

اثرات تغییر طول نانولوله کربنی آرمچیر مرکزی بر چگالی حالت‌های نقطه کوانتومی در حضور تک‌تهی‌جا

ادریس فیض آبادی¹، فاطمه حیدری پور²

چکیده: در این تحقیق، با استفاده از مدل بستگی قوی و تکنیک تابع گرین اثر طول سلولی بر چگالی حالات نقاط کوانتومی نانولوله کربنی $m(2n,0)/l(n,n)/m(2n,0)$ مورد بررسی قرار گرفته است. در نقطه کوانتومی نانولوله کربنی فلز-فلز $m(12,0)/l(6,6)/m(12,0)$ ، و فلز-نیم‌رسانا $m(8,0)/l(4,4)/m(8,0)$ افزایش تعداد حلقه‌ها و طول نانولوله مرکزی، ضمن تغییر آرایش چگالی حالات موجب افزایش نوسانات چگالی حالات در سامانه می‌شود. در اثر حضور تک‌تهی‌جا و حذف پتانسیل اتمی کربن، تغییرات کمی در چگالی حالت‌های سامانه مشاهده می‌شود

واژه‌های کلیدی: چگالی حالات، نقطه کوانتومی نانولوله کربنی، تابع گرین، روش بستگی قوی

1. مقدمه

نانولوله‌های کربنی به دلیل خصوصیات منحصر به فردشان توجه محققان زیادی را به خود جلب کرده‌اند و پژوهش‌های آزمایشگاهی و تئوری بسیاری بر روی خواص نانولوله‌های کربنی پس از کشف آنها توسط ایجیما صورت گرفته است [1]. کوچک‌سازی اجزای الکترونیکی مشخصه اساسی تکنولوژی مدرن می‌باشد. رفتار الکترونیکی نانولوله‌ها به هندسه نانولوله‌های کربنی وابسته می‌باشد. اندازه قطر و نوع پیچش نانولوله‌ها، آنها را فلز یا نیم‌رسانا می‌سازد [2].

نانولوله‌های کربنی فلزی و نیم‌رسانا در ساخت ترانزیستورهای تک‌الکترونی و ترانزیستورهای اثر میدان کاربرد دارند [3,4]. رشد ساختارهای نانولوله‌ای در شرایط کاملاً کنترل شده امکان‌پذیر نیست و ساختارهای تولیدی حاوی انواع کاستی‌ها می‌باشند. به

همین دلیل کنترل سایز و پیچش ساختارها مشکل است [5]. یکی از این کاستی‌ها حضور تک‌تهی‌جا در ساختار است، که مطالعات تئوری و آزمایشگاهی زیادی روی آن صورت گرفته است [6].

انواع مختلفی از اتصالات بین مولکولی بر پایه نانولوله‌های کربنی وجود دارد. اتصالات نامتجانس بین مواد فلز و نیم‌رسانا با ساختار باندهای متفاوت وجود دارند. سایتو و همکارانش اتصالات بین دو نانولوله کربنی را توسط یک جفت پنج‌تایی-هفت‌تایی بررسی کرده‌اند. جفت‌های پنج‌تایی-هفت‌تایی کوچکترین نوع کاستی‌های مکانی با کمترین پیچش محلی و انحنای صفر می‌باشند. آنها همچنین به بررسی رسانندگی تونلی در انواع اتصالات نانولوله‌های فلز-فلز و فلز-نیم‌رسانا پرداخته‌اند [7,8].

اثر انواع توزیع کاستی‌های پنج‌تایی-هفت‌تایی در انواع نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره در ساختارهای الکترونیکی مختلف توسط گروه چارلیر بررسی شده است. هنگامی که دو نانولوله با پیچش‌های مختلف به هم متصل می‌شوند امکان قرار گرفتن کاستی‌ها در

(1) استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، نارمک 16846، تهران edris@iust.ac.ir

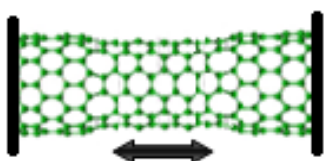
(2) دانش آموخته‌ی گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیر الدین طوسی، شریعتی، تهران ftm.heidari@gmail.com

در این تحقیق به بررسی اثر افزایش طول سلول مرکزی بر چگالی حالت‌های نقطه کوانتومی نانولوله کربنی، با استفاده از تابع گرین و روش بستگی قوی می‌پردازیم.

در ادامه در قسمت دوم به معرفی و بیان روش مورد استفاده می‌پردازیم و در قسمت سوم نتایج را مورد بحث و بررسی قرار داده و در نهایت نتیجه‌گیری کلی بیان می‌شود.

2. محاسبه چگالی حالت‌ها

یک نقطه کوانتومی که از یک نانولوله صندلی‌وار (n, n) متصل به دو نانولوله زیگزاگ $(2n, 0)$ است را در نظر می‌گیریم. نانولوله‌های مورد نظر توسط یک حلقه از کاستی‌ها شامل n جفت پنج‌تایی و هفت‌تایی، در محل فصل مشترک به هم متصل شده‌اند. ساختار یک نقطه کوانتومی در شکل 1 نشان داده شده است.



نانولوله آرمچیر

شکل 1: طرحی از یک نقطه کوانتومی نانولوله کربنی با سلول مرکزی آرمچیر و دو نانولوله زیگزاگ در طرفین سامانه مورد نظر را به شکل $m(2n, 0)/l(n, n)$ نمایش می‌دهیم. که نانولوله شامل نانولوله صندلی‌وار با l حلقه و نانولوله $m(2n, 0)$ شامل m حلقه از نانولوله زیگزاگ متصل به اتصالات فلزی چپ و راست می‌باشد. سامانه مورد نظر را با مدل بستگی قوی توسط هامیلتونی زیر توصیف می‌کنیم.

$$H = \sum_i E_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i \neq j} t_{i,j} |i\rangle \langle j| \quad (1)$$

در اینجا E_i انرژی جایگاهی برای هر اتم کربن و $t_{i,j}$ انتگرال پرش بین جایگاه‌های اتمی می‌باشد. مقدار

راستای بردار طول و محیط نانولوله وجود دارد. نتایج نشان می‌دهند که کاستی‌های موجود در طول نانولوله پایدارتر از کاستی‌های محیطی‌اند [9].

کاستی‌ها با تغییر نوع پیچش سامانه رفتار الکترونیکی حول انرژی سامانه را کنترل کرده و ساختار الکترونیکی را دگرگون می‌سازند [10].

ساختار انرژی هر ابرشبهه نانولوله کربنی $N(n, m)/M(n', m')$ شامل تعدادی ریزنوار می‌باشد که برای N و M های بزرگ جفت شدگی بین نانولوله‌ها ضعیف بوده و ریز نوارها باریک هستند و با کاهش N و M جفت‌شدگی‌ها افزایش یافته و ریزنوارها عریض‌تر می‌شوند [11].

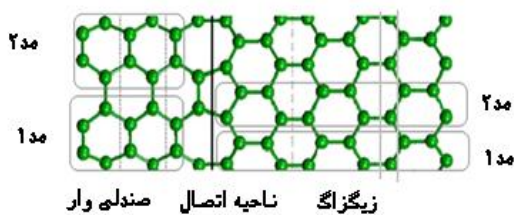
رفتار عجیب برخی از باندهای بدون پراکندگی در سیستمی با تقارن پیچشی به شکل $(12, 0)/(6, 6)$ بررسی شده است. رفتارها از باندهای بدون پراکندگی نانولوله $(12, 0)$ ناشی می‌شوند، اگرچه آنها در قسمت $N(6, 6)$ و فصل مشترک جایگزیده می‌شوند. حالات فصل مشترک قادر به شکل دادن به ریزنوارهای باریک بوده و منجر به رسانندگی غیرصفر می‌شوند [12]. یک نانولوله کربنی که بین دو نانولوله دیگر ساندویچ شده است شبیه یک جعبه تشدید با حالت شبه مقید عمل می‌کند. جودار و همکارانش انواع کاواک‌ها را بررسی کرده و دریافتند با افزایش تعداد کاواک‌های سیستم، تعداد نوسانگرها در تابع ترابرد افزایش می‌یابد [13].

با ایجاد تغییراتی در ساختار نانولوله‌ها مانند اضافه نمودن ناخالصی یا ایجاد نقص‌های بلوری و ایجاد تهی‌جاها می‌توان گاف این نیمه‌رساناها را کنترل کرد که کنترل گاف می‌تواند در ساخت قطعات مختلف الکترونی کاربرد داشته باشد. ساخت ترانزیستورهایی با استفاده از این نانولوله‌های کربنی نیازمند شناخت دقیق ویژگی‌های الکترونی نانولوله‌ها می‌باشد.

آوردن ماتریس گرین کلی می‌توان چگالی حالت‌ها را به شکل زیر به دست آورد: [14, 15].

$$DOS = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\text{Trace} (G(E))] \quad (6)$$

در شکل 2 مدها در راستای طول نانولوله و حلقه‌ها در راستای محیط نانولوله و اتصال نانولوله‌های صندلی‌وار به زیگزاگ نشان داده شده است.



شکل 2: نمایش حلقه‌ها و مدهای نانولوله‌های صندلی‌وار و زیگزاگ در فضای حقیقی به اضافه حلقه‌های 5-7 که به عنوان اتصال بین نانولوله‌های ابرشبکه مورد استفاده‌اند.

3. نتایج و بحث

در این تحقیق به مطالعه اثر افزایش طول نانولوله صندلی‌وار مرکزی بر چگالی حالت‌های نقطه کوانتومی نانولوله کربنی با استفاده از روش لاندائرو و تکنیک تابع گرین بر پایه روش بستگی قوی می‌پردازیم. انتگرال پرش برای نزدیکترین همسایه‌ها را برابر $V_{pp\pi} = t = -2.66 \text{ eV}$ قرار داده و انرژی جایگاهی را برابر صفر می‌گذاریم.

جهت نشان دادن اثرات افزایش طول سلول مرکزی، طول نانولوله‌های زیگزاگ را ثابت در نظر گرفته و طول نانولوله صندلی‌وار مرکزی را تغییر می‌دهیم.

وابستگی چگالی حالت‌ها بر حسب تابعی از انرژی الکترون‌های فرودی در نقطه کوانتومی برای طول‌های مختلف نانولوله صندلی‌وار مرکزی در شکل 3 و 4 نمایش داده شده است.

سامانه مورد بررسی شامل اتصال نانولوله‌های فلز- نیم‌رسانا $m(8,0)/l(4,4)/m(8,0)$ و دیگری سیستم شامل اتصال نانولوله‌های فلز-فلز

عددی انتگرال پرش را برای نزدیکترین همسایه‌ها غیر صفر در نظر گرفته و از همسایه دوم صرف نظر می‌کنیم. این مدل به آسانی حالات الکترونی بر پایه اربیتال‌های جایگزیده در جامدات را توصیف می‌کند. در این مدل از پایه‌های متعامد $|i\rangle$ که متناظر با اربیتال‌های محلی با تقارن k در هر جایگاه اتمی سامانه‌اند، استفاده شده است.

هامیلتونی کلی برای چنین سامانه‌ای، که به اتصالات چپ و راست متصل است با رابطه زیر بیان می‌شود.

$$H_{QD} = H_L + H_C + H_R, \quad (2)$$

که H_{QD} هامیلتونی کلی سامانه شامل اتصالاتی از نانولوله‌های صندلی‌وار و زیگزاگ بوده و $H_{R,L,C}$ هامیلتونی نانولوله‌های راست و چپ و میانی سیستم می‌باشد.

روش گرین موثرترین روش در توصیف ترابرد و پراکندگی در نانولوله‌هاست که با معادله زیر بیان می‌شود.

$$[(E \pm i\eta)I - H]G_{QD}^{r,a} = I, \quad (3)$$

که r و a توابع گرین پیشرونده و تاخیری می‌باشند. تابع گرین جفت شده با اتصالات به شکل زیر است.

$$G_{QD}^r(E) = [(E + i\eta)I - H_{QD} - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1} \quad (4)$$

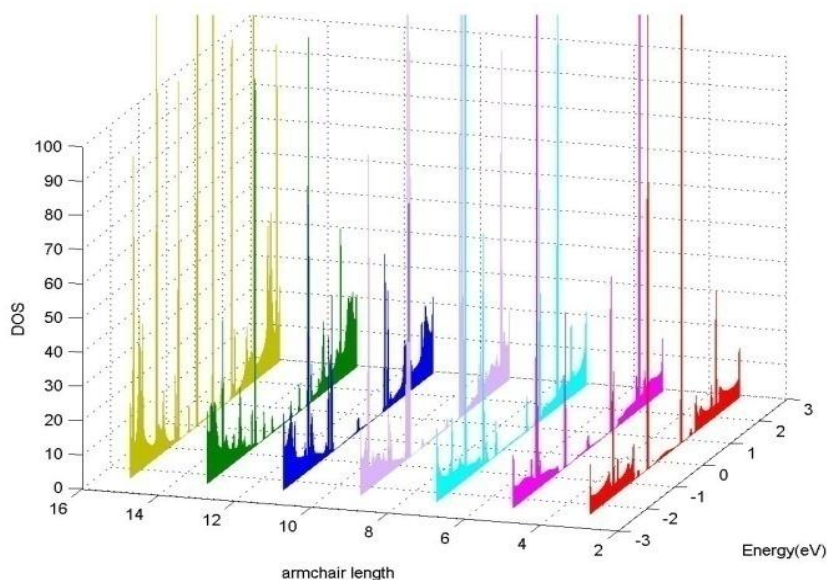
$\Sigma_{L(R)}$ خود انرژی سامانه به دلیل حضور اتصالات چپ و راست می‌باشد.

$$\Sigma_{L(R)}(E) = \tau_{L(R)} g_{S,L(R)}^r \tau_{L(R)}^\dagger, \quad (5)$$

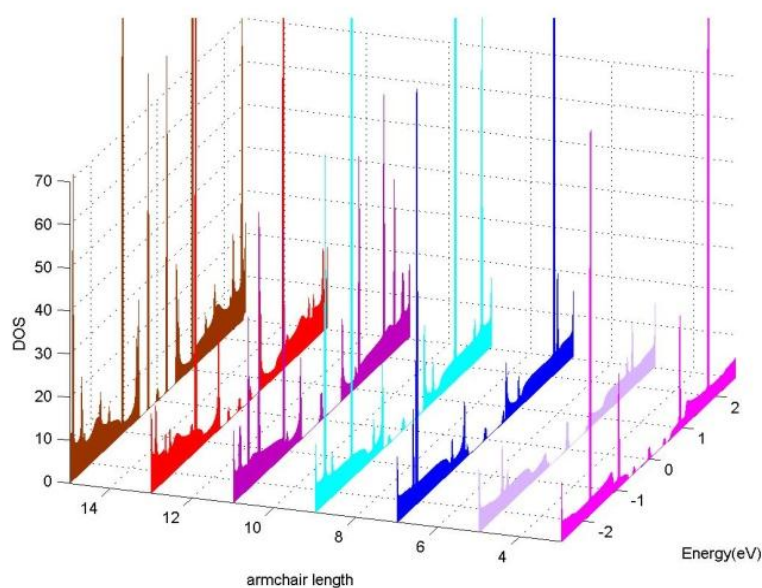
که $\tau_{L(R)}$ ماتریس جفت‌شدگی بین سامانه و اتصالات چپ و راست می‌باشد و $g_{L(R)} = [\epsilon - H_{L(R)}]^{-1}$ تابع گرین سطحی اتصالات نیمه نامحدود می‌باشند، که با استفاده از روش بازگشتی محاسبه می‌شود. پس از به دست

$m(12,0)/l(6,6)/m(12,0)$ ، تعداد حلقه‌های نانولوله‌های زیگزاگ طرفین را ثابت در نظر گرفته و طول نانولوله صندلی‌وار میانی را افزایش می‌دهیم. در شکل‌های 3 و 4 مشاهده می‌کنیم که با افزایش طول سامانه به دلیل افزایش حلقه‌های کربنی و اتم‌ها، چگالی حالات کلی سامانه رشد داشته و تعداد نوسانات منحنی چگالی حالات افزایش می‌یابد.

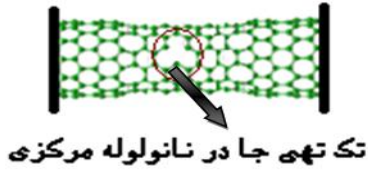
$m(12,0)/l(6,6)/m(12,0)$ می‌باشند، که در آنها طول نانولوله صندلی‌وار مرکزی متغیر است. 1-3. اثر افزایش طول نانولوله صندلی‌وار مرکزی در نقطه کوانتومی $m(12,0)/l(6,6)/m(12,0)$ و $m(8,0)/l(4,4)/m(8,0)$ در بررسی اثر افزایش طول نانولوله مرکزی در دو نوع نقطه کوانتومی، شامل اتصال نانولوله‌های فلز- نیم‌رسانا $m(8,0)/l(4,4)/$ و اتصال نانولوله‌های فلز- فلز $m(8,0)$



شکل 3: چگالی حالت های نقطه کوانتومی $m(12,0)/l(6,6)/m(12,0)$ بر حسب طول نانولوله صندلی‌وار مرکزی



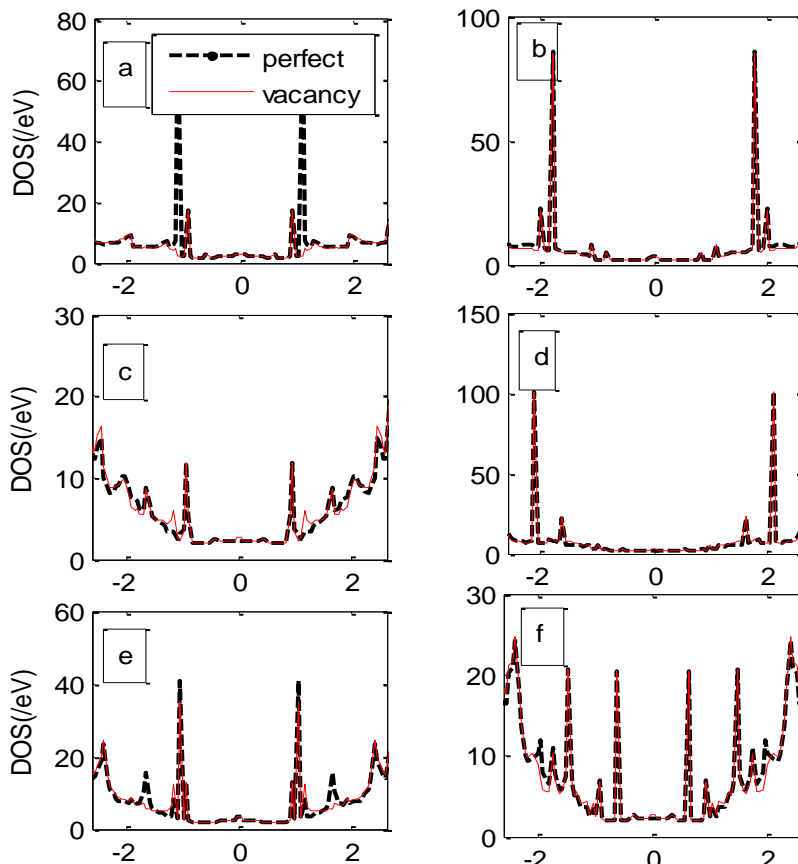
شکل 4: چگالی حالت‌های نقطه کوانتومی $m(8,0)/l(4,4)/m(8,0)$ بر حسب طول نانولوله آرمچیر مرکزی



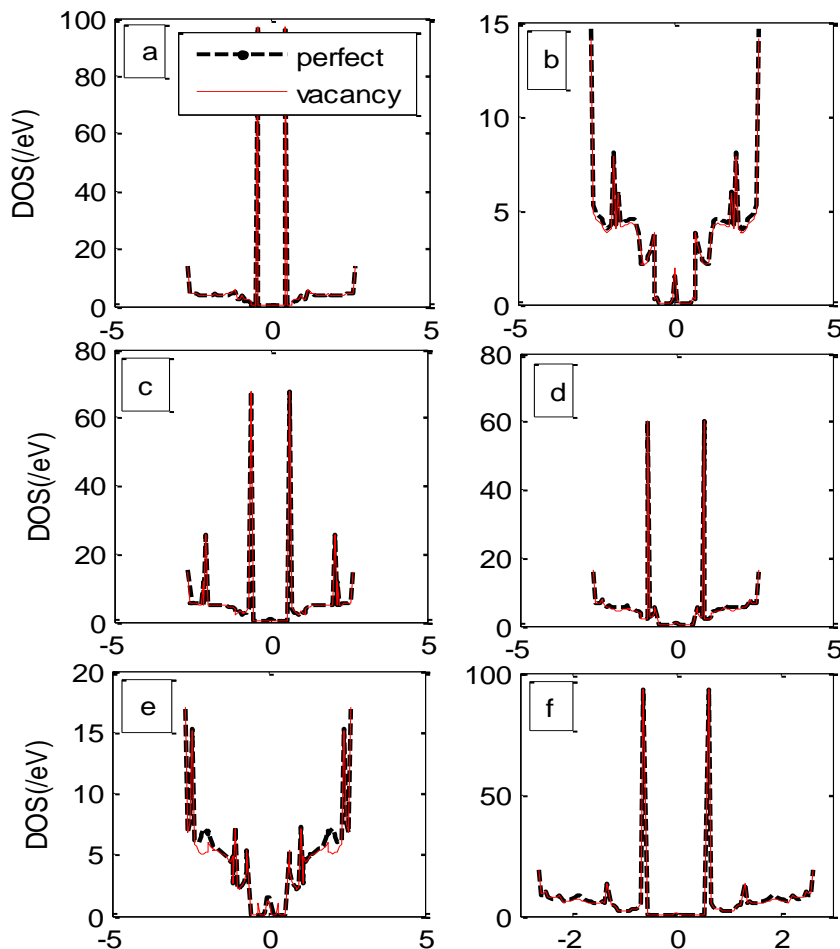
شکل 5: طرحی از یک نقطه کوانتومی نانولوله کربنی با تک‌تهی‌جا در نانولوله آرمچیر مرکزی

در شکل‌های 6 و 7 تهی‌جا را در مرکز نانولوله صندلی‌وار قرار دادیم و مشاهده کردیم، که حضور تک‌تهی‌جا در هر دو سامانه، در حالت کلی باعث تغییر آرایش چگالی حالت‌های سامانه می‌شود و چگالی حالات کلی را کاهش می‌دهد، زیرا به علت عدم حضور اتم کربن، پتانسیل اتمی کربن از ساختار حذف شده است و تعداد حالت‌های قابل دسترس الکترون‌ها کاهش یافته است.

3-2. اثر حضور تک‌تهی‌جا و افزایش طول نانولوله صندلی‌وار مرکزی بر رسانندگی نقطه کوانتومی $m(12,0)/l(6,6)/m(12,0)$ و $m(8,0)/l(4,4)/m(8,0)$ در اینجا به بررسی اثر حضور تک‌تهی‌جا، در طول‌های متفاوت نقاط کوانتومی $m(12,0)/l(6,6)/m(12,0)$ و $m(8,0)/l(4,4)/m(8,0)$ می‌پردازیم. برای دریافتن اثر حضور تهی‌جا در سامانه همانطور که در شکل (5)، مشاهده می‌شود، تهی‌جا را به صورت یک انرژی جایگاهی بزرگ در هامیلتونی در نظر می‌گیریم و انتگرال پرش در اتصال به اولین همسایه‌ها را برابر صفر قرار می‌دهیم. تهی‌جا می‌تواند در مکان‌های مختلفی مثلاً در هریک از نانولوله‌ها یا در حلقه شامل جفت‌های پنتاگون و هپتاگون محل اتصال بین نانولوله‌ها حضور داشته باشد.



شکل 6: اثر افزایش طول نانولوله مرکزی و حضور تک‌تهی‌جا در آن بر چگالی حالت‌های نقطه کوانتومی $m(12,0)/l(6,6)/m(12,0)$ طول زیگزاگ برابر دو سلول واحد (8 حلقه)، طول نانولوله مرکزی برابر با الف: 5 حلقه، ب: 7 حلقه، ج: 9 حلقه، د: 11 حلقه، ه: 13 حلقه، و: 15 حلقه (منحنی نقطه چین سامانه در حالت بدون حضور تهی‌جا و خط معرف سامانه در حضور تهی‌جا است)



شکل 7: اثر افزایش طول نانولوله مرکزی و حضور تک تهی جا در آن بر چگالی حالت‌های نقطه کوانتومی $m(8,0)/l(4,4)/m(8,0)$ طول زیگزاگ برابر یک سلول واحد (4 حلقه)، طول نانولوله مرکزی برابر با الف: 5 حلقه، ب: 7 حلقه، ج: 9 حلقه، د: 11 حلقه، ه: 13 حلقه، و: 15 حلقه (منحنی نقطه چین سامانه در حالت بدون حضور تهی جا و خط معرف سامانه در حضور تهی جاست)

کربن، کاهش کلی در منحنی چگالی حالت سامانه مشاهده می‌شود.

مراجع

- [1] Iijima S., Nature. London. 354, 1991, pp. 56.
- [2] Saito R., Fujita M., G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus. Phys. Rev. B, 46, 1992, pp.1804.
- [3] Tans, S J, Verschuieren, ARM, Dekker, C." Room-temperature transistor based on a single carbon nanotube", Nature, 393, 1998, pp. 49–52.
- [4] Bockrath, M. et al. "Single-electron transport in ropes of carbon nanotubes". Science Vol. 275. No. 5308, 1997, pp. 1922–1925.

4. نتیجه گیری

در این تحقیق، به بررسی چگالی حالات و رسانندگی در نقاط کوانتومی و در طول‌های مختلف نانولوله صندلی‌وار با استفاده از تقریب بستگی قوی و بر پایه روش تابع گرین پرداخته‌ایم. نتایج نشان می‌دهند، در نقطه کوانتومی شامل نانولوله‌های فلزی آرمچیر و زیگزاگ $m(12,0)/l(6,6)/m(12,0)$ و اتصال نانولوله‌های فلز- نیم‌رسانا $m(8,0)/l(4,4)/m(8,0)$ با افزایش تعداد حلقه‌ها و طول سامانه، افزایش نوسانات و تعداد پیک‌ها در منحنی چگالی حالات سامانه مشاهده می‌شود. در اثر حضور تک‌تهی جا و حذف پتانسیل اتمی

- nanotubes with pentagon - heptagon pair defects* "Diamond and Related Materials. Vol. 10 . 2001, pp. 1818–1823.
- [11] Jaskolski W., Stachowa A. and Chico L. " *Band Structure and Quantum Conductance of Metallic Carbon Nanotube Superlattices* "ACTA PHYSICA POLONICA A. Vol. 108, No. 4, 2005, pp. 491–503.
- [12] W. Jaskolski , L. Chico, " *Localized and conducting states in carbon nanotube superlattices* "Phys. Rev. B 71, 2005, pp. 155405.
- [13] Jódar, A. Pérez Garrido," *Transmission and localization in cavities of nanotubes*" phys. stat. sol. 204, No. 6, 2007, pp. 1892–1897.
- [14] Datta S., *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, New York, 1995.
- [15] Datta S., *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Purdue University, Cambridge University Press, 1995.
- [5] Dresselhaus, M .S; Dresselhaus, G.; Avouris, Ph. *Carbon Nanotubes: synthesis, structure, properties, and applications*; Springer Verlag; Berlin, 2000.
- [6] Chuanhong Jin, Kazu Suenaga, and Sumio Iijima. *Vacancy Migrations in Carbon Nanotubes*, Nano Lett., Vol. 8, No. 4, 2008.
- [7] Kosaka M., Ebbesen T.W., Hiura H., Tanigaki K., "annealing effect on carbon nanotubes an ESR study" Chem. Phys. Lett. 233, 1995, pp.47–51.
- [8] Saito R., Dresselhaus G., and Dresselhaus M. S., "Tunneling conductance of connected carbon nanotubes"Phys. Rev. B 53. 1996, pp. 2044–2050.
- [9] Charlier. T., Ebbesen W., Lambin Ph. " *Structural and electronic properties of pentagon-heptagon pair defects in carbon nanotubes* "Physical Review B Vol. 53, Number 16, 1996, pp. 11108–11113.
- [10] Hui-Fang, Hu, Yi-Bing Li, Hong-Bo He. " *Electronic properties of carbon*