسانش الکترونی در نزدیکی انـرژی صفر بـرای تمـامی مواردی که در آنها پیوندهای کربن- کربن یکسان است، میـزان اندک و یکسانی را دارا است، در حالی که در نمودارهای شکل ۳ (ب) به ترتيب از ساختار شمارهٔ ۱ تا ۵ ضريب عبور الکترونی در ناحیهٔ گاف انرژی، با افزایش همراه بوده و برای ساختار ۵ ضریب عبور برابر واحد است. اشاره به ایـن نکتـه، ضروری به نظر میرسد که نمودارها شامل درههایی هستند که رسانش در آنها به سمت صفر میل کرده است. وجود چنین درههایی به حلقهای بودن سامانه مرکزی بـر مـیگـردد و دلیـل وقـوع أنهـا بـه رخ دادن پديـدهٔ تـداخل ويرانگـر توابـع مـوج Archive of SID



**شکل۴**. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) نمودار لگاریتم ضریب عبور الکترونی برحسب انرژی برای پیکربندیهای نشان داده شده در، (الف) شـکل ۲ (الف)، و (ب) شکل ۲ (ب). نمودارهای ضخیم متعلق به حالت ایدهآل ساختار مربوطه هستند.

۴. نتيجه گيرې

رسانش الکترونی را با تغییر مکان پیوند اضافی کنترل کرد.

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت تنگابست

به مطالعهٔ رسانش الکترونی دو سامانهٔ حلقوی و خطی که به

ترتيب شامل فقدان يک پيوند و شامل يک پيوند اضافي بودنـد.

پرداختیم و اثر تغییر مکان فقدان یا حضور پیوند را بر آن

بررسي كرديم. نتايج نشان ميدهد كه مقدار رسانش الكتروني

یک نانونوار گرافنی در نزدیکی انرژی صفر، در موارد تشدیدی

و غیر تشدیدی، به مکان نقص پیوندی به ترتیب بستگی نداشته

و دارد. از مقایسهٔ بین نتایج مربوط به این دو نوع ساختار مورد

مطالعه، می توان نتیجه گرفت که مقدار رسانش در نزدیکی

انرژی صفر، در سامانه های خطی نسبت به سامانه های حلقوی

به تغییر مکان نقص پیوندی حساس تر است.

عبور آن دیده نمیشود. در حالی که در حضور پیونـد اضافه، تعدادی ضد تشدید در طیف رسانش دیده میشود. با توجـه بـه تغییرات منظم ضریب عبور الکترونی سامانه نسبت به حرکـت و جابهجایی پیوند کربن- کربن اضافی به طرف هادیها مـیتوان از این نقص ساختاری در کنترل رسانندگی الکترونی (رئوسـتای مولکولی) بهره گرفت.

از وجود حلقه ها در سامانهٔ مرکزی است، در نمودار ضریب

با توجه به این که جابه جایی پیوند اضافی در این ساختار منجر به ایجاد حلقه هایی با اندازهٔ متفاوت می شود، بدیهی است که جابه جایی مکان ضد تشدیدها در مورد شکل ۴، نسبت به شکل ۳ بیشتر است. مقایسهٔ بین نتایج حاصل از شکل های ۳ و ۴، این واقعیت را بیان می کند که مقدار رسانش الکترونی حول انرژی صفر، در سامانه های خطی نسبت به سامانه های حلقوی به تغییر مکان جای خالی پیوند (یا پیوند اضافی) حساس تر است. به خصوص برای ساختار پلی استیلن، حول انرژی صفر، می توان

مراجع

- 4. M Mardaani and H Rabani, *Superlattices and Microstructures* **59** (2013) 155.
- 5. Y Aharonov and D Bohm, *Phys. Rev.* **115** (1959) 485.
- 6. D Nozaki, H M Pastawski, and G Cuniberti, *New J. Phys.* **12** (2010) 063004.
- 1. S Roth and D Carroll, "One-Dimensional Metals: Conjugated Polymers, Organic Crystals, Carbon Nanotubes", John Wiley and Sons (2006).
- 2. J Lan, J S Wang, C K Gan, and S K Chin, *Physical Review* B **79** (2009) 115401.
- 3. A Nitzan and M A Ratner, Science 300 (2003) 1384.

Lozovik, and B V Potapkin, J. Chem. Phys. 138 (2013) 024703.

- 9. H Rabani and M Mardaani, Solid State Communications 152 (2012) 235.
- 7. C J Delerue and M Lannoo, "*Nanostructures Theory and Modeling*", Springer Science and Business Media (2013).
- 8. A M Popov, I V Lebedeva, A A Knizhnik, Y E