

NANOPHYSIQUE

INTRODUCTION PHYSIQUE AUX NANOSCIENCES

Ch 5. NANOTUBES DE CARBONE

Partie 2

James Lutsko

Lecture 7, 2018-2019

Nanotubes de carbone

- Introduction
 - Histoire
 - Carbone
 - Hybridization
- Tight-binding calculations
 - Principe
 - Example: trans
 - Graphene π -liens
 - Graphene σ -liens
- Structure de carbone nanotubes
- Structure Electronique
- Synthesis
- Transport
- Multi-walled nanotubes

Structure

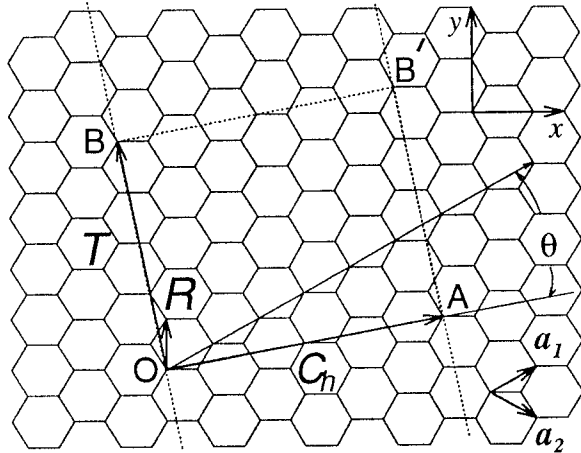
	zigzag	armchair	chiral
C	(n,0)	(n,n)	(n,m)
T	(1,-2)	(1,-1)	$(\frac{2m+n}{d_R}, -\frac{2n+m}{d_R})$
R	(1,-1)	(1,0)	
L/a	n	$\sqrt{3}n$	$\sqrt{m^2+n^2+nm}$
T	$\sqrt{3}$	1	$\sqrt{3}L/d_R$
N	2n	2n	$2L^2/(a^2 d_R)$

$$d_R = \gcd(2m+n, 2n+m)$$

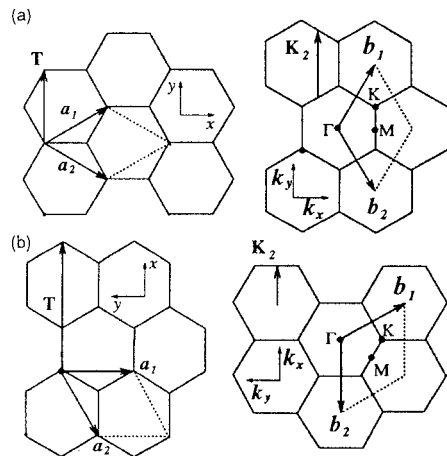
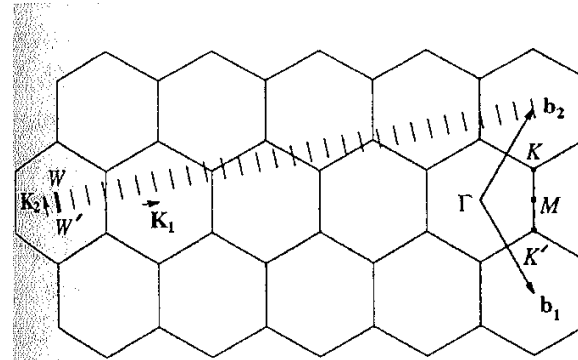
$$= \begin{cases} d & \text{if } n-m \text{ is not a multiple of } 3d \\ 3d & \text{if } n-m \text{ is a multiple of } 3d \end{cases}, \quad d = \gcd(n, m)$$

Resume : Nanotube structure

réseau

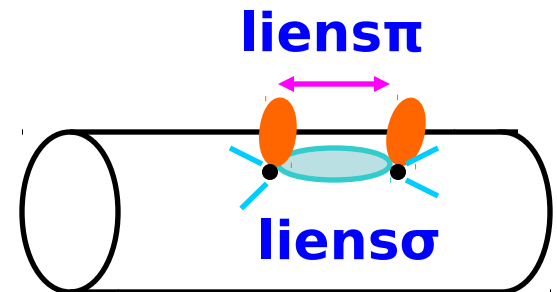


zone de Brillouin



« armchair » (n,n)

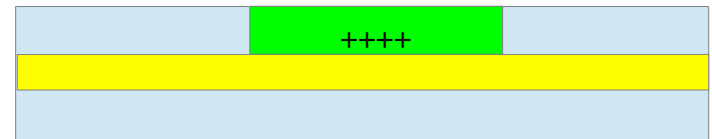
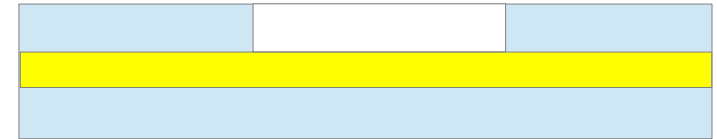
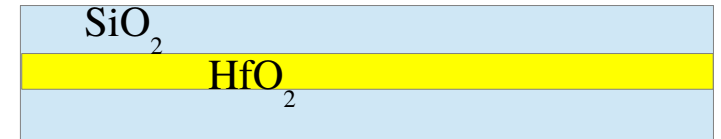
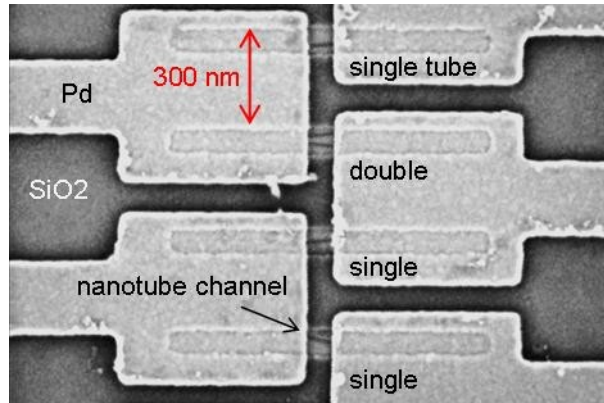
« zigzag » $(n,0)$



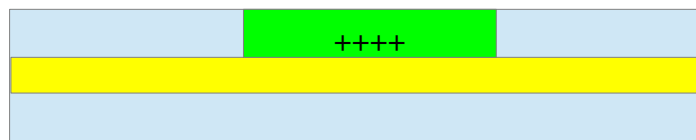
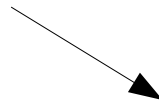
Nanotubes de carbone

- Introduction
 - Histoire
 - Carbone
 - Hybridization
- Tight-binding calculations
 - Principe
 - Example: trans
 - Graphene π -liens
 - Graphene σ -liens
- Structure de carbone nanotubes
- Structure Electronique
- Synthesis
- Transport
- Multi-walled nanotubes

Nanotubes



“High-density integration of carbon nanotubes via chemical self-assembly”,
Hongsik Park, Ali Afzali, Shu-Jen Han, George S. Tulevski, Aaron D. Franklin, Jerry Tersoff,
James B. Hannon & Wilfried Haensch, Nature Nanotechnology (Oct, 2012)



Bandes d'énergie du nanotube : zone folding

L'idée: La géométrie de la CN est un sous-ensemble d'une feuille infinie de graphène avec des frontières périodiques. Par conséquent, les ondes vecteurs de la CN sont un sous-ensemble de ceux pour le graphène et les bandes de l'énergie sont:

$$E_{CN}(\mathbf{k}_{CN}) = E_{GR}(\mathbf{k}_{CN})$$

C'est ce qu'on appelle "pliage de bande" car ce n'est pas nécessaire que $\mathbf{k}_{CN} \in \text{first Brillouin zone of Graphene}$.

Donc, nous avons besoin de les vecteurs disponible pour le CN.

Bandes d'énergie du nanotube

Théorème de Bloch $\psi(\mathbf{r}) = \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \phi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_j)$, \mathbf{R}_j dans le réseaux.

Bohr- von Karman conditions conditions à la limite

Graphene

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r} + N_l \mathbf{a}_l) &= e^{-i\mathbf{k} \cdot N_l \mathbf{a}_l} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \phi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_j) = \psi(\mathbf{r}) \\ &\rightarrow \mathbf{k} \cdot N_l \mathbf{a}_l = 2n_l \pi, \quad n_l \in \mathbb{Z} \\ &\rightarrow \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_l = 2\pi \frac{n_l}{N_l}, \quad 0 \leq n_l \leq N_l\end{aligned}$$

Nanotube

Reseaux avec unité cellulaire $(\mathbf{C}_h, \mathbf{T})$ est base de $2N$ points.

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{C}_h = 2n_C \pi \quad \mathbf{K} \cdot N_T \mathbf{T} = 2n_T \pi$$

(si la tube est un tore de longueur N_T)

$$\mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{C}_h = 2\pi \quad \mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{T} = 0$$

$$\mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{C}_h = 0 \quad \mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{T} = 2\pi$$

$$\mathbf{K} = n_C \mathbf{K}_1 + \frac{n_T}{N_T} \mathbf{K}_2$$

$$n_C, n_T \in ???$$



Bandes d'énergie du nanotube

Graphene

Vecteurs de base du réseau

$$\mathbf{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2} \right), \mathbf{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, -\frac{a}{2} \right)$$

Vecteurs de base du réseau réciproque

$$\mathbf{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right), \mathbf{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a} \right)$$

Nanotube

Vecteurs de base du réseau

$$\mathbf{C}_h = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2, \mathbf{T} = t_1\mathbf{a}_1 + t_2\mathbf{a}_2$$

Vecteurs de base du réseau réciproque

$$\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2 \quad \mathbf{C}_h \cdot \mathbf{K}_1 = 2\pi \quad \mathbf{T} \cdot \mathbf{K}_1 = 0$$

$$\mathbf{C}_h \cdot \mathbf{K}_2 = 0 \quad \mathbf{T} \cdot \mathbf{K}_2 = 2\pi$$

$$\mathbf{K}_1 = K_{11}\mathbf{b}_1 + K_{12}\mathbf{b}_2$$

$$K_{11}n + K_{12}m = 1 \quad K_{11}t_1 + K_{12}t_2 = 0$$

$$t_1 K_{11}n + t_1 K_{12}m = t_1$$

$$K_{12}(-t_2n + t_1m) = t_1$$

$$K_{12} = \frac{t_1}{-t_2n + t_1m} = \frac{t_1}{N}$$

$$\mathbf{K}_1 = \frac{1}{N}(-t_2\mathbf{b}_1 + t_1\mathbf{b}_2)$$

$$\mathbf{K}_2 = \frac{1}{N}(m\mathbf{b}_1 - n\mathbf{b}_2)$$



Bandes d'énergie du nanotube

$$\mathbf{K}_1 = \frac{1}{N}(-t_2 \mathbf{b}_1 + t_1 \mathbf{b}_2) \quad \mathbf{K}_2 = \frac{1}{N}(m \mathbf{b}_1 - n \mathbf{b}_2) \quad |\mathbf{K}_1| = \frac{2\pi}{|\mathbf{C}_h|} \quad |\mathbf{K}_2| = \frac{2\pi}{|\mathbf{T}|}$$

$$\mathbf{K} = n_C \mathbf{K}_1 + \frac{n_T}{N_T} \mathbf{K}_2 \quad n_C \mathbf{K}_1 = \left(-\frac{n_C t_2}{N} \mathbf{b}_1 + \frac{n_C t_1}{N} \mathbf{b}_2 \right)$$

$$\frac{n_C t_2}{N} = r \in \mathbb{Z} \text{ et } \frac{n_C t_1}{N} = s \in \mathbb{Z} \rightarrow n_C t_2 = rN, \quad n_C t_1 = sN$$

$$\text{mais } \gcd(t_1, t_2) = 1 \rightarrow N \text{ divise } n_C$$

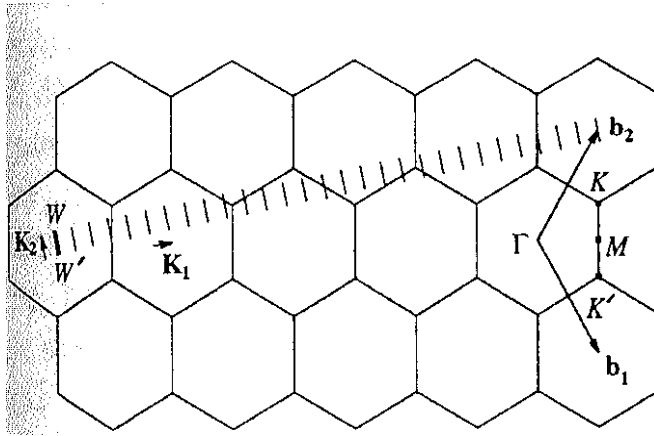
$$\rightarrow 0 \leq n_C < N$$

$$0 \leq n_T \leq N \times N_T$$

$$\mathbf{K} = n_C \mathbf{K}_1 + k \frac{\mathbf{K}_2}{|\mathbf{K}_2|}, \quad 0 \leq k = \frac{2\pi n_T}{|\mathbf{T}| N_T} \frac{2\pi n_T}{L} \leq \frac{2\pi}{|\mathbf{T}|}, \text{ si } N_T \gg 1$$

Bandes d'énergie du nanotube

$$\mathbf{K} = n_C \mathbf{K}_1 + k \frac{\mathbf{K}_2}{|\mathbf{K}_2|}, \quad 0 \leq k = \frac{2\pi n_T}{|\mathbf{T}| N_T} \frac{2\pi n_T}{L} \leq \frac{2\pi}{|\mathbf{T}|}, \text{ si } N_T \gg 1$$



$$\mathbf{C}_h = (4, 2), \quad \mathbf{T} = (4, -5), \quad N = 28$$

$$\mathbf{K}_1 = (5\mathbf{b}_1 + 4\mathbf{b}_2)/28$$

$$\mathbf{K}_2 = (4\mathbf{b}_1 - 2\mathbf{b}_2)/28$$

R. Saito, G. Dresselhaus & M. S. Dresselhaus,
Physical Properties of Carbon Nanotubes (Imperial College Press, London, 1998)

Bandes d'énergie du nanotube

vecteurs de base du réseau réciproque:

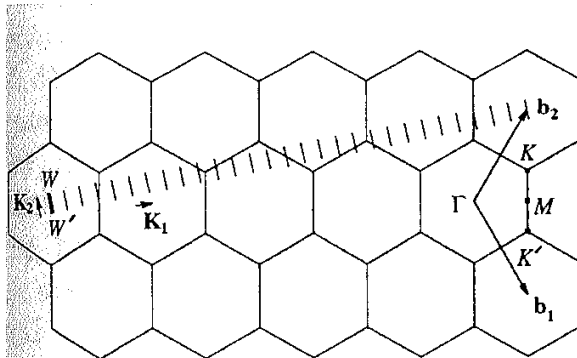
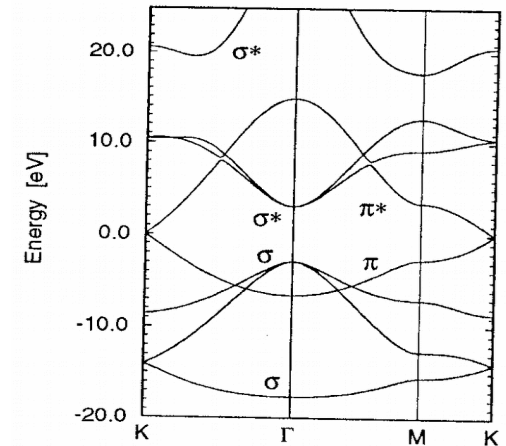
$$\mathbf{K}_1 = \frac{1}{N}(-t_2 \mathbf{b}_1 + t_1 \mathbf{b}_2)$$

$$\mathbf{K}_2 = \frac{1}{N}(m \mathbf{b}_1 - n \mathbf{b}_2)$$

Bandes d'énergie du nanotube à partir de la bande d'énergie du graphène:

$$E = E_{gr} \left(n_C \mathbf{K}_1 + k \frac{\mathbf{K}_2}{|\mathbf{K}_2|} \right), \quad 0 \leq n_C < N, \quad -\frac{\pi}{|\mathbf{T}|} \leq k \leq \frac{\pi}{|\mathbf{T}|}$$

$$E_{gr}(k) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3} k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)}$$

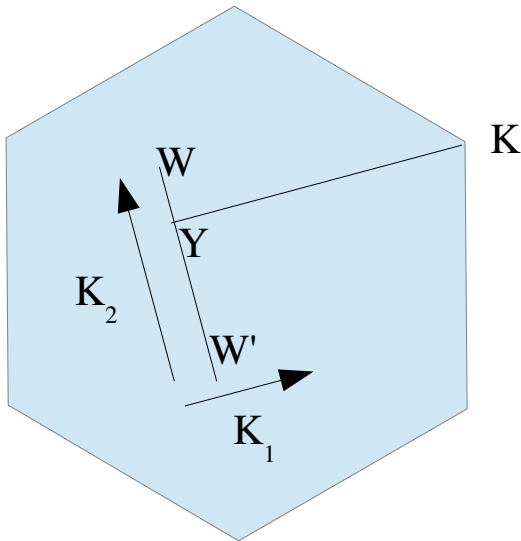


métallique si la point “K” est parmi

Bandes d'energie du nanotube

vecteurs de base du réseau réciproque:

$$\mathbf{K}_1 = \frac{1}{N}(-t_2 \mathbf{b}_1 + t_1 \mathbf{b}_2)$$

$$\mathbf{K}_2 = \frac{1}{N}(m \mathbf{b}_1 - n \mathbf{b}_2)$$


métallique si la point “K” est permis:

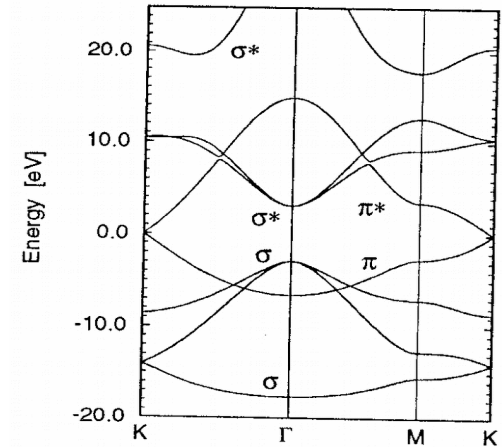
$$\bar{YK} = n \mathbf{K}_1, \quad n \in \mathbb{Z}$$

Mais:

$$\bar{YK} = \frac{2n+m}{3} \mathbf{K}_1$$

Alors, métallique si $\frac{2n+m}{3} \in \mathbb{Z} \Leftrightarrow \frac{n-m}{3} \in \mathbb{Z}$

Notez: “armchair” (n,n) toujours métallique.



Nanotubes Semiconducteurs

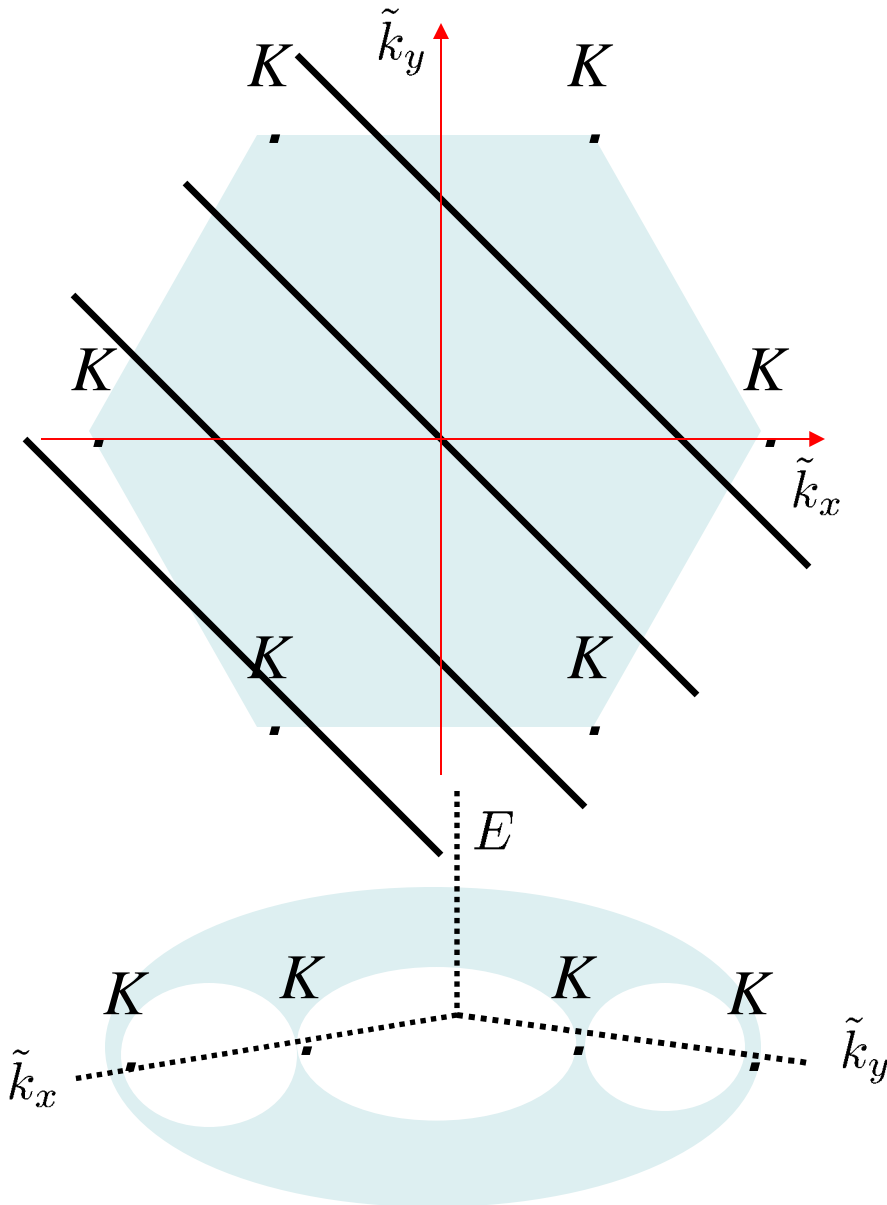
Bande d'énergie du graphène

Bandes d'énergie
semiconductrices pour
le nanotube

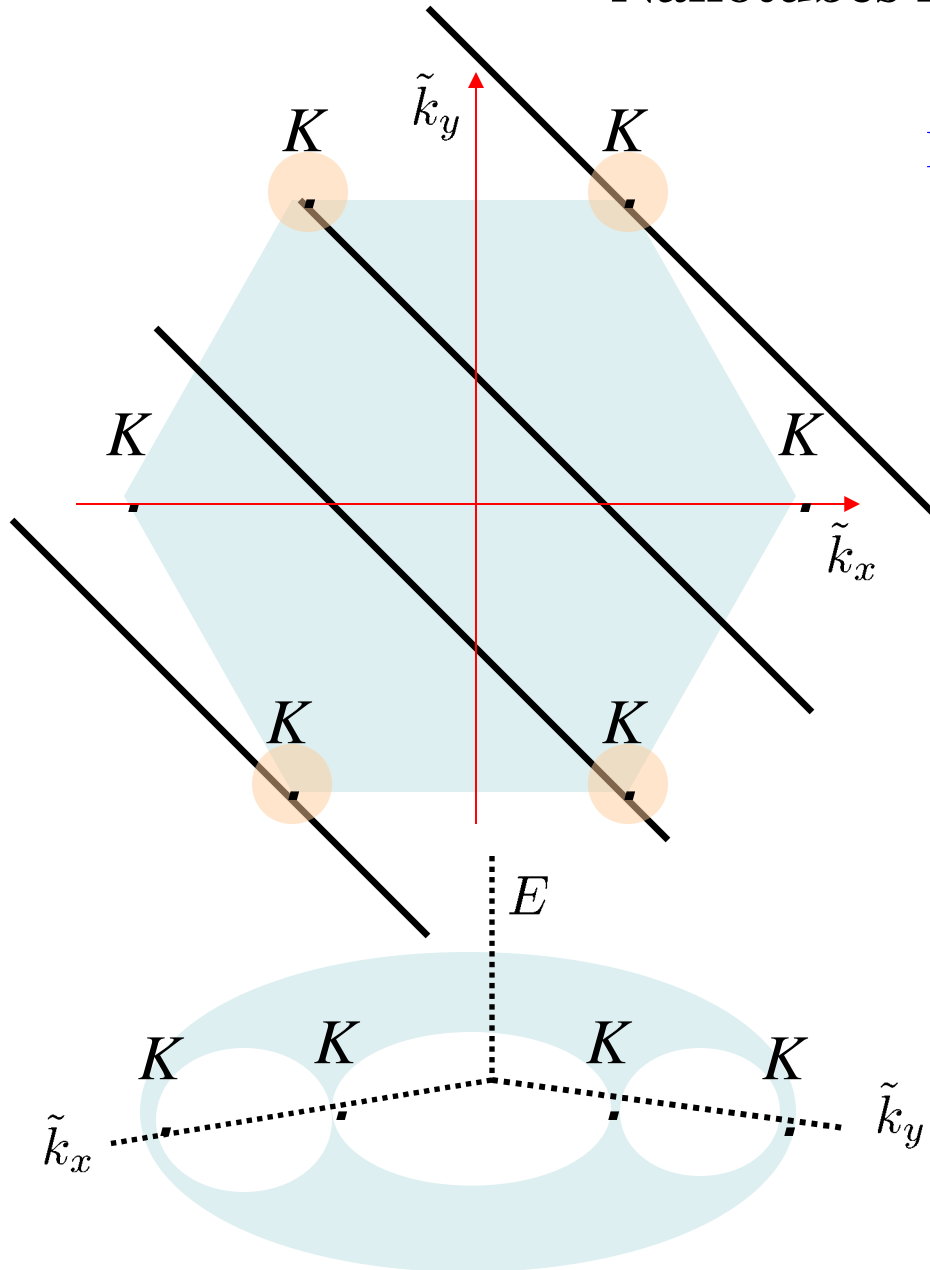


sections des conditions
aux bords périodiques

← niveau de Fermi : $E = 0$



Nanotubes Métalliques



Bande d'énergie du graphène

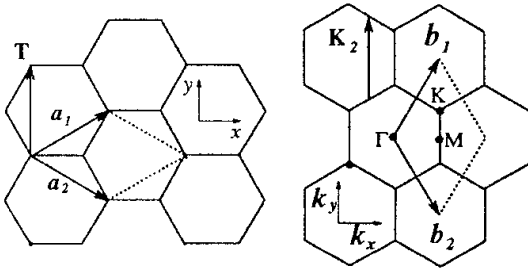
Bandes d'énergie
métalliques pour le
nanotube



sections des conditions
aux bords périodiques

← niveau de Fermi : $E = 0$

Nanotubes « Armchair » (n,n)



$$C_h = n a_1 + n a_2 \equiv (n, n)$$

$$T = a_1 - a_2$$

$$N = 2n$$

$$K_1 = \frac{1}{2n} (b_1 + b_2) = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}an}, 0 \right)$$

$$K_2 = \frac{1}{2} (b_1 - b_2) = \left(0, \frac{2\pi}{a} \right)$$

π bande d'énergie du graphène:
$$E_{gr} = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)}$$

π bandes d'énergie du nanotube:

$$E_{n_c}(k) = E_{gr}\left(k_x = \frac{2\pi n_c}{\sqrt{3}an}, k_y = k\right), \quad n_c = 0, 1, \dots, 2n-1, \quad -\frac{\pi}{a} \leq k \leq +\frac{\pi}{a}$$

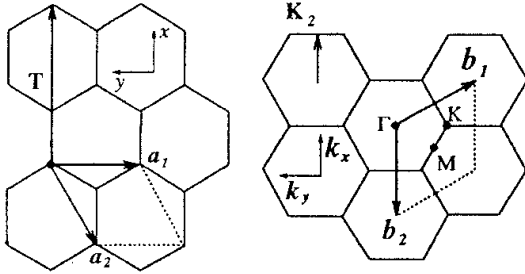
$$= \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\pi n_c}{n}\right) \cos\left(\frac{ka}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)}$$

$$E_{n_c}\left(ka = \pm \frac{2\pi}{3}\right) = \pm t \sqrt{2 + 2 \cos\left(\frac{\pi n_c}{n}\right)} \quad \text{métallique} \quad \text{car pas de « gap » (} n_c = n \text{)}$$

R. Saito, G. Dresselhaus & M. S. Dresselhaus,

Physical Properties of Carbon Nanotubes (Imperial College Press, London, 1998)

Nanotubes « zigzag » (n,0)



$$C_h = n \mathbf{a}_1 \equiv (n, 0)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{a}_1 - 2 \mathbf{a}_2$$

$$N = 2n$$

$$\mathbf{K}_1 = \frac{1}{2n} (2 \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) = \frac{1}{2n} \left(\frac{6\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right)$$

$$\mathbf{K}_2 = -\frac{1}{2} \mathbf{b}_2 = \frac{1}{2} \left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right)$$

π bandes d'énergie du nanotube:

$$E_{n_c}(k) = E_{gr} \left(\frac{\sqrt{3}\pi n_c}{na} - \frac{k}{2}, \frac{\pi n_c}{na} + \frac{\sqrt{3}k}{2} \right), \quad -\frac{\pi}{a\sqrt{3}} \leq k \leq \frac{\pi}{a\sqrt{3}} \quad 0 \leq n_c < 2n$$

$$\rightarrow \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}ka}{2}\right) \cos\left(\frac{n_c\pi}{n}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{n_c\pi}{n}\right)}$$

$$E_{n_c}(k=0) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{n_c\pi}{n}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{n_c\pi}{n}\right)} = 0 \Leftrightarrow \frac{n_c\pi}{n} = \frac{2\pi}{3} \Leftrightarrow n_c = \frac{2n}{3}$$

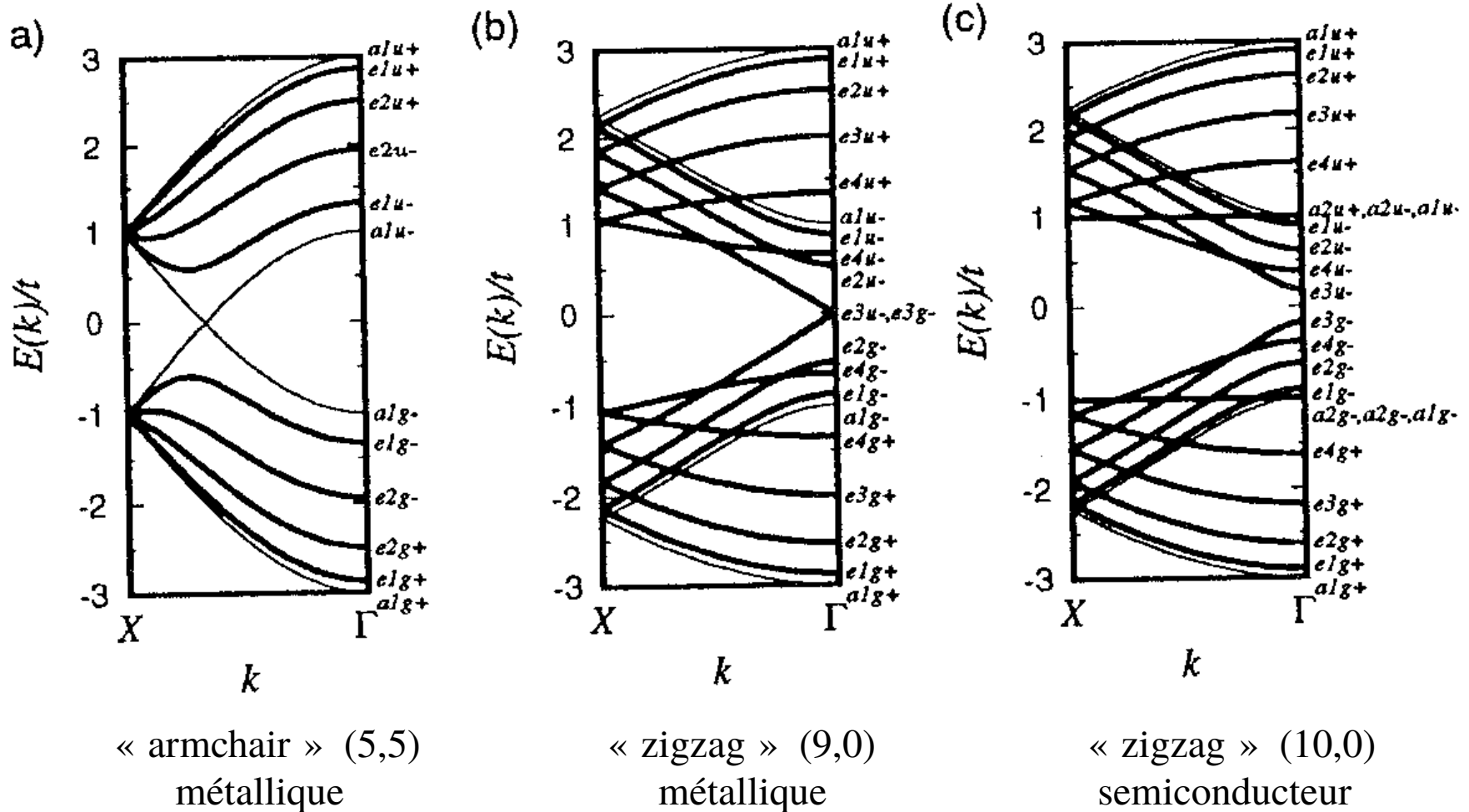
Possible seulement si n est un multiple de 3.

Si n est un nombre pair $E_{n/2}(k) = \pm t$ “dispersionless”

R. Saito, G. Dresselhaus & M. S. Dresselhaus,

Physical Properties of Carbon Nanotubes (Imperial College Press, London, 1998)

Nanotube : bandes d'énergie



R. Saito, G. Dresselhaus & M. S. Dresselhaus,
Physical Properties of Carbon Nanotubes (Imperial College Press, London, 1998)

Rappel : Density of states et van Hove singularity

Donc, le nombre des etat avec energie $E(\mathbf{k})$

$$g(E) dE = \int \delta(e(\mathbf{k}) - E) d\mathbf{k} = \int_{e^{-1}(E)} \frac{1}{|\nabla e(\mathbf{k})|} dS$$

$$|\nabla e(\mathbf{k})| = 0 \Leftrightarrow \text{van Hove singularity}$$

The band structure of CNTs has many stationary points resulting in many vH singularities which in turn create sharp peaks in the DOS. Optical transitions take place between these peaks leading to narrow emission and absorption spectra.

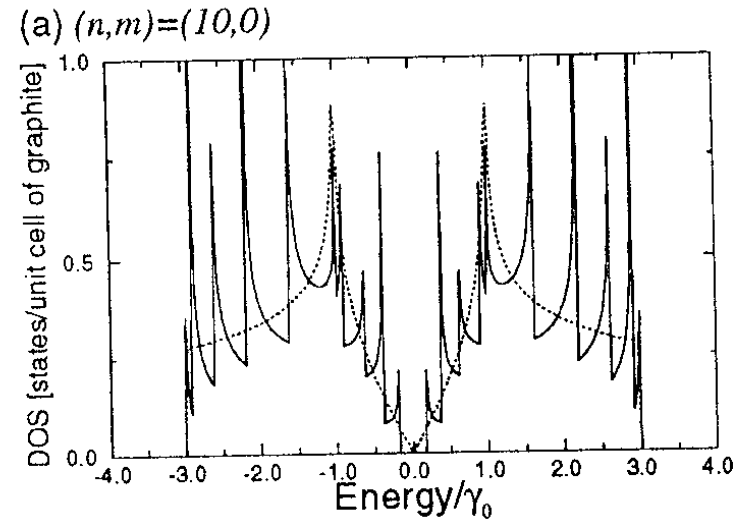
Nanotubes : density of states

DOS at Fermi energy

$$g(E_F) = \frac{8}{\sqrt{3}\pi a|t|} L$$

« zigzag » (10,0)
semiconducteur

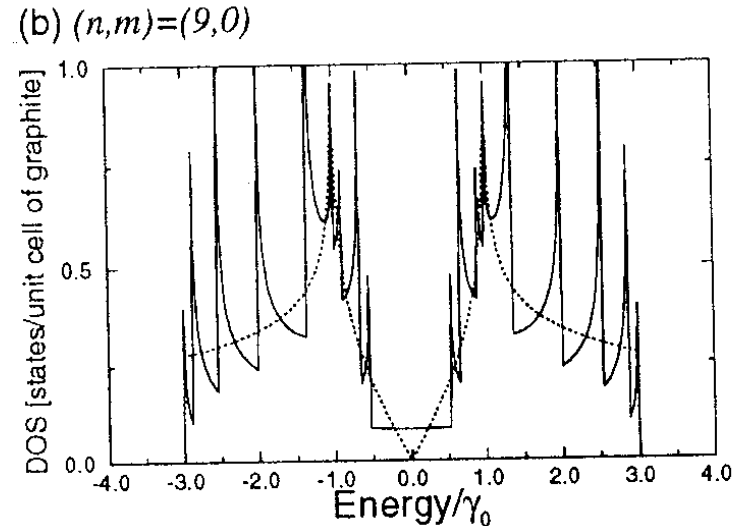
graphène (pointillés)



Gap for CN semiconductor

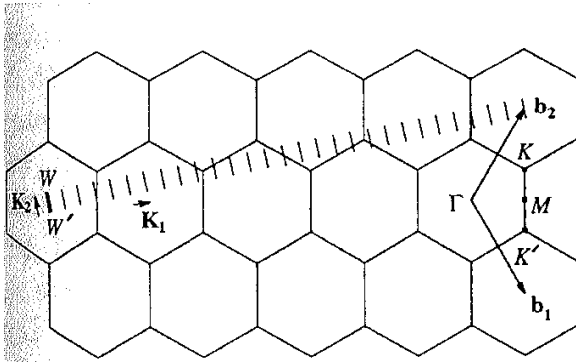
$$E_{gap} = \frac{|t|a_{cc}}{d_t}$$

« zigzag » (9,0)
métallique



Resume : bandes d'energie du nanotube

vecteurs de base du réseau réciproque:



$$\mathbf{K}_1 = \frac{1}{N} (-t_2 \mathbf{b}_1 + t_1 \mathbf{b}_2)$$

$$\mathbf{K}_2 = \frac{1}{N} (m \mathbf{b}_1 - n \mathbf{b}_2)$$

Bandes d'énergie du nanotube à partir de la bande d'énergie du graphène:

$$E_{\text{gr}}(k) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3} k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)}$$

$$E = E_{\text{gr}}\left(n_C \mathbf{K}_1 + k \frac{\mathbf{K}_2}{|\mathbf{K}_2|}\right), \quad 0 \leq n_C < N, \quad 0 \leq k \leq \frac{2\pi}{|\mathbf{T}|}, \text{ si } N_T \gg 1$$

propriété	$\text{gcd}[n-m, 3]$	d_R	multiplicité
semiconducteur	1	d	0 (gap d'énergie = $ t a_{C-C} / d_t$)
métal I	3	d	4 en $k=0$
métal II	3	$3d$	2 en $k = \pm 2\pi/3 T$

R. Saito, G. Dresselhaus & M. S. Dresselhaus,

Physical Properties of Carbon Nanotubes (Imperial College Press, London, 1998)

Nanotubes de carbone

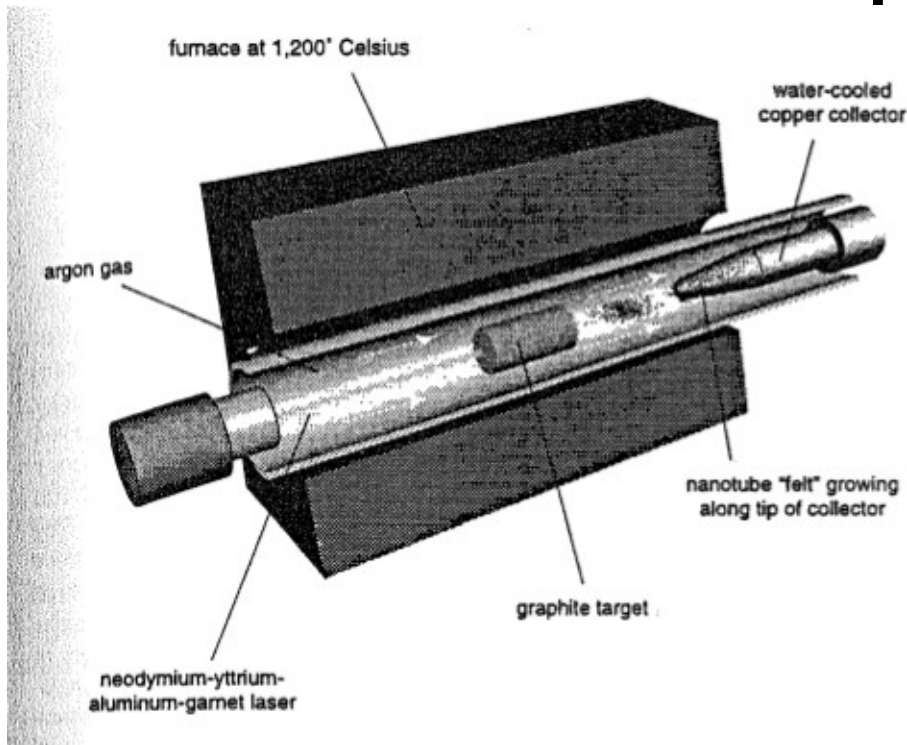
- Introduction
 - Histoire
 - Carbone
 - Hybridization
- Tight-binding calculations
 - Principe
 - Example: trans
 - Graphene π -liens
 - Graphene σ -liens
- Structure de carbone nanotubes
- Structure Electronique
- Synthesis
- Transport
- Multi-walled nanotubes

Histoire de synthesis

- La découverte de nanotubes de carbone
 - Nanotubes Multifeuillets (Iijima, Nature, 1991)
 - Nanotubes Monofeuillets (Iijima & Ichihashi Nature 1993, Bethune et al Nature 1993)
- La découverte de méthodes efficaces de production des nanotubes monofeuillets (quantité de 1 gramme).
 - Laser vaporisation (Thess et al, Science, 1996).
 - Carbon arc method (Journet et al, Nature 1997).

Je présente seulement deux méthodes - il ya beaucoup d'autres.

Laser vaporisation



Cible: graphite + catalyseur métallique à base de Ni, Co et Fe (pour produit des nanotubes monofeuillets).

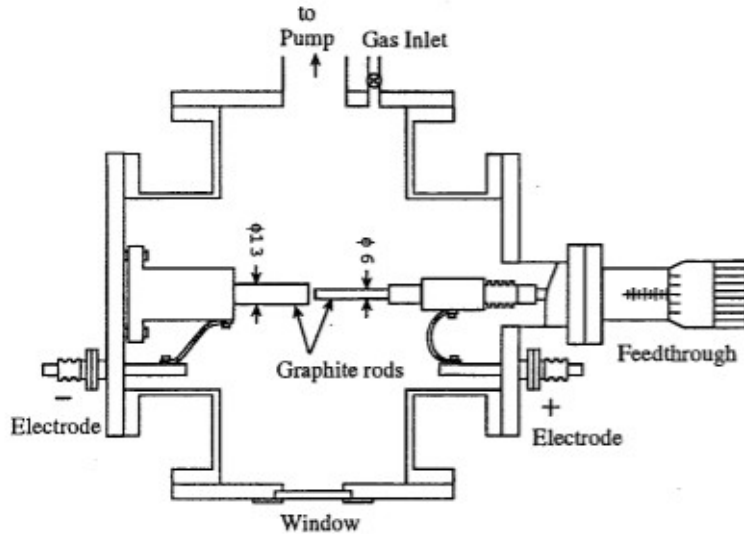
Température élevée empêche crystallization

R. Saito, G. Dresselhaus & M. S. Dresselhaus,
Physical Properties of Carbon Nanotubes
(Imperial College Press, London, 1998)

Le gaz inerte agit pour transporter les tubes au collecteur.

Propriétés très spécifiques: par exemple, presque seulement les nanotubes (10,10), (9,9) et (12,8)

Arc vaporisation



R. Saito, G. Dresselhaus & M. S. Dresselhaus,
Physical Properties of Carbon Nanotubes
(Imperial College Press, London, 1998)

Le graphite se sublime à 3200C

Arc electrique: ~30V, 50-120A
avec deux electrode de graphite
(plus catalyseur pour faire les
nanotubes monofeuillet).

L'anode se consume pour
former un plasma.

Le plasma se condense sur la cathode.

Le gaz inerte fonction seulement pour contrôle la température.

Un method qui n'est pas cher, qui est flexible, et qui produit le
grand quantitie.

Nanotubes de carbone

- Introduction
 - Histoire
 - Carbone
 - Hybridization
- Tight-binding calculations
 - Principe
 - Example: trans
 - Graphene π -liens
 - Graphene σ -liens
- Structure de carbone nanotubes
- Structure Electronique
- Synthesis
- Transport
- Multi-walled nanotubes

Transport: les échelles

- La moyenne parcours libre: L_m
 - La distance moyenne un électron se déplace avant qu'il répand à partir d'un centre de diffusion.
- La longueur d'onde Fermi: $\lambda_F = 2\pi/k_F$
 - La longueur d'onde de de Broglie pour les électrons à le niveau Fermi.
- La longueur de relaxation de phase: L_ϕ
 - La distance dans laquelle la phase d'un électron est préservée. Les collisions élastiques ne change pas le phase: seules les collisions qui changent l'énergie de l'électron. Donc, c'est la longueur moyenne entre des collisions inélastiques.

Pour transport, c'est seul les électrons près de l'énergie Fermi qui participes. Donc, on introduit les échelles de temps

$$L_m = v_F t_m, \quad L_\phi = v_F t_\phi$$

Le temps de relaxation de la quantité de mouvement et le temps de relaxation de phase: ce sont les temps pour un changement cumulatif de la quantité de mouvement de $\hbar k_F$ et de phase de π .

Vitesse dans l'états Bloch

États de Bloch sont des états étendus et ont une vitesse typique. En effet,

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \hbar^{-1} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}}$$

Preuve:

L'action de la Hamiltonian sur un état de Bloch est

$$H \psi = E \psi \wedge \psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u(\mathbf{r}) \rightarrow H(\mathbf{k}) u(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) u(\mathbf{r}) \quad H(\mathbf{k}) = H + \frac{\hbar^2}{i m} \mathbf{k} \cdot \nabla + \frac{\hbar^2}{2 m} k^2$$

On demande le développement de l'énergie comme:

$$E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = E(\mathbf{k}) + \mathbf{q} \cdot \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} + \frac{1}{2} \mathbf{q} \mathbf{q} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k} \partial \mathbf{k}} + \dots$$

Notez que la Hamiltonian peut être écrit comme

$$H(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = H(\mathbf{k}) + \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{q} \cdot \left(\frac{1}{i} \nabla + \mathbf{k} \right) + \frac{\hbar^2}{2 m} q^2$$

Donc, on peut développer l'effet de “q” avec la théorie de perturbation

Vitesse dans l'etats Bloch

Alors, il suit que

$$E(\mathbf{k}+\mathbf{q})=E(\mathbf{k})+\int \bar{u}(\mathbf{r})\left(\mathbf{q}\cdot\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{1}{i}\nabla+\mathbf{k}\right)\right)u(\mathbf{r})d\mathbf{r}+O(q^2)$$

On prende la limite $\mathbf{q}\rightarrow\mathbf{0}$ de sorte que

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} &= \lim_{\mathbf{q}\rightarrow\mathbf{0}} \frac{\partial E(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} = \int \bar{u}(\mathbf{r})\left(\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{1}{i}\nabla+\mathbf{k}\right)\right)u(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\ &= \int \bar{\psi}(\mathbf{r};\mathbf{k})\left(\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{i}\nabla\right)\psi(\mathbf{r};\mathbf{k})d\mathbf{r} \\ &= \langle \psi_k | \frac{\hbar^2}{im}\nabla | \psi_k \rangle\end{aligned}$$

Mais, l'opérateur de vitesse est défini par

$$\mathbf{v}=\frac{d\mathbf{r}}{dt}=(1/i\hbar)[\mathbf{r},H]=\mathbf{p}/m=\hbar\nabla/mi$$

Donc, on voit que

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}}=\hbar\langle \mathbf{v} \rangle$$

Vitesse dans l'etats Bloch

Alors, il suit que

$$E(\mathbf{k}+\mathbf{q})=E(\mathbf{k})+\int \bar{u}(\mathbf{r})\left(\mathbf{q}\cdot\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{1}{i}\nabla+\mathbf{k}\right)\right)u(\mathbf{r})d\mathbf{r}+O(q^2)$$

On prende la limite $\mathbf{q}\rightarrow\mathbf{0}$ de sorte que

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} &= \lim_{\mathbf{q}\rightarrow\mathbf{0}} \frac{\partial E(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} = \int \bar{u}(\mathbf{r})\left(\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{1}{i}\nabla+\mathbf{k}\right)\right)u(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\ &= \int \bar{\psi}(\mathbf{r};\mathbf{k})\left(\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{i}\nabla\right)\psi(\mathbf{r};\mathbf{k})d\mathbf{r} \\ &= \langle \psi_k | \frac{\hbar^2}{im}\nabla | \psi_k \rangle\end{aligned}$$

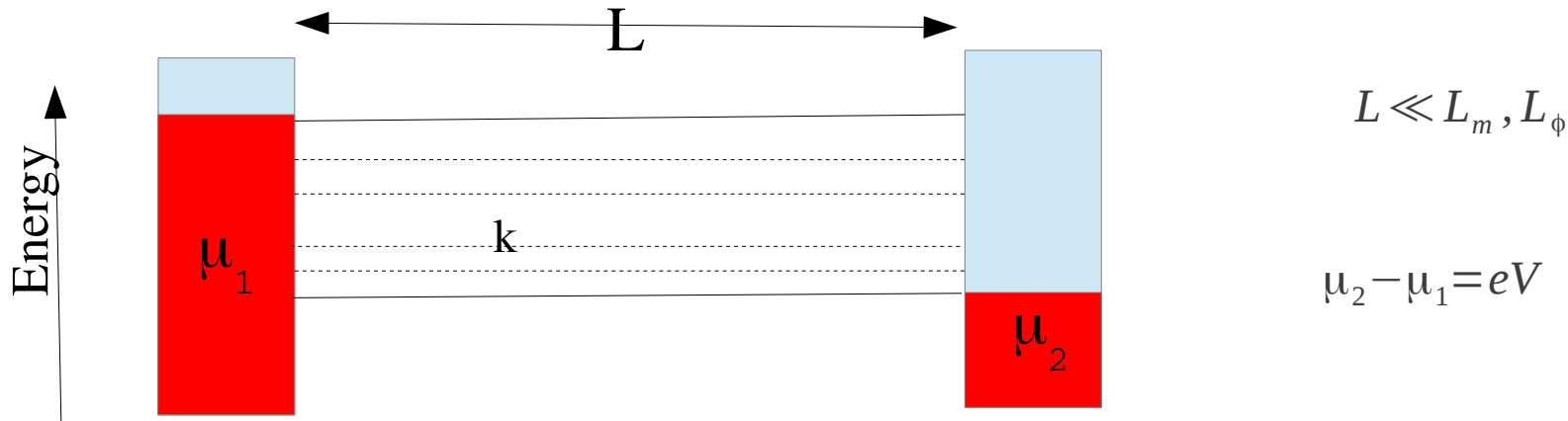
Mais, l'opérateur de vitesse est défini par

$$\mathbf{v}=\frac{d\mathbf{r}}{dt}=(1/i\hbar)[\mathbf{r},H]=\mathbf{p}/m=\hbar\nabla/mi$$

Donc, on voit que

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}}=\hbar\langle \mathbf{v} \rangle$$

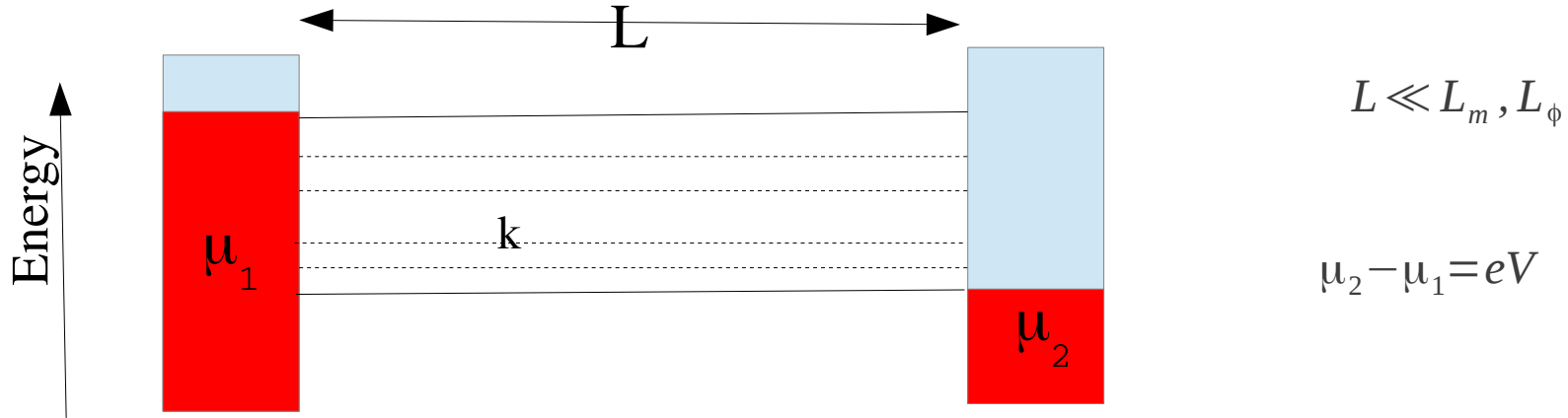
Ballistic transport



Ballistic transport \leftrightarrow pas le diffusion des électrons; le libre mouvement des électrons.

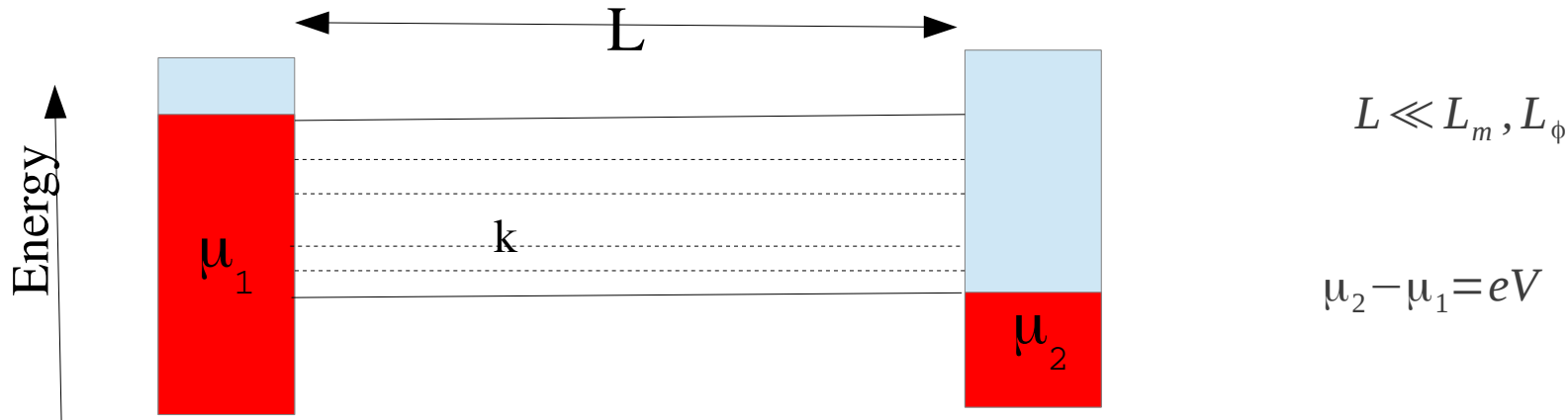
Le courant est transporté par des électrons ayant des énergies entre les deux resevoirs: $\mu_1 > E_q(k) > \mu_2$

Ballistic transport



$$\begin{aligned}
 I &= \sum_{\mu_1 > E_q(k) > \mu_2} \underbrace{\frac{e}{t(q, k)}}_{\text{time of flight}} \left(\underbrace{f(E_q(k) - \mu_1)(1 - f(E_q(k) - \mu_2))}_{\text{prob. qu'il y a un electron dans 1 et un trou dans 2 avec } E_q(k)} - \underbrace{f(E_q(k) - \mu_2)(1 - f(E_q(k) - \mu_1))}_{\text{prob. pour la courant inverse}} \right) \\
 &= \sum_{\mu_1 > E_q(k) > \mu_2} \frac{e}{L/v(q, k)} (f(E_q(k) - \mu_1) - f(E_q(k) - \mu_2)) \\
 &= \frac{e}{L} \sum_{\mu_1 > E_q(k) > \mu_2} v(q, k) (f(E_q(k) - \mu_1) - f(E_q(k) - \mu_2))
 \end{aligned}$$

Ballistic transport



$$I = \frac{e}{L} \sum_{\mu_1 > E_q(k) > \mu_2} v(q, k) (f(E_q(k) - \mu_1) - f(E_q(k) - \mu_2))$$

$$= \frac{e}{L} \sum_{\mu_1 > E_q(k) > \mu_2} \hbar^{-1} \frac{\partial E_q(k)}{\partial k} (f(E_q(k) - \mu_1) - f(E_q(k) - \mu_2))$$

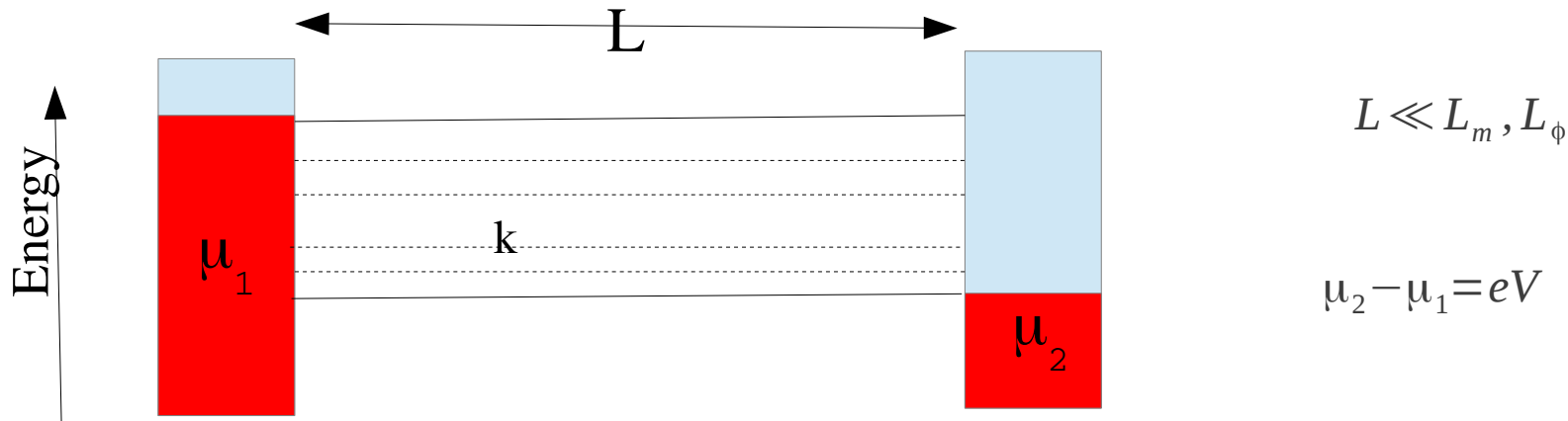
Repeliez-vous que $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$ donc

$$I = \frac{e}{L} \times \underbrace{2}_{\text{dégénérescence spin}} \times \frac{L}{2\pi} \times \sum_q \int_{k>0} \hbar^{-1} \frac{\partial E_q(k)}{\partial k} (f(E_q(k) - \mu_1) - f(E_q(k) - \mu_2)) dk$$

$$= \frac{2e}{h} \int (f(E - \mu_1) - f(E - \mu_2)) M(E) dE$$

↑
Nombre des états (somme sur q, k) avec l'énergie E

Ballistic transport



$$\begin{aligned}
 I &= \frac{2e}{h} \int (f(E - \mu_1) - f(E - \mu_2)) M(E) dE \\
 &\sim \frac{2e}{h} M(\mu_1 - \mu_2) \\
 &\sim \frac{2e^2}{h} M V_C
 \end{aligned}$$

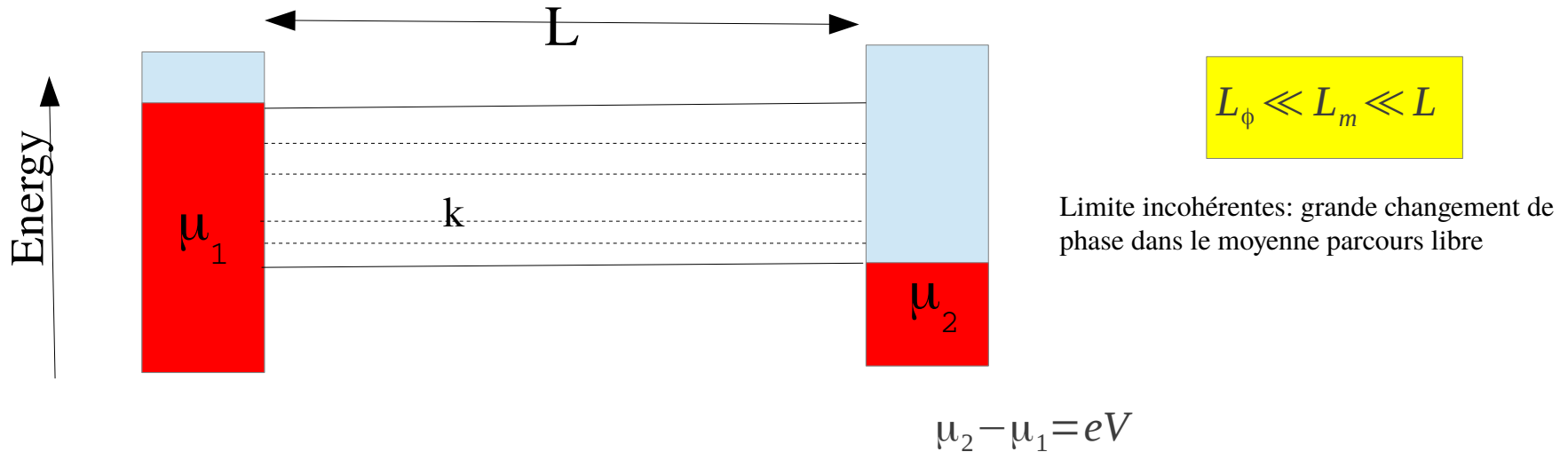
$$R_C = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{M} \equiv R_0 \frac{1}{M} = \frac{12.9}{M} \text{ k}\Omega$$

$$G_C = G_0 M = M \times 77.5 \times 10^{-6} \Omega^{-1}$$

“Contact resistance”:
resistance sans diffuseur

“Contact conductance”

Classique transport

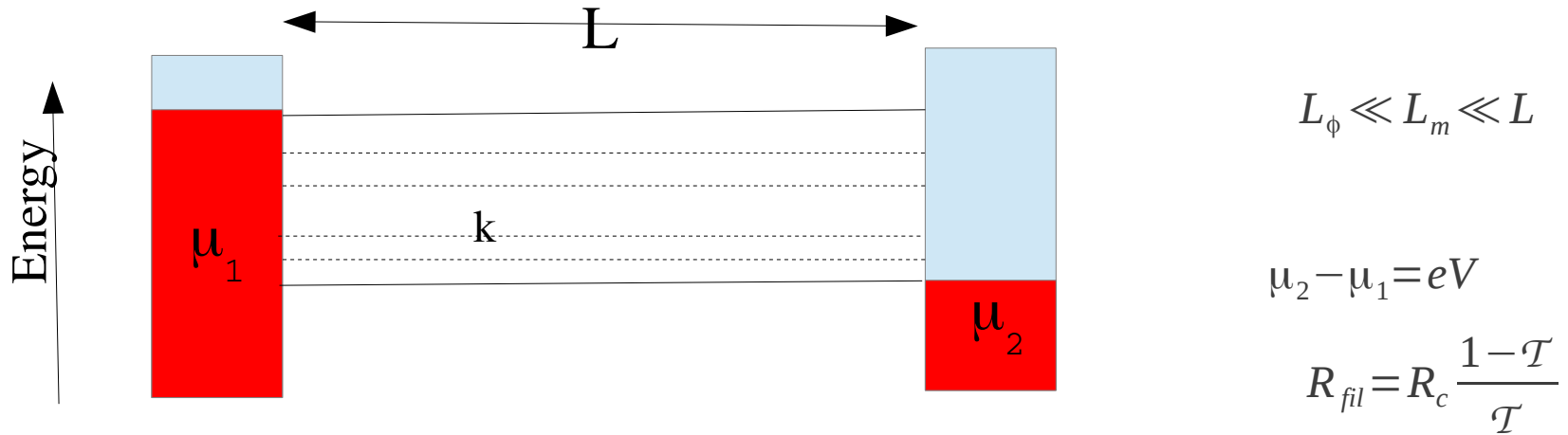


Avec un seul diffuseur ($L \sim L_m$)

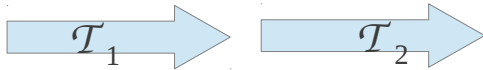
$$G = \frac{2e^2}{h} M \mathcal{T} \equiv \frac{2e^2}{h} \sum_{ij}^M |t_{ij}|^2 \quad \text{"Landauer formula"} \quad \mathcal{T} = \text{transmission probability}$$

$$R = R_0 \frac{1}{M \mathcal{T}} \quad R_{fil} = R - R_c = R_0 \frac{1 - \mathcal{T}}{M \mathcal{T}} = R_0 \frac{\mathcal{R}}{M \mathcal{T}} \quad \mathcal{R} = 1 - \mathcal{T} = \text{reflection probability}$$

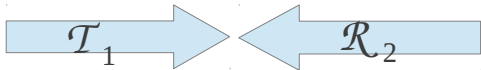
Classique transport



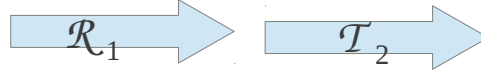
Avec deux diffuseur ($L \gg L_m$)



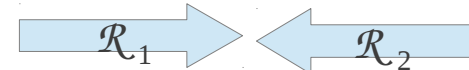
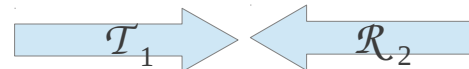
+



+



$$T_{12} = T_1 T_2 (1 + R_1 R_2 + (R_1 R_2)^2 + \dots)$$

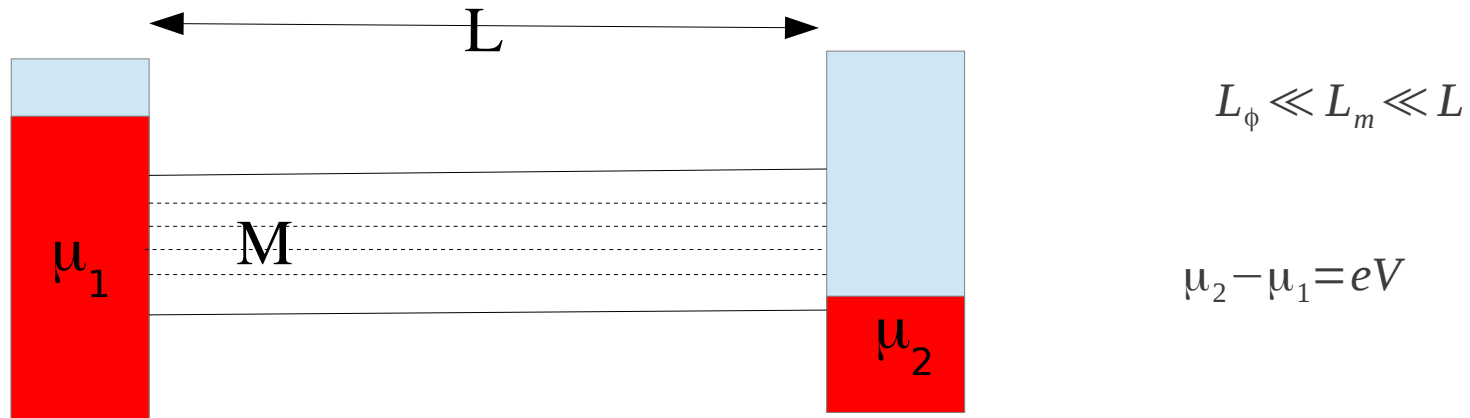


$$T_{12} = \frac{T_1 T_2}{1 - R_1 R_2}$$

$$\frac{1 - T_{12}}{T_{12}} = \frac{1 - T_1}{T_1} + \frac{1 - T_2}{T_2}$$

Limite incohérentes: pas d'interférence donc, les probabilités somme.

Classique transport



Avec deux diffuseur ($L \gg L_m$)

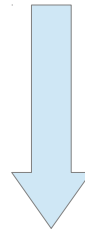
$$\frac{1 - \mathcal{T}_{12}}{\mathcal{T}_{12}} = \frac{1 - \mathcal{T}_1}{\mathcal{T}_1} + \frac{1 - \mathcal{T}_2}{\mathcal{T}_2}$$

$$R_{fil} = R_0 \frac{1 - \mathcal{T}}{M \mathcal{T}}$$



(M constante)

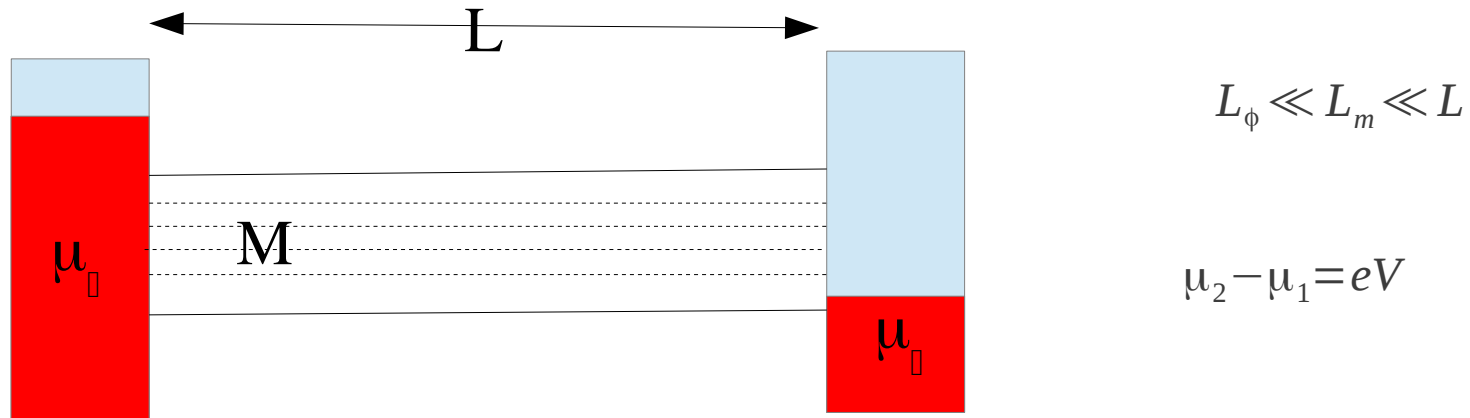
$$R_{2 \text{ scatterers}} = R_{\text{scatterer}_1} + R_{\text{scatterer}_2}$$



(N diffuseur)

$$R_N = R_0 \frac{1}{M} \times \sum_{j=1}^N \frac{1 - \mathcal{T}_j}{\mathcal{T}_j} = R_0 \frac{1}{M} \frac{L}{L_m} \frac{1 - \mathcal{T}}{\mathcal{T}}, \quad \mathcal{T} = \text{transmission probabilité per } L_m$$

Classique transport

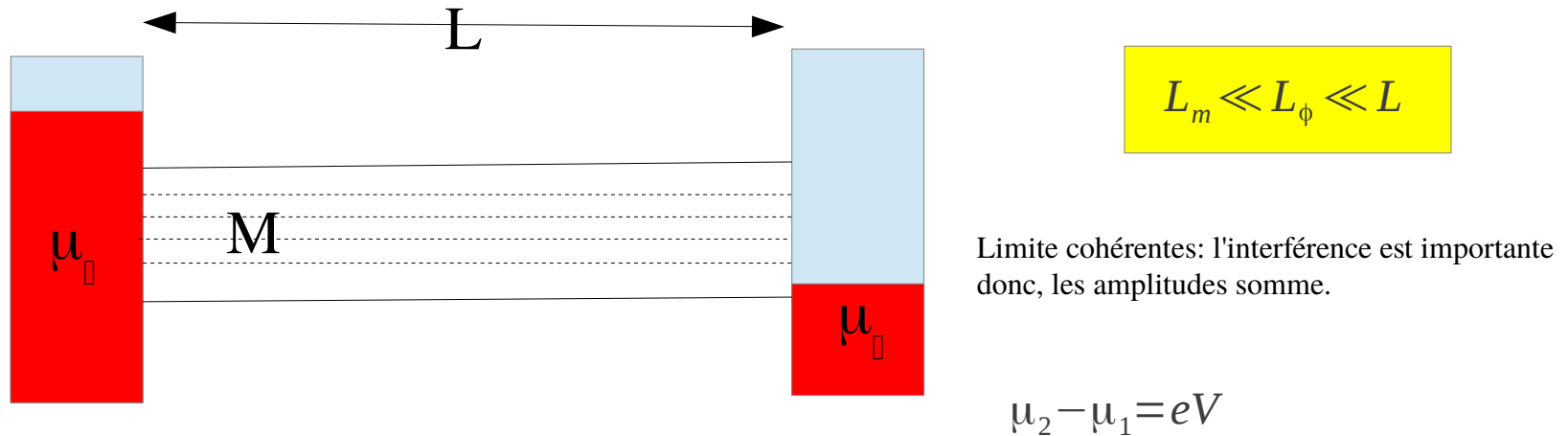


$$R_{fil} = \frac{R_0}{M L_m} \frac{1 - T}{T} L, \quad T = \text{transmission probability per } L_m$$

Résultat classique: constante résistance pour unité de longueur

“Ohm’s law”

Localization



$$t_{12} = \frac{t_1 t_2}{1 - r_1 r_2 e^{i\theta}}$$

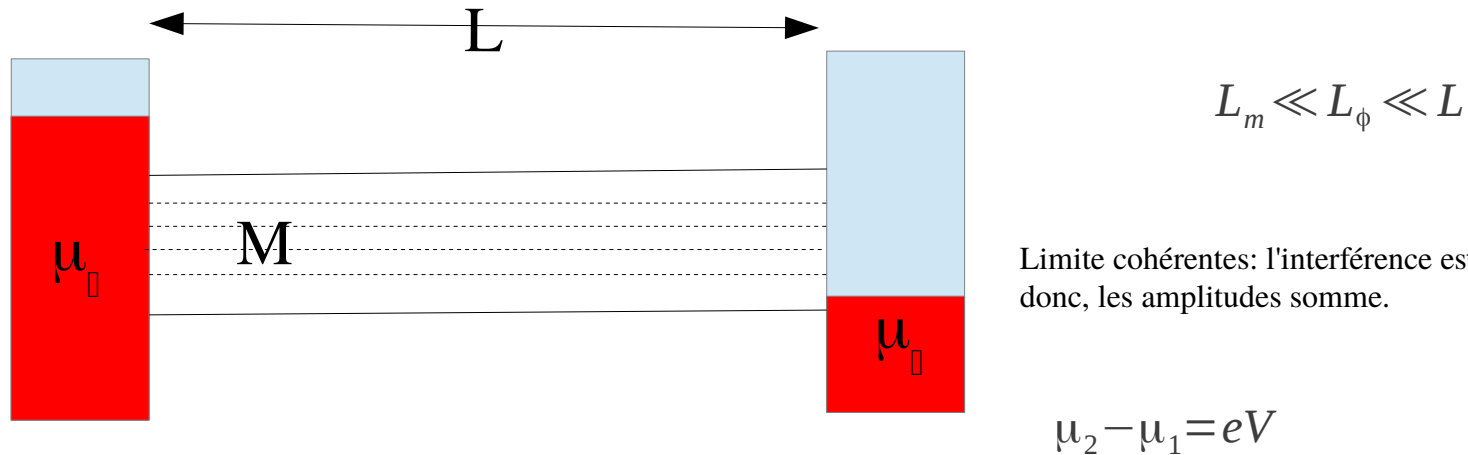
ou θ est le décalage de phase

$$\mathcal{T}_{12} = |t_{12}|^2 = \frac{\mathcal{T}_1 \mathcal{T}_2}{1 - 2\sqrt{\mathcal{R}_1 \mathcal{R}_2} \cos \theta + \mathcal{R}_1 \mathcal{R}_2}$$

$$R_{12} = \frac{R_0}{M} \left\langle \frac{1 - \mathcal{T}_{12}}{\mathcal{T}_{12}} \right\rangle_\theta = \frac{R_0}{M} \frac{1 + \mathcal{R}_1 \mathcal{R}_2 - \mathcal{T}_1 \mathcal{T}_2}{\mathcal{T}_1 \mathcal{T}_2}$$

$$R_{12} = R_1 + R_2 + 2R_1 R_2 (M / R_0)$$

Localization



$$R_{12} = R_1 + R_2 + 2R_1 R_2 (M/R_0)$$

Soit partie 1 a longueur L est partie 2 longueur $\Delta L \sim L_m \ll L_\phi$

$$R(L + \Delta L) = R(L) + R(\Delta L) + 2R(L)R(\Delta L)(M/R_0)$$

$$\rightarrow \Delta L \frac{dR(L)}{dL} = R(\Delta L) + 2R(L)R(\Delta L)(M/R_0)$$

$$\rightarrow \Delta L \frac{dR}{dL} = (R_0/M) + 2R$$

$$\rightarrow R(L) = (R_0/2M)(e^{2L/\Delta L} - 1)$$



$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{R(L)}{L} \rightarrow \infty$$

“Localization”

Résumé: Types de Transport

$L \ll L_m, L_\phi$ Ballistique

$L_\phi \ll L_m \ll L$ Classique

$L_m \ll L_\phi \ll L$ Localization

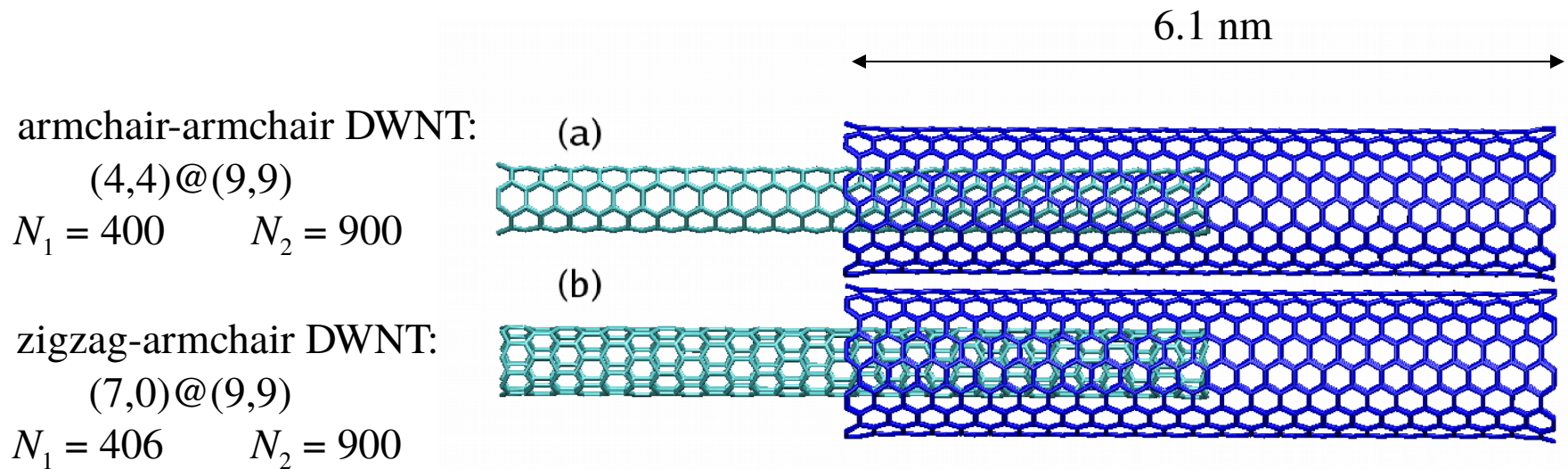
L_m diminue par rapport de la concentration d'impurities.

L_ϕ diminue par rapport de la concentration de phonons
(e g la température).

DOUBLES NANOTUBES DE CARBONE

Feuillets de graphène enroulés sur eux-mêmes

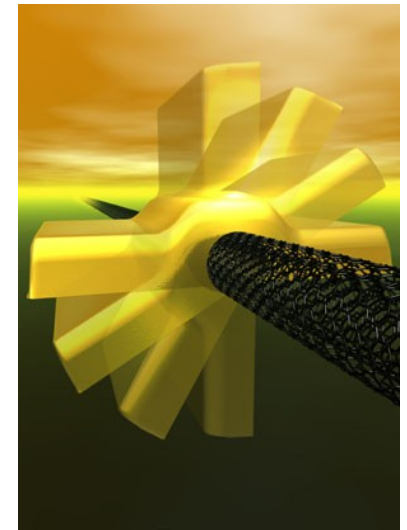
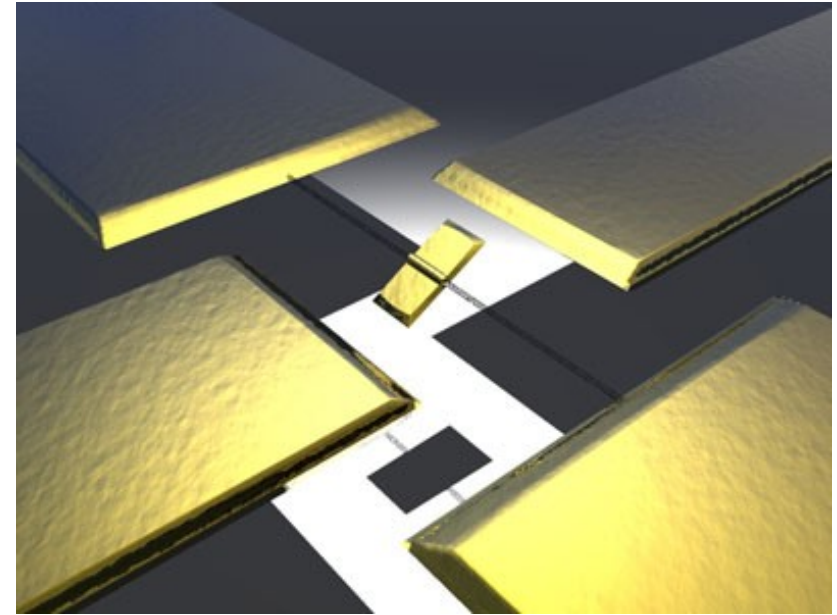
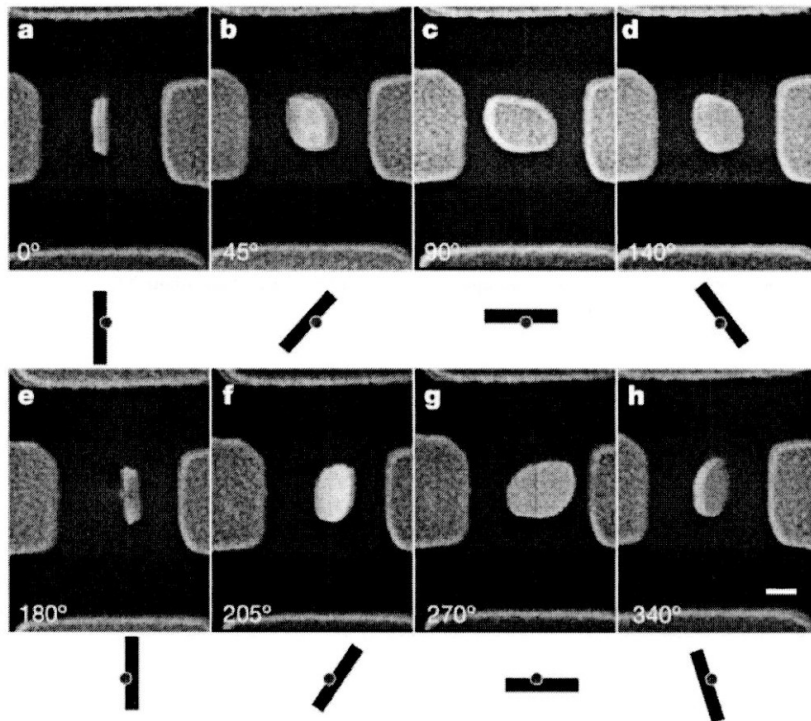
Deux exemples de nanotubes à double paroi (DWNT):



Moteur à axe en nanotubes de carbone

A. M. Fennimore, T. D. Yuzvinsky, Wei-Qiang Han, M. S. Fuhrer, J. Cumings & A. Zettl, Nature **424** (2003) 410.

Fréquence de rotation ~ Hertz



Zettl, Berkeley, USA