بسم الله الرحمن الرحیم

دانشکده علوم پایه

پایان‌نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک-گرایش حالت‌جامد

تاثیر برهم‌کنش الکترون-فونون بر رسانش الکتریکی پل مولکولی

استاد راهنما:
دکتر محمد مردانی

استاد مشاور:
دکتر ابوالفضل جعفری

پژوهشگر:
جعفر سلیمی

مهر ماه ۱۳۸۸

کلیه حقوق مترتب بر نتایج مطالعات،ابتکارات
و نوآوری‌های ناشی از تحقیق این پایان‌نامه
متعلق به دانشگاه شهرکرد است.

چکیده

مطالعه رسانایی الکتریکی در سامانه‌های مزوسکوپیک یکی از اساسی‌ترین مسایل در فیزیک نانو ساختار است. در سال‌های اخیر، علاقه روزافزونی در مورد رسانش الکتریکی در نقطه‌های کوانتومی، سیم‌های کوانتومی و سیم‌های مولکولی وجود داشته است. رسانش الکترونیک یک موضوع نسبتا داغ است تا آنجا که هم از نظر کاربردهای فنی و هم از نظر فهم مفاهم فیزیکی بنیادی که در ارتباط با آن‌ها ظاهر می‌شود، جالب‌توجه و مورد علاقه‌ی دانشمندان است.

در این مطالعه اثر برهم‌کنش الکترون-فونون روی رسانش الکتریکی یک پل مولکولی مورد تحقیق گرفته است. ما این سامانه را در الگوی بستگی قوی و با استفاده از فن چند کاناله و به‌کار بردن روش ماتریس انتقال به‌صورت کاملا تحلیلی حل کرده‌ایم. همچنین شکل هامیلتونی در تقریب همسایه‌ی نزدیک نوشته شده است. نتیجه‌های این تحقیق نشان می‌دهد که در جفت‌شدگی ضعیف الکترون-فونون سهم رسانش کشسان در رسانش کل چشم‌گیر است، در حالی‌که در جفت‌شدگی قوی الکترون-فونون سهم رسانش ناکشسان بیشتر می‌شود. همچنین در این پایان‌نامه اثر تغییر اندازه‌ی جمله‌ی پرش روی رسانش کل و همچنین اثر تغییر ثابت جفت‌شدگی الکترون-فونون روی رسانش مطالعه شده است.

کلمات کلیدی: پل مولکولی، برهم‌کنش الکترون-فونون، بستگی قوی

فهرست مطالب

عنوان صفحه

چکیده

فصل اول – مقدمه

۱-۱ الکترونیک مولکولی ۶

۱-۲ نقطه‌های کوانتومی ۹

۱-۳ سیم‌های کوانتومی ۱۱

۱-۴ بررسی منابع ۱۲

۱-۵ هدف‌های تحقیق ۲۲

۱-۶ مروری بر سایر فصل‌ها ۲۲

فصل دوم – برهم‌کنش الکترون-فونون

۲-۱ مقدمه ۲۳

۲-۲ هامیلتونی پایه ۲۴

۲-۳ فونون ۲۵

۲-۳-۱ سامانه یک‌بعدی ۲۷

۲-۳ -۲ سامانه سه‌بعدی ۳۰

۲-۴ برهم‌کنش الکترون-فونون ۳۲

۲-۴-۱ هامیلتونی فرولیخ ۳۵

۲-۴-۲ هامیلتونی هولشتین ۳۸

۲-۴-۳ هامیلتونی سو- هگر- شیفر ۳۹

فصل سوم – روش‌های محاسبه

۳-۱ الگوی بستگی قوی ۴۱

۳-۱-۱ رابطه‌ی پاشندگی برای سیم یک‌بعدی ۴۶

۳-۲ تابع‌گرین ۴۷

۳-۲-۱ توابع‌گرین پس‌افتاده و پیشرفته ۴۸

۳-۲-۲ بسط ویژه‌مقداری و ارتباط تابع‌های‌گرین پس‌افتاده و پیشرفته ۵۰

۳-۳ سامانه‌های مرکب (سامانه باز) ۵۱

۳-۳-۱ رابطه‌ی کلی ۵۴

۳-۳-۲ تعمیم به کانال متصل با دو رسانا ۵۷
۳-۳-۳ ارزیابی خودانرژی و جمله‌ی منبع ۵۸

فصل چهارم – نتایج و بحث
۴-۱ معرفی و حل الگو ۶۲
۴-۲ نتایج و بحث ۷۳
۴-۳ پیشنهادها ۸۰
منابع ۸۱

فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
شکل(۱-۱)- فرآیند تونل‌زنی کشسان و ناکشسان	۸
شکل(۱-۲)- نمایی از گاف هومو-لومو	۱۰
شکل(۱-۳) - اتصال نانولوله‌ی کربنی توسط پل مولکولی	۱۲
شکل(۱-۴)- اندازه‌گیری رسانایی با STM برای مولکول واقع بر سطح مس	۱۴
شکل(۱-۵)- اندازه‌گیری رسانش الکتریکی مولکول C_{60} در حضور جفت‌شدگی الکترون-فونون	۱۵
شکل (۱-۶) الگویی از نقطه‌ی کوانتومی دوترازه	۱۶
شکل(۱-۷)- فن چندکاناله و روش حذفی برای تبدیل هامیلتونی به یک هامیلتونی موثر	۱۷
شکل(۱-۸)- نموار رسانش کل برحسب انرژی جنبشی الکترون ورودی.	۱۹
شکل(۱-۹)- منحنی رسانش الکترون	۲۱
شکل(۲-۱)- آرایه‌ای یک‌بعدی از یون‌ها که توسط فنرهایی به هم‌دیگر متصل هستند	۲۷
شکل(۲-۲)- نمونه‌ای از پراکندگی الکترون	۳۴
شکل(۳-۱)- تبدیل ساختار دواربیتالی به ساختار تک اربیتالی توسط روش حذفی	۴۴
شکل(۳-۲)-تبدیل ساختار سه‌اربیتالی به ساختار دو اربیتالی توسط روش حذفی	۴۵
شکل(۳-۳)-تابع‌گرین پس‌افتاده برای سیم یک‌بعدی نامتناهی	۴۸
شکل(۳-۴)- تابع‌گرین پیشرفته برای سیم یک‌بعدی نامتناهی	۴۹
شکل(۳-۵)- سامانه‌ی مرکب شامل کانال و رسانا	۵۲
شکل(۳-۶)- سیم نیمه بی‌نهایت که نقطه‌ی صفرم مانند کانال عمل می‌کند	۵۳
شکل(۳-۷)- یک کانال بدون الکترون و غیر جفت‌شده به رسانا	۵۵
شکل(۳-۸)- اتصال کانال و رسانا	۵۵
شکل(۳-۹)- کانال متصل به دو رسانا	۵۷
شکل(۳-۱۰)- نقطه‌های p_i درون رسانا که در مجاورت نقطه‌های r_i از رسانا قرار دارند	۵۹
شکل(۴-۱)- سیم مولکولی که اتم واقع در جایگاه صفرم می‌تواند نوسان داشته باشد	۶۲
شکل(۴-۲)- تبدیل چند کاناله و فضای فوک	۶۶
شکل(۴-۳)- منحنی رسانش کل برای جفت‌شدگی ضعیف الکترون-فونون	۷۶
شکل(۴-۴)- منحنی رسانش کل در جفت‌شدگی ضعیف الکترون-فونون، برای موردی که یک برانگیختگی فونونی وجود دارد	۷۶
شکل(۴-۵)- نمودار رسانش در جفت‌شدگی ضعیف برای مقادیر متفاوتی از انرژی پرش	۷۷
شکل(۴-۶)- نمودار رسانش کل در جفت‌شدگی ضعیف الکترون-فونون برای مقادیر متفاوتی از ثابت جفت‌شدگی	۷۷
شکل(۴-۷)- نمودار رسانش کل مربوط به جفت‌شدگی قوی الکترون فونون	۷۸
شکل(۴-۸)- نمودار رسانش کل ناشی از برهم‌کنش قوی الکترون-فونون	۷۸
شکل(۴-۹)- نمودار رسانش کل در جفت‌شدگی قوی الکترون-فونون برای مقادیر متفاوتی از ثابت جفت‌شدگی	۷۹

شکل(۴-۱۰)- نمودار رسانش در جفت‌شدگی قوی برای مقدارهای متفاوتی از انرژی پرش میان پل مولکـولی و رساناهای چپ و راست ۷۹
جدول(۲-۱)- ثابت جفت‌شدگی فرولیخ ۳۷

فصل اول

مقدمه

همه‌ی ما درزندگی روزمره نمونه‌هایی از رسانایی در سیم‌های مسی که جریان الکتریکی را برای روشن شدن لامپ، رایانه و غیره منتقل می‌کنند، می‌شناسیم. رسانش الکترونیک یک موضوع نسبتا داغ است تا آنجا که هم از نظر کاربردهای فنی و هم از نظر فهم مفاهیم فیزیکی بنیادی که در ارتباط با آن‌ها ظاهر می‌شود، جالب‌توجه و مورد علاقه‌ی دانشمندان است. انقلاب در ساخت و توسعه‌ی وسیله‌های الکترونیک سریع‌تر و کوچک‌تر از بالای پنجاه سال گذشته شروع شده و استقبال گسترده‌ای در جامعه‌های مختلف بشری را به‌همراه داشته است. توأم شدن پیشرفت در دنیای الکترونیک و ساخت وسیله‌های الکترونیک با پیشرفت در فیزیک مزوسکوپیک، باعث شده است که حجم محاسبه‌ها در این شاخه‌ی نوپای علمی روزبه‌روز افزون‌تر شود. به‌عبارت دیگر ساخت این وسیله‌های مزوسکوپیک باعث شد تا مطالعه‌ی آزمایشی سامانه‌ها در یک نقطه زودتر در زمان اتفاق بیفتد، چیزی که یک تصور نامتعارف به‌نظر می‌رسید.

دنیای مزوسکوپیک به اندازه‌ای ازمولفه‌های فعال موجود در یک مدار که بین دنیای ماکروسکوپیک هرروزه و دنیای میکروسکوپیک از اتم‌ها قرار دارد، بر می‌گردد. ابعاد سامانه‌های مزوسکوپیک در حد ابعاد اتمی است و اتم‌ها و مولکول‌ها نقش مولفه‌های فعال را در چنین سامانه‌هایی به‌عهده دارند. برخلاف تصور عموم، هرگاه اندازه‌ی رسانا کوچک شود، مثلا در بخش رسانش که در شاخه‌ی رسانش مزوسکوپیک، مطالعه می‌شود، محدوده‌ی سحرانگیزی از پدیده‌ها اتفاق می‌افتد. با این تفسیر طبیعی به‌نظر می‌رسد که شرط شناخت درست ویژگی‌های مختلف یک سامانه‌ی مزوسکوپیک از شناخت درست بلوک‌های سازنده‌ی آن که مولکول‌ها هستند به‌دست می‌آید. برای شناخت درست ساختار مواد در ابعاد مولکولی، رابطه‌های معمول فیزیک کلاسیک دیگر

ناکارآمد است و ما ناگزیر به استفاده از رابطه‌های مکانیک کوانتومی هستیم و سیمای کوانتومی مسئله جلوه‌گر می‌شود.

سامانه‌های مزوسکوپیک از یک طرف آن‌قدر کوچک هستند که ما اغلب نمی‌توانیم حد ترمودینامیکی مربوط به سامانه‌های ماکروسکوپیک را برای آن‌ها استفاده کنیم و از طرفی آن‌قدر بزرگ هستند که ممکن نیست آن‌ها را فقط به‌صورت تعدادی از اتم‌ها حساب کنیم. با این وجود مجبوریم برای انجام اندازه‌گیری رسانش روی یک سامانه مزوسکوپیک، آن‌را به پایانه‌هایی متصل می‌کنیم که دارای ویژگی‌هایی مانند دما و پتانسیل شیمیایی از دنیای ماکروسکوپیک هستند و به‌طور مسلم کنترل شرایط مسئله می‌تواند حساس و مشکل باشد.

امروزه دنیای نانو حوزه‌ی وسیعی از علم و فن‌آوری را به خود اختصاص داده است و کشف‌های بشر در زمینه‌ی الکترونیک مولکولی، نقطه‌های کوانتومی و پل‌های مولکولی، نانولوله‌ها، نانوسیم‌ها، نانوحس‌گرها و نانوتراشه‌های مغناطیسی. بسیار چشم‌گیر بوده است. در ادمه‌ی فصل ضمن بیان مطالبی در مورد الکترونیک مولکولی، به معرفی خلاصه‌ای از متداول‌ترین نانوساختارها یعنی نقطه‌های کوانتومی و نانوسیم‌ها و بررسی منابع مرتبط با پایان‌نامه حاضر اشاره خواهیم کرد.

۱-۱ الکترونیک مولکولی

نیاز مداوم برای طراحی و ساخت وسیله‌های الکترونیکی پرسرعت، بهتر و زیباتر که بتواند خواسته‌های بشر امروز را برآورده کند، با توسعه و پیشرفت در علم نانو اجین شده است. همراه شدن مسیر پیشرفت وسیله‌های الکترونیکی و علم نانو، موجب ایجاد چشم‌انداز روشنی در توسعه و پیشرفت شاخه‌ای از علم، مانند فیزیک ماده چگال، الکترونیک، گرایش‌های مختلف مهندسی و غیره شده و همچنین باعث شده است که درصد بالایی از تحقیقات مهم و سرمایه‌گذاری‌های دنیا، در حوزه‌ی نانو انجام گیرد.

همان‌طور که در دهه‌ی ۱۹۵۰ ترانزیستور جای‌گزین لوله‌های خلاء شده، و مدارهای مجتمع در دهه‌ی ۱۹۶۰ جای‌گزین قدرت‌مندی برای ترانزیستورهای منفرد شد، الکترونیک مولکولی امیدبخش ایجاد تحول در فن‌آوری نیمه‌رساناها شده‌است که در آن تک‌مولکول‌ها ایفاگر نقش فعال در این وسیله‌ها هستند. الکترونیک مولکولی اولین‌بار به‌طور موثر به‌وسیله‌ی راتنر و آویرام[1] [۱] و زمانی‌که آن‌ها یک ساختار مولکولی را پیشنهاد دادند که بتواند شبیه دیود عمل کند، کشف شد. زیرا این اتفاق نیازمند فرضیه‌هایی بود تا بتواند علت این رویداد را توضیح دهد. اما در آن زمان با توجه به شرایط فن‌آوری وقت امکان انجام آزمایش‌های خوب برای

[1]-Ratner and Aviram

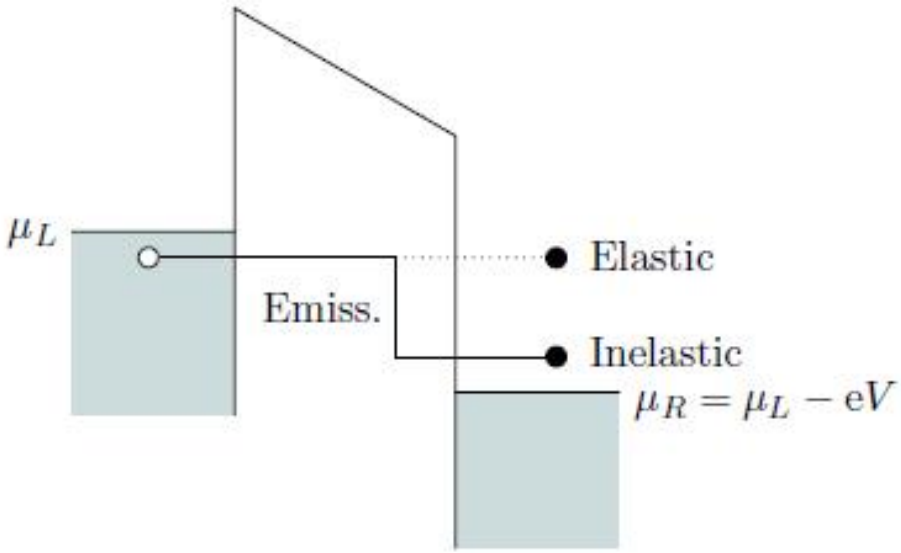
موشکافی کردن نظریه‌ها و ایده‌ها وجود نداشت. تا این‌که در سال ۱۹۹۷ اولین اندازه‌گیری روی تک‌مولکول‌ها صورت‌گرفت و در پی آن پیشرفت‌های چشم‌گیری در زمینه‌های مختلفی از جمله خاصیت‌های رسانایی و گرمایی و کشسانی و غیره مورد ارزیابی قرار گرفت [۲].

مزیت آشکار الکترونیک مولکولی بر فن‌آوری نیمه‌رساناها را می‌توان در این واقعیت دید که در الکترونیک مولکولی امکان تولید وسایل الکترونیکی فراچگال به‌راحتی امکان‌پذیر است، زیرا تک‌مولکول‌ها که پایه‌های اصلی این فن‌آوری هستند، صدها برابر کوچک‌تر از کوچک‌ترین ترکیبی‌اند که به‌وسیله‌ی فن‌آوری نیمه‌رسانا فراهم خواهد شد. همچنین کاهش چشم‌گیر در اندازه، بزرگی تعداد در ساخت و همسانی بزرگ در شکل مولکول‌های تولیدی، توانایی‌های پایه‌ی الکترونیک مولکولی است[۳].

پیدایش زمینه‌ی الکترونیک مولکولی و این‌که مولکول‌ها نقش دستگاه‌های فعال را در آن ایفا کنند و کاربرد فوق‌العاده‌ی آن در صنعت و فن‌آوری باعث شد که مطالعه‌ها و تحقیق‌های زیادی به‌سمت این موضوع جلب شود. پیشرفت الکترونیک در ساخت وسیله‌ها در مقیاس نانو و فن‌های مهندسی در طراحی چنین سامانه‌هایی، این امکان را فرام می‌کند که بتوانیم خاصیت‌های رسانش چنین دستگاه‌هایی در مقیاس نانو را بررسی کنیم. با توجه به ابعاد اتمی سامانه، سیمای کوانتومی مسئله نیز جلوه‌گر می‌شود و تعداد زیادی از ویژگی‌های کوانتومی در این زمینه وجود دارد که هنوز به‌طور کامل فهمیده نشده‌اند. یکی از این ویژگی‌ها برهم‌کنش متقابل میان الکترون‌های رسانش و نوسان‌های مولکولی در دستگاه‌هایی به‌نام پل‌های مولکولی است. امروزه تعدادی از سامانه‌های جدید با مقیاس نانو و مدارهایی بر پایه‌ی اثرهای برهم‌کنشی مکانیک کوانتومی پیشنهاد شده است، دیودها و نانو ترانزیستورهای تشدید تونل‌زنی، نقطه‌های کوانتومی و وسایل تک‌الکترونی، دستگاه‌های نمایش‌گر مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR)، سویچ‌های اتمی و مدارهای منطقی و حافظه‌دار نمونه‌هایی از این سامانه‌ها هستند [۴].

امکان آزمایشگاهی کردن اتصال دو الکترود توسط یک مولکول و اندازه‌گیری جریان الکتریکی گذرنده از آن، باعث افزایش تلاش‌ها در بررسی فرضیه‌های پایه و سازوکار رسانش الکترون در چنین سامانه‌هایی شده است [۵]. عمده‌ی این تحقیق‌ها و مطالعه‌ها به‌صورت متمرکز بر روی سازوکار رسانش کشسان الکترون انجام شده‌است و فرمول‌بندی لانداور می‌تواند احتمال رسانش را در چنین سامانه‌هایی نتیجه دهد [۶]. تونل‌زنی کشسان الکترون به‌طور مثال از دیواره‌های یک سد، شامل انتقال یک الکترون از حالت‌های پر در یک طرف آن سد به حالت‌های خالی در طرف دیگر آن است. در این برخورد انرژی الکترون میان حالت‌های نهایی و اولیه پایسته می‌ماند، حتی اگر الکترون امکان برخورد کشسان با ناخالصی‌های موجود در شبکه یا حتی با دیگر الکترون‌های واقع در این بین را داشته باشد. این ویژگی در تضاد کامل با تونل‌زنی ناکشسان الکترون

است، وضعیتی که الکترون به‌علت جذب یا تابش کوانتوم‌های نوسانی یعنی فونون‌ها مقداری از انرژی خود را در طول رسانش به‌وسیله‌ی پراکندگی با نوسان‌های شبکه از دست می‌دهد [شکل (۱-۱)].



شکل 1-1- فرآیند تونل زنی کشسان و ناکشسان برای یک سد تونل‌زنی که به پتانسیل خارجی بـا پتانسیل خالص eV متصل است.

تاکنون کارهای کمتری در مورد اثر فرآیندهای ناکشسان الکترون در اثر برهم‌کنش با حرکت نوسانی پل مولکولی انجام شده است. البته یکی از چالش برانگیزترین مسئله‌ها در مورد رسانش الکترون از میان پل‌های مولکولی، وارد کردن تاثیر برهم‌کنش الکترون-فونون بوده است و یکی از دلیل‌های این امر می‌تواند طبیعت بس‌ذره‌ای مسئله باشد که برای بررسی، دشواری‌های خاص خود را دارد.

در مقاله‌ها و نوشته‌ها دو روش عمده برای بررسی مسئله‌ی رسانش ناکشسان برای پل مولکولی دیده می‌شود. یکی از این الگوها بر پایه‌ی رفتار اختلالی مرتبه‌ی پایین است، به‌طوری‌که رسانش ناشی از تونل‌زنی الکترون با توجه به ضعیف بودن قدرت برهم‌کنش الکترون-فونون محاسبه می‌شود [۸-۷]. این روش اغلب برای توضیح طیف تونل‌زنی ناکشسان الکترون استفاده می‌شود، زیرا در این آزمایش‌ها فرض بر این است که جفت‌شدگی نوسانی نسبتا کوچک باشد. اما برای نوسان‌های با بسامد پایین، پارامتر برهم‌کنش الکترون-فونون از مرتبه‌ی $(\mathrm{eV}\,0.3)$ یا بزرگ‌تر است و رفتار اختلالی، ناکافی و ناقص است. دومین روش با یک رفتار نااختلالی همبسته است که در آن مسئله‌ی بس‌ذره‌ای الکترون-فونون با استفاده از فنی به نام فن چند کاناله به مسئله‌ی تک‌ذره با تعداد زیادی کانال بررسی می‌شود. مهم‌ترین مزیت این روش در این حقیقت نهفته است که این روش هیچ محدودیتی روی پارامترهای سامانه ندارد و می‌توان به‌راحتی آن را برای جفت‌شدگی‌های خیلی قوی نیز به‌کار برد. مهم‌ترین هدف این پایان‌نامه استفاده از روش نااختلالی فن چند کاناله بر پایه‌ی

روش ماتریس انتقال و در نمایش بستگی قوی برای مطالعه‌ی اثرهای ناکشسان نوسانی روی رسانش الکترون از میان یک پل مولکولی است.

در فن چند کاناله [۹]، همان‌طور که قبلا بیان شد، مسئله‌ی بس‌ذره به مسئله‌ی تک‌ذره با تعداد زیادی کانال تبدیل می‌شود که هرکانال به یک مد نوسانی مربوط می‌شود و برای رسانش الکترون میان کانال‌های ورودی و خروجی با تعداد متفاوتی از فونون با توجه به همدوس بودن شرایط از تصویر لانداور استفاده می‌شود. فرآیند تبدیل مسئله‌ی بس‌ذره‌ای الکترون-فونون به سامانه تک‌ذره با تعدادی زیادی کانال به‌وسیله‌ی نوشتن تابع‌موج سامانه در فضای فوک[1] الکترون-فونون انجام می‌گیرد.

۲-۱ نقطه‌های کوانتومی

نقطه‌ی کوانتومی یک ناحیه از بلور نیمه‌رسانا است که الکترون‌ها، حفره‌ها یا هر دو آن‌ها (که اکسیتون خوانده می‌شود) را درسه‌بعد در بر می‌گیرد. این ناحیه از چند نانومتر تا چند صد نانومتر را شامل می‌شود. در نقطه‌های کوانتومی الکترون‌ها درست مثل وضعیت یک اتم، موقعیت‌های گسسته‌ای از انرژی را اشغال می‌کنند. به‌همین علت به آن‌ها اتم‌های مصنوعی نیز گفته می‌شود. در مقایسه با سیم کوانتومی که در دوبعد و لایه‌های کوانتومی که در یک‌بعد نانو هستند، نقطه‌های کوانتومی نانوساختارهای سه‌بعدی هستند. همچنین این ترکیب‌ها به‌دلیل بازده کوانتومی بالا در وسیله‌های نوری کاربرد زیادی دارند.

نقطه‌های کوانتومی، به‌خاطر کوچک بودنشان، دسته‌ی منحصر به‌فردی از نیمه‌رساناها به‌شمار می‌روند. پهنای آن‌ها، بین ۲ تا ۱۰ نانومتر، یعنی معادل کنار هم قرار گرفتن ۱۰ تا ۵۰ اتم است. در این مقیاس کوچک، مواد رفتار متفاوتی دارند و این رفتار متفاوت قابلیت‌های بی‌سابقه‌ای در کاربردهای علمی و فنی به نقطه‌های کوانتومی می‌بخشد.

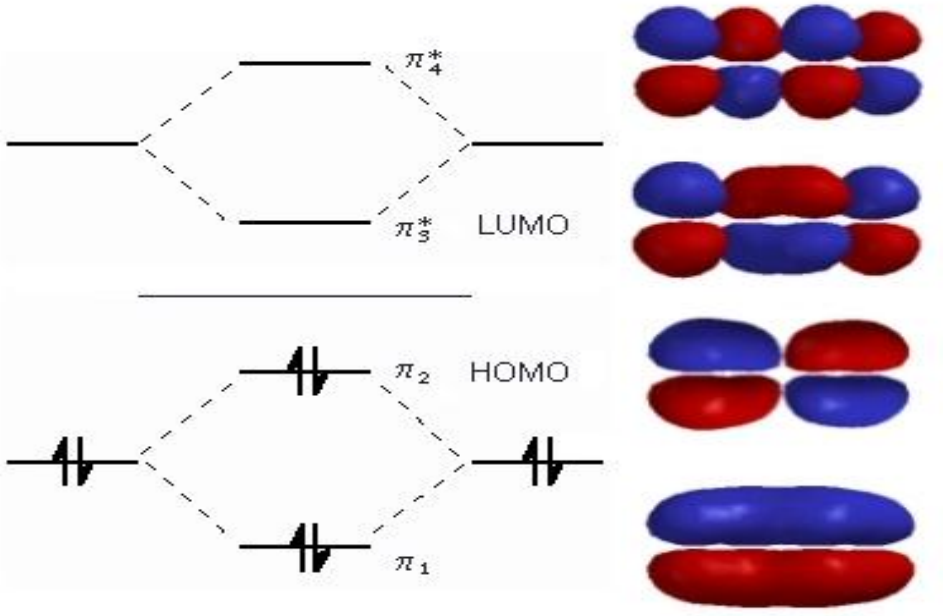
از آنجا که نقطه‌های کوانتومی در دسته مواد نیمه‌رسانا قرار می‌گیرند، ذکر بعضی از خاصیت‌های کلی این مواد خالی از لطف نیست. در مواد نیمه‌رسانا درحالت کپه‌ای، درصد بسیار کمی از الکترون‌ها در نوار رسانش قرار می‌گیرند و بیشتر الکترون‌ها در نوار ظرفیت قرار دارند، به‌طوری که آن‌ها را به‌طور تقریبی پر می‌کنند. همین پدیده باعث می‌شود که مواد نیمه‌رسانا در حالت عادی نارسانای جریان الکتریکی باشند. در ساختار این دسته مواد، گاف انرژی مابین بالاترین نوار انرژی اشغال شده و پایین‌ترین نوار خالی دارای اهمیت فوق‌العاده‌ای

[1]- Foke Space

در بررسی ویژگی‌های رسانایی آن‌ها است. این گاف انرژی به گاف (هومو-لومو)[1] معروف است [شکل(۱-۲)]. اگر الکترون‌های بیشتری بخواهند در نوار رسانش قرار گیرند، باید انرژی کافی برای بالا رفتن از گاف انرژی دریافت کنند [۱۰].

تحریکی که باعث جهش الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش و ایجاد حفره می‌شود، باید بیش از پهنای گاف انرژی داشته باشد. انرژی پهنای گاف در نیمه‌رساناهای کپه‌ای، مقدار ثابتی است که تنها به ترکیب آن مواد بستگی دارد. الکترون‌هایی که با رفتن به نوار رسانش برانگیخته شده‌اند، بعد از مدتی دوباره به نوار ظرفیت برمی‌گردند. در این بازگشت، ابتدا الکترون‌ها جهش‌های بسیار کوچکی می‌کنند و از طریق لرزش‌های گرمایی انرژی‌شان را به بقیه توده‌ی ماده منتقل می‌کنند که در نتیجه انرژی به پایین‌ترین تراز در نوار رسانش می‌رسد و سپس با تابش انرژی به‌صورت نور، به نوار ظرفیت منتقل می‌شوند. از آنجا که گاف انرژی نیمه‌رسانا کاملاً معین است، نور تنها در طول‌موج معینی تابش می‌شود. و این مبنای خاصیت تابشی نقطه‌های کوانتومی است که در ساخت بسیاری از مواد الکترونیکی و صنعتی به‌کار می‌رود.

در نقطه‌های کوانتومی امکان تغییر اندازه‌ی گاف انرژی وجود دارد. می‌توان با این امکان، طول‌موج نور تابش‌شده را تنظیم کرد. با توجه به این‌که ترازهای انرژی در نقطه‌های کوانتومی دیگر پیوسته نیستند، کاستن یا افزودن تعدادی اتم به نقطه‌ی کوانتومی، باعث تغییر در حاشیهٔ گاف انرژی می‌شود.



شکل1-2- نمایی از گاف (هومو-لومو).

[1]-Homo-Lumo

نقطه‌های کوانتومی نیمه‌رسانا از طریق تحریک الکتریکی یا توسط گستره‌ی وسیعی از طول‌موج‌ها، در بسامدهای مشخصی به تابش می‌پردازند، به این شکل که بسامدی از نور را جذب کرده و در بسامدی مشخص- که تابع اندازه‌ی آن‌ها است- به نشر نور می‌پردازند. این ذره‌ها همچنین می‌توانند برحسب ولتاژ اعمال‌شده، به بازتاب، شکست یا جذب نور بپردازند. این ویژگی کاربردهایی در مواد فتوکرومیک و یا الکتروکرومیک (موادی که به‌ترتیب بر اثر اعمال نور یا الکتریسیته تغییر رنگ می‌دهند) و پیل‌های خورشیدی دارند. علاوه بر این، از اسپین یک الکترون در یک نقطه‌ی کوانتومی می‌توان برای نمایش یک بیت کوانتومی یا کیوبیت در یک رایانه‌ی کوانتومی استفاده کرد. از کاربردهای بالقوه برای نقطه‌های کوانتومی می‌توان به کاربرد در لیزرهای دارای طول‌موج‌های بسیار دقیق، رایانه‌های کوانتومی و نشان‌گرهای زیستی اشاره کرد[۱۱] .

۱-۳ سیم‌های کوانتومی

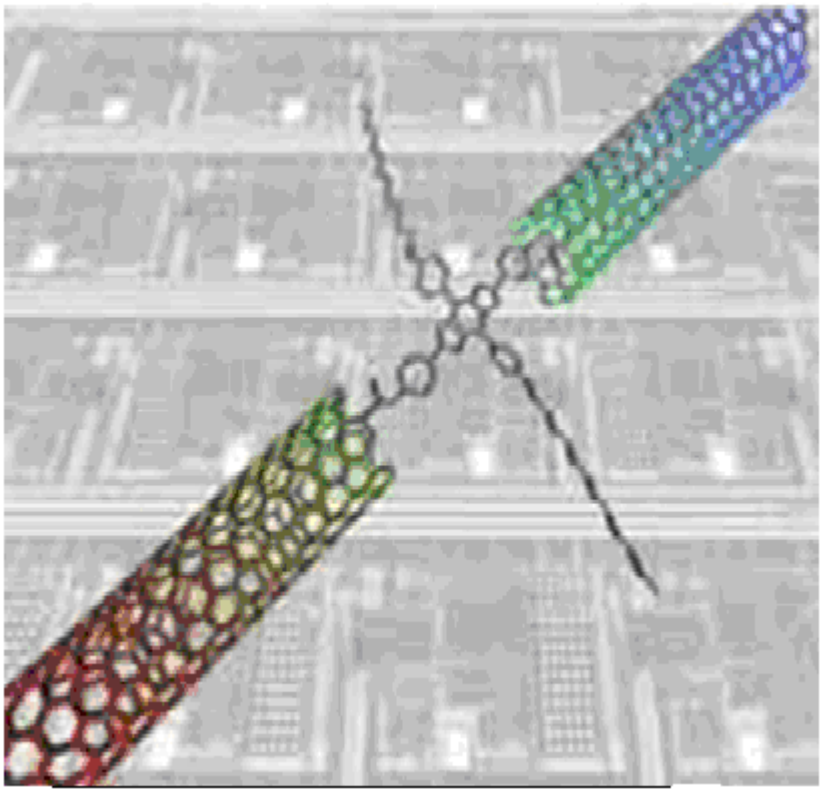
نانوسیم، یک نانوساختار یک‌بعدی است و همان‌طور که ذکر شد، چون در این ابعاد اثرهای کوانتومی مهم هستند این سیم‌ها، سیم‌های کوانتومی نیز نامیده می‌شوند. نانوسیم‌ها می‌توانند رسانا یا نیمه‌رسانا باشند و این ویژگی باعث شده‌است که بشر ضمن به‌کار بردن آن‌ها در بسیاری از وسایل نانو الکترونیکی، به استفاده‌ی بسیار فراتر از آن‌ها در ساخت این‌گونه وسیله‌ها امیدوار باشد. نانوسیم‌ها را به شیوه‌های مختلفی مانند لیتوگرافی یا چاپ روی یک سطح، فرآیند رشد شیمیایی در یک محیط گازی یا مایع، روش سنتز بخار مایع جامد و غیره تولید می‌کنند. کار روی نانوسیم‌ها هنوز تا حد زیادی در مرحله تحقیق قرار دارد و مشکل اتصال آن‌ها هنوز بر سر راه کسانی است که قصد ساخت قطعه‌های پیچیده‌ی تجاری از نانوسیم‌ها را دارند.

نانوسیم‌ها در انواع مختلفی مانند نانوسیم‌های فلزی، نانو سیم‌های آلی و نانوسیم‌های نیمه‌رسانا ساخته می‌شوند و در این بین نانوسیم‌های فلزی به‌خاطر خاصیت‌هایی که دارند نویدبخش کارایی زیاد در قطعات الکترونیکی هستند. از جمله مهم‌ترین کاربردی که می‌توان برای نانوسیم‌ها نام برد این است که در راستای دستیابی به قطعه‌های الکترونیکی نانومقیاس پیچیده، مسئله‌ی اتصال‌دهی آن‌ها دارای اهمیت فوق‌العاده‌ای است و امکان انجام این کار فقط توسط نانوسیم‌ها و همچنین نقطه‌های کوانتومی وجود دارد.

نانوسیم‌ها یا نقطه‌های کوانتومی که به این منظور مورد استفاده قرار می‌گیرند را با عنوان پل مولکولی معرفی می‌کنند و امروزه مبحث پل مولکولی و بررسی ویژگی‌های مختلف مانند خاصیت رسانایی آن از به‌روزترین مبحث‌های رایج در زمینه‌ی علم نانو است[۱۲] .

به‌تازگی دانشمندان موفق شده‌اند با اتصال دو نانوله‌ی کربنی توسط یک پل مولکولی، نانولوله‌های کربنی و مولکول‌های آلی دارای بهترین کیفیت را در یک کلید الکترونیکی منفرد با هم ترکیب نمایند. اتصال

موفقیت‌آمیز این نانولوله‌های کربنی به یک‌دیگر در یک حالت پایدار، امکان افزایش قابل ملاحضه‌ای را در سرعت و قدرت ابزارهای متنوع الکتریکی ایجاد می‌کند [۱۳] [شکل (۱-۳)].



شکل۱-۳- اتصال نانولوله‌ی کربنی توسط پل مولکولی.

برای بررسی رسانایی نانوسیم‌ها می‌بایست آن‌ها را بین دو الکترود قرار دارد و این رسانایی به ابعاد نانو سیم‌ها وابسته است. نانوسیم‌ها شکل‌های ویژه‌ای دارند. بعضی وقت‌ها شکل‌های نابلوری و در برخی موارد حالت مارپیچی به خود می‌گیرند. نابلوری بودن آن‌ها به‌دلیل یک‌بعدی بودنشان است. همچنین نانوسیم‌ها به‌دلیل ویژگی‌های طبیعی الکتریکی خود که در حضور مواد خاص دچار تغییر می‌شوند، قابلیت استفاده به‌صورت سنسور را دارند.

۱-۴ بررسی منابع

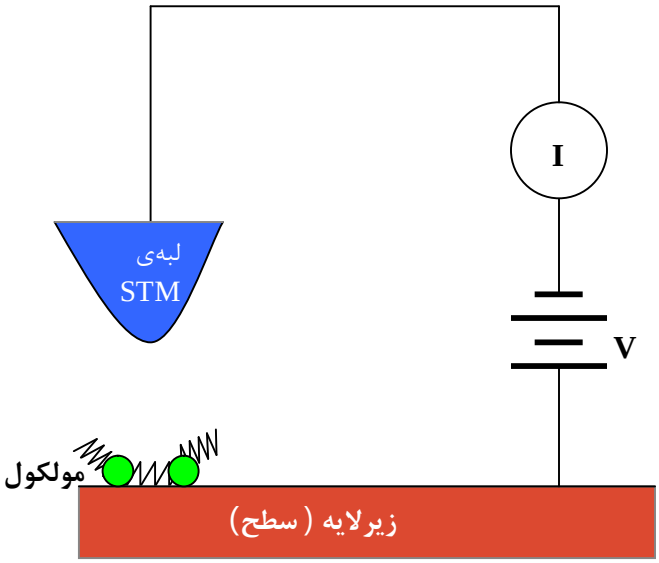
همان‌طور که در بخش قبل ذکر شد، توأم شدن مطالعه‌ها در زمینه‌های مختلف نانو و پیشرفت صنعت الکترونیک باعث شد تا در کنار کارهای نظری زیادی که برای پیشرفت در این زمینه انجام می‌گیرد، رشد در

زمینه‌ی کارهای آزمایشگاهی برای توجیه نتیجه‌های حاصل از کارهای نظری نیز سرعت دو چندانی پیدا کند. چرا که پیدا شدن هر طرح آزمایشگاهی برای توجیه و بررسی رابطه‌های پیدا شده از کارهای نظری، این نوید را دارد که بتوان دستگاه و وسیله‌های بهتری برای زندگی بشر تولید کرد. در ادامه‌ی این فصل ما سعی خواهیم کرد گوشه‌ای از کارهای علمی شامل کارهای آزمایشگاهی یا نظری که در راستای پایان‌نامه‌ی حاضر انجام شده‌است را به‌صورت مختصر بیان کنیم. چون بیشتر کاری که در این پایان‌نامه انجام شده است به رسانایی پل‌های مولکولی بر می‌گردد، در این قسمت سعی شده است که به‌طور اختصاصی مطالعه‌های انجام شده در این مورد قرار گیرد.

سخت‌ترین قسمت کار برای اندازه‌گیری ویژگی‌های رسانش مربوط به یک پل مولکولی ساخت وضعیتی است که اطمینان داشته باشیم تنها یک پل مولکولی نقش اتصال در ساختار الکترونیکی چند کاناله را به عهده دارد و حدود سال‌های ۱۹۹۰ تعداد روش و فن متفاوت برای انجام این کار ارائه شد.

یکی از راه‌های تحقیق ویژگی‌های رسانش یک مولکول استفاده از روشی موسوم به STM[1] است. روش STM برپایه‌ی بهره‌گیری از تحلیل اتمی جریان‌های ناشی از تونل‌زنی، می‌تواند تصویری از سطح‌ها ایجاد کند. با تثبیت موقعیت نوک پایانه STM بر بالای یک مولکول واقع بر روی سطح رسانا، می‌توان به‌طورمستقیم، ویژگی‌های متعدد از یک مولکول، به‌طور مثال چگالی حالت‌های موضعی و رسانش سامانه را با اعمال ولتاژ بایاس اندازه‌گیری کرد. طرحی از وضعیت این روش در شکل (۱-۴) نشان داده شده است. شایان ذکر است که اندازه‌گیری جزئیات طیف رسانش با این روش مستلزم ایجاد شرایط پایدار مکانیکی بسیار بالایی است. به عبارت دیگر شرایط آزمایشگاهی برای انجام آزمایش باید به‌گونه‌ای باشد که تغییرات محیطی در هنگام آزمایش به‌درستی کنترل شود و چشم‌گیر نباشد، چرا که کوچک‌ترین تغییرهایی در شرایط سامانه می‌تواند گاف تونل‌زنی جریان را تغییر دهد [۱۴].

[1]- Scanning Tunneling Microscope



شکل۱-۴- اندازه‌گیری رسانایی با STM برای مولکول واقع بریک سطح مس[۱۴].

اولین نظریه‌ی STM در سال ۱۹۸۳ به‌وسیله‌ی ترساف و هامان[1] ارایه شد [۱۵] و تنها چند سال بعد از کشف، برای فرآیندهای تونل‌زنی کشسان به‌کار برده شد. اما آن‌ها خیلی زود فهمیدند که روش STM در اصل می‌تواند از طریق معلوم کردن مدهای نوسانی فعال و انرژی‌های موثر بر طیف رسانش، با روش‌های طیف‌سنجی نوسانی ترکیب شود و اطلاعات زیادی با ریزه‌کاری زیاد درباره‌ی مولکول‌ها به‌دست آورد [۱۶].

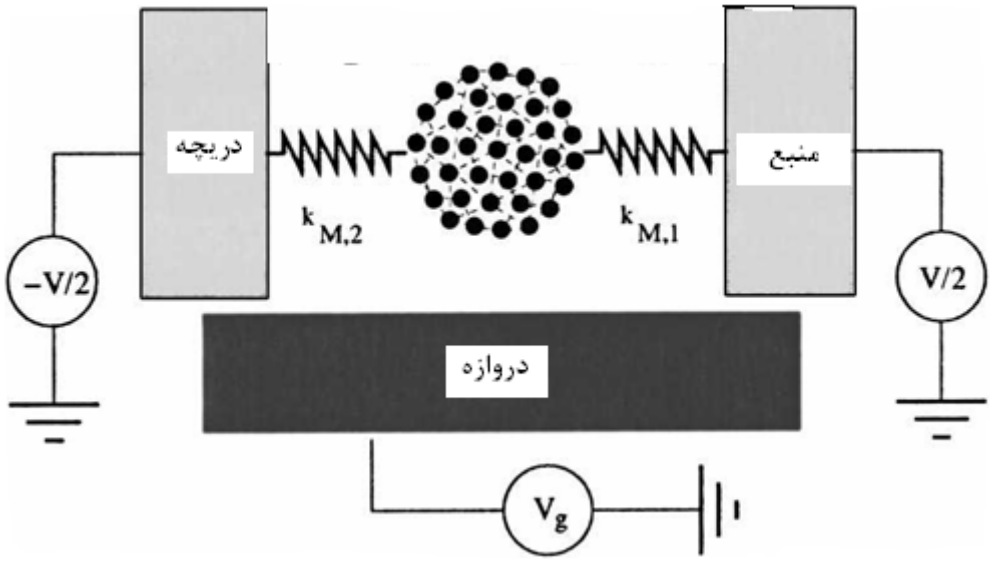
یک نظریه از طیف‌سنجی تونل‌زنی ناکشسان الکترون با STM موسوم به (IETS-STM) در سال ۱۹۸۷ به‌وسیله‌ی برسون و باراتوف[2] [۱۷] داده شده است که در آن سرعت‌های کشسان و ناکشسان به‌وسیله‌ی نظریه‌ی اختلال مرتبه‌ی دوم و قانون طلایی فرمی تخمین زده می‌شود. بر اساس این نظریه آن‌ها پیش‌بینی کردند که تحت حالت‌های پایا تشدید تونل‌زنی به‌وسیله‌ی برهم‌کنش با نوسان‌های مولکولی می‌تواند با کاهش چند درصدی همراه شود. به‌علاوه آن‌ها استدلال کردند که در این فرآیند اثر تشدید برجسته‌تر است و آن بخشی از مدولاسیون دامنه‌ی تونل‌زنی که ناشی از نوسان‌ها است، قابل چشم‌پوشی است. قبل از سال ۱۹۹۸ نبود که طیف‌سنجی تونل‌زنی ناکشسان الکترون به STM برای اولین بار به‌طور موفقیت‌آمیزی اثبات شد. این کار بزرگ توسط استریپ[3] و هم‌کاران انجام شد [۱۸]. آن‌ها به‌وسیله‌ی STM یک مولکول منفرد C_2H_2 جذب شده روی سطح مس را مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها یک اثر برانگیختگی نوسانی به‌وسیله‌ی الکترون‌های تونل‌زنی پیدا کردند و تغییرهای مربوط به رسانایی را مشاهد کردند. امروزه اثرهای موثر بر

[1]- Tersoff and Hamann
[2]- Persson and Baratoff
[3]- Stripe

افزایش و کاهش رسانایی در تعداد زیادی مولکول با روش IETS-STM مورد مطالعه واقع می‌شوند و ویژگی‌های مختلف رسانایی آن‌ها در شرایط مختلف قابل بررسی است.

لورنت[1] و پرسون [۱۹]، آزمایش موفقی از استیلن روی سطح مس را با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی و تعمیم بس‌ذره‌ای از نظریه‌ی ترسف-هامان طراحی کردند. آن‌ها ساختار مولکول و همچنین مدهای نوسانی مختلف مولکول و سهم آن‌ها در رسانش را مورد مطالعه قرار دادند.

پارک[2] و همکاران [۲۰]، رسانش مربوط به یک مولکول C_{60}را به‌وسیله‌ی روشی موسوم به BJE[3] مورد بررسی و آزمایش قرار داند. مطابق شکل (۱-۵) آن‌ها موفق شدند که اتصالی از مولکول C_{60} را میان دو الکترود ایجاد کنند و رسانش مربوط به آن‌را در دمای اتاق اندازه‌گیری نمایند. الگوی مشاهده شده در این مورد برگرفته از الگوی استتار کولومبی است که گاف انرژی رسانش مربوطه در نتیجه‌ی اضافه و کم کردن یک الکترون از مولکول C_{60} ایجاد می‌شود. نتایج به‌دست آمده اطاعاتی را در مورد یک برانگیختگی کوانتیده با انرژی‌ای از مرتبه‌ی $5eV$ آشکار کردند که دلیلی برای فراهم آمدن جفت‌شدگی میان نوسان‌های مولکولی با تک‌الکترون رسانش است.



شکل۱-۵- اندازه‌گیری رسانش الکتریکی مولکول C_{60} در حضور جفت‌شدگی الکترون-فونون [۲۰].

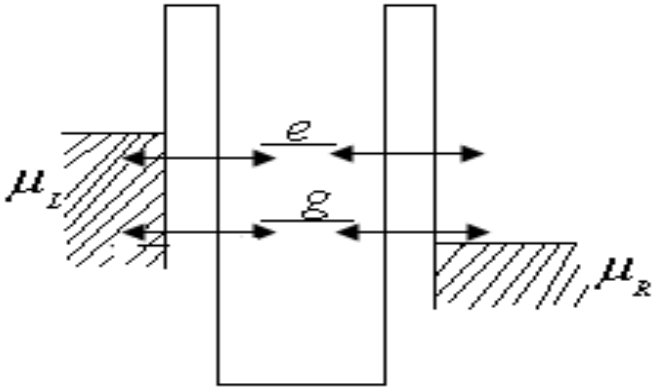
برای توجیه آزمایش فوق بریگ و فلنبرگ[4] موفق شدند یک نظریه‌ی پیچیده را با جزئیات زیاد ارایه دهند. در این کار اثر نوسان‌های مولکولی و جفت‌شدگی الکترون رسانش با فونون‌ها بر منحنی I-V قابل توجیه بود.

---

[1]- Lorent
[2]- Park
[3]- Break Junctions Electro Migration
[4]- Braig and Flensberg

در سال ۲۰۰۲ اسمیت[1] و هم‌کاران موفق شدند رسانایی یک مولکول هیدروژن را در دمای محدود اندازه‌گیری کنند. آن‌ها کار خود را تنها با یک مقدار کم از گاز هیدروژن که درون یک چنبره‌ی خلاء قرار داشت انجام دادند و در این ساختار پایا یک رسانایی از مرتبه‌ی کمیت کوانتومی $G_0 = 2e^2/\mathbf{h}$ مشاهده کردند. با مطالعه‌ی منحنی دیفرانسیل رسانایی برحسب ولتاژ بایاس برای این آزمایش، آن‌ها متوجه وجود یک دامنه‌ی تشدید در یک ولتاژ بایاس خاص شدند که به‌صورت جفت‌شدگی برانگیختگی‌های نوسانی مولکول هیدروژن با الکترون رسانش قابل تفسیر بود [۲۱].

توموکی[2] و هم‌کاران ویژگی‌های رسانش نقطه‌های کوانتومی را با در نظر گرفتن برهم‌کنش قوی الکترون-فونون به‌صورت نظری مورد مطالعه قرار داند. آن‌ها نشان دادند که اگر مطابق شکل (۱-۶) در یک نقطه‌ی کوانتومی، فاصله‌ی میان ترازهای g و e که به دو رسانای ایده‌ال متصل هستند، با انرژی فونون‌های نوری جفت‌شود، برهم‌کنش الکترون-فونون و در پی آن تشکیل پولارن[3]، حالت‌های همدوسی از الکترون و فونون‌های نوری را نتیجه می‌دهد.



شکل۱-۶- مدلی از نقطه‌ی کوانتومی دو ترازه.

آن‌ها نشان دادند که در نمودار کمیت دیفرانسیل رسانایی (G) برحسب ولتاژ بایاس ، تشکیل پولارن حداکثر ارتفاع G را تحت فشار قرار می‌دهد. به این معنی که شدت جریان الکتریکی در انرژی‌های متناظر کاهش چشم‌گیر دارد و این اتفاق ناشی از رقابت میان تشدید تونل‌زنی (تشدید میان ترازها در نقطه‌ی کوانتومی و حالت‌های موجود در رساناها) و شکل‌گیری پولارن‌ها است. از طرفی در نمودار رسانش یک دره‌ی عمیق را می‌توان میان هر دو قله‌ی متوالی مشاهده کرد که وجود این دره‌ها ناشی از تداخل ویران‌گر میان

[1]- Smit
[2]- Tokomi
[3]- Polaron