



Original Article

Analysis of Effective Coupling and the Impact of Electrode Geometry on Electrode-Fullerene (C_{60} and B_{80}) Contacts: A State-Space Approach

Majid Malek and Ehsan Rahimi* 

Faculty of Electrical Engineering, Shahrood University of Technology, Shahrood, Semnan, Iran

Received: 2025-04-02

Revised: 2025-05-30

Accepted: 2025-07-24

Abstract: In this study, using the state-space approach, the effect of electrode geometry and material on the coupling of C_{60} and B_{80} fullerenes to gold and silver electrodes has been investigated. This method has a low computational cost and enables precise observation of the electrode structure's impact on coupling efficiency. The results show that B_{80} exhibits more effective coupling compared to C_{60} , with its coupling to gold being approximately four times stronger. Additionally, both fullerenes exhibit weaker coupling with silver than with gold. Examination of the electrode structures reveals that bulk electrodes create the strongest coupling, with coupling strength up to four times higher than that of surface and linear types. Increasing the number of electrode atoms in the direction parallel to the fullerene enhances coupling, whereas in the perpendicular direction, the effect is less significant. These findings contribute to the control of coupling efficiency based on electrode material, atomic count, and geometry, and can be beneficial in the optimal design of rectifiers, nanosensors, fullerene-based solar cells, and other nanoscale electronic devices.

Keywords: Effective coupling, Site-to-State Transformation, Electrode Geometry, C_{60} and B_{80} Fullerenes

*Corresponding Author. Email: erahimi@shahroodut.ac.ir

How to Cite This Article:

Malek M, Rahimi E, Analysis of Effective Coupling and the Impact of Electrode Geometry on Electrode-Fullerene (C_{60} and B_{80}) Contacts: A State-Space Approach. Nanomeghyas. 2025; 12(2): 135-147. DOI: [10.22034/ns.2025.732584](https://doi.org/10.22034/ns.2025.732584)





تحلیل تزویج موثر و تاثیر هندسه الکتروود در اتصال مولکولی الکتروود-فولرن (C_{60} و B_{80}): رویکرد فضای حالت

مجید ملک، احسان رحیمی*

دانشکده مهندسی برق، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، سمنان، ایران

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۰۵/۰۲

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۴/۰۳/۱۹

تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۱/۱۳

چکیده: در این پژوهش، با استفاده از رویکرد فضای حالت، اثر هندسه و جنس الکتروود بر تزویج فولرن های C_{60} و B_{80} به الکتروودهای طلا و نقره بررسی شده است. این روش دارای هزینه محاسباتی پایین است و امکان مشاهده تأثیر دقیق ساختار الکتروود بر میزان تزویج را فراهم می‌کند. نتایج نشان می‌دهد که B_{80} در مقایسه با C_{60} تزویج مؤثرتری دارد، به طوری که تزویج آن به طلا حدود چهار برابر بیشتر است. همچنین، هر دو فولرن تزویج کمتری با نقره نسبت به طلا نشان می‌دهند. بررسی ساختار الکتروودها نشان می‌دهد که الکتروودهای حجمی قوی‌ترین تزویج را ایجاد کرده و میزان تزویج در آنها تا چهار برابر بیشتر از انواع سطحی و خطی است. افزایش تعداد اتم‌های الکتروود در راستای موازی با فولرن تزویج را افزایش داده، اما در راستای عمود بر فولرن تأثیر کمتری دارد. این نتایج در کنترل میزان تزویج بر اساس جنس، تعداد اتم‌ها و هندسه الکتروود مؤثر بوده و می‌تواند در طراحی بهینه یکسوسازها، نانوحسگرها و سلول‌های خورشیدی مبتنی بر فولرن‌ها و سایر افزاره‌های الکترونیکی در مقیاس نانو مفید باشد.

واژگان کلیدی: تزویج موثر، رویکرد فضای حالت، هندسه الکتروود، فولرن C_{60} و B_{80}

* نویسنده مسئول. ایمیل: erahimi@shahroodut.ac.ir

نحوه استناد به این مقاله:

ملک، مجید، رحیمی، احسان، تحلیل تزویج موثر و تاثیر هندسه الکتروود در اتصال مولکولی الکتروود-فولرن (C_{60} و B_{80}): رویکرد فضای حالت. *نانو مقیاس*، ۲۰۲۵، ۱۲(۲)، ۱۳۵-۱۴۷. DOI: [10.22034/ns.2025.732584](https://doi.org/10.22034/ns.2025.732584)



۱- مقدمه

افزاره‌ها است، بلکه بستری مناسب برای مطالعه خواص بنیادی مواد در سطح مولکولی محسوب می‌شود.

در افزاره‌های مولکولی، معمولاً یک مولکول یا مجموعه‌ای کوچک از مولکول‌ها به‌عنوان پل ارتباطی بین دو الکتروود فلزی عمل می‌کنند و عملکرد افزاره به‌شدت به میزان تزویج الکتروود-مولکول وابسته است. این تزویج، که بیانگر همپوشانی اربیتال‌های مولکول با اربیتال‌های الکتروود است، ارتباط مستقیمی با هندسه الکتروودها و جزئیات برهم‌کنش‌ها در سطح تماس دارد و علاوه بر آن که عملکرد افزاره مولکولی را متاثر می‌کند، نقش تعیین‌کننده‌ای در ویژگی‌های ترابرد الکترونی آن دارد [۵]. برای مدل‌سازی تزویج الکتروود-مولکول، روش‌های مختلفی مانند تنگ‌بست (TB) [۶ و ۷]، نظریه تابعی چگالی (DFT) [۸] و تابع گرین غیر تعادلی (NEGF) [۹] مورد استفاده قرار می‌گیرند. این روش‌ها امکان توصیف ساختار الکترونی و برهم‌کنش‌های مولکولی را فراهم می‌کنند، اما معمولاً جزئیات توزیع تزویج بین حالات مولکولی و الکتروودها را به‌طور مستقیم در فضای حقیقی انعکاس نمی‌دهند. علاوه بر این، پیچیدگی محاسباتی و هزینه‌ی بالای پردازشی، استفاده از این روش‌ها را در برخی موارد محدود می‌کند.

رویکرد تبدیل "سایت به حالت" [۱۰] از دیگر روش‌های محاسبه تزویج الکتروود به مولکول است که علاوه بر دربرگرفتن جزئیات هندسه الکتروود در فضای حقیقی، دارای هزینه محاسباتی کمتری است. در این پژوهش اثر هندسه سه نوع الکتروود خطی، سطحی و حجمی بر قدرت تزویج الکتروودهای طلا و نقره با فولرن‌های C_{60} و B_{80} را با روش مذکور مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

فولرن‌ها گروهی از نانوساختارها هستند که اتم‌های آن‌ها در قالب چندوجهی‌های بسته آرایش یافته‌اند و به دلیل ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی منحصر به فرد، در حوزه‌های مختلفی از جمله الکترونیک مولکولی، نانوحسگرها و فناوری‌های نانومقیاس کاربرد گسترده‌ای یافته‌اند. این ساختارها

پیشرفت فناوری افزاره‌های نیم‌رسانا طی دهه‌های اخیر منجر به کاهش قابل توجه ابعاد ترانزیستورها شده است. در حالی که حدود چهل سال پیش، طول گیت ترانزیستورها در مقیاس میکرومتری بود، امروزه این مقدار به کمتر از ۱۰ نانومتر کاهش یافته است. با این حال، ادامه این روند با محدودیت‌های اساسی ناشی از فناوری‌های ساخت و چالش‌های بنیادی در سازوکارهای ترابرد الکترونی روبه‌رو است [۱]. در این راستا، الکترونیک مولکولی به‌عنوان رویکردی نوین مطرح شده است که از تک‌مولکول‌ها به‌عنوان عناصر الکترونیکی بهره می‌برد. مولکول‌های شیمیایی با ابعاد نانومتری، قابلیت عملکرد به‌عنوان سیم‌های رسانا، یکسوسازها، حافظه و سوئیچ‌ها را دارند و می‌توانند جایگزین مناسبی برای افزاره‌های الکترونیکی سنتی باشند [۲]. شواهد تجربی در زمینه ترابرد الکترونی از طریق مولکول‌های منفرد، افق‌های جدیدی را فراتر از فناوری CMOS ارائه کرده‌اند. هدف نهایی این حوزه، طراحی و پیاده‌سازی مدارهای الکترونیکی در مقیاس مولکولی است، زیرا تک‌مولکول‌ها کوچک‌ترین واحدهای پایدار شناخته‌شده محسوب می‌شوند [۳].

الکترونیک مولکولی مزایای متعددی نسبت به فناوری‌های مبتنی بر سیلیکون دارد. اول، اندازه بسیار کوچک مولکول‌ها (در حد ۱ نانومتر) می‌تواند می‌تواند اثرات کوانتومی را تقویت کرده و منجر به بهبود ویژگی‌های الکترونیکی و افزایش سرعت عملکرد افزاره‌ها شود. دوم، امکان مهندسی خواص الکترونیکی از طریق طراحی شیمیایی، زمینه‌ای را برای ایجاد اثرات جدید کوانتومی مانند پلاسمونیک کوانتومی، تداخل کوانتومی و مقاومت منفی تفاضلی فراهم می‌آورد. سوم، قابلیت تولید انبوه مولکول‌ها، هزینه ساخت افزاره‌های مولکولی را کاهش داده و امکان تجاری‌سازی این فناوری را افزایش می‌دهد [۴]. به دلیل این ویژگی‌ها، الکترونیک مولکولی نه تنها راهکاری برای ادامه روند کوچک‌سازی

بر روی مولفه‌های تزویج و تزویج موثر الکتروود به فولرن‌های C_{60} و B_{80} انجام شده است. نتایج حاصل می‌تواند درک بهتری از برهم‌کنش‌های مولکولی در سطح تماس با الکتروودها به دست دهد و به طراحی افزاره‌های الکترونیکی کارآمدتر در مقیاس نانو کمک کند.

۲- مروری بر روش‌های محاسبه تزویج

در این بخش، به مرور و مقایسه روش‌های مختلف محاسبه تزویج بین مولکول‌ها و الکتروودها، مانند مدل تنگ‌بست (TB) [۱۵]، روش تابع گرین غیر تعادلی (NEGF) [۱۶]، روش تابع گرین سطحی [۱۷]، ترکیب نظریه تابعی چگالی با تابع گرین غیرتعادلی (DFT+NEGF) [۱۸]، استفاده از توابع وانیه [۱۹] و همچنین روش‌های پیشرفته‌تری مانند تقریب GW [۲۰ و ۲۱] و روش خوشه‌های کوپل شده (CC) [۲۲] پرداخته می‌شود. سپس، رویکرد فضای حالت معرفی می‌شود. محاسبه‌ی تزویج بین مولکول و الکتروود از روش‌های مختلفی امکان‌پذیر است که هر یک دارای مزایا و محدودیت‌های خاص خود هستند.

مدل تنگ‌بست (TB) یکی از ساده‌ترین روش‌ها برای محاسبه ساختار الکترونی مواد و محاسبه ماتریس‌های تزویج است. این مدل یک رویکرد نیمه‌تجربی است که بر اساس پارامترهای انتگرال جفت‌شدگی و انرژی محلی، تزویج بین مولکول و الکتروود را تخمین می‌زند. این روش به‌ویژه برای سیستم‌هایی که دارای تعداد درجات آزادی بالا هستند، مانند نانوساختارهای بزرگ، مناسب است. از آنجاکه مدل تنگ‌بست نیاز به محاسبات پیچیده‌ی خودسازگار ندارد، هزینه‌ی محاسباتی آن بسیار پایین است. با این حال، دقت آن در مقایسه با روش‌های مبتنی بر DFT و توابع گرین محدودتر بوده و برای مواد ساده و نانوساختارهایی که پارامترهای انتگرال‌های جفت‌شدگی و انرژی‌های محلی آن‌ها به‌درستی تعیین شده‌اند، کارایی بیشتری دارد. همچنین این رویکرد، تزویج را در حالت تعادلی به

بسته به شرایط می‌توانند به عنوان مولکول‌های نیم‌رسانا یا رسانای الکتریکی عمل کنند [۱۲ و ۱۱]. از میان انواع مختلف فولرن‌ها، C_{60} و B_{80} به دلیل هندسه‌ی پایدار، همپوشانی اربیتال قوی و ویژگی‌های الکترونیکی و سطوح انرژی قابل تنظیم، بیشترین توجه را در پژوهش‌های علمی و کاربردهای عملی به خود جلب کرده‌اند.

فولرن C_{60} که از ۶۰ اتم کربن تشکیل شده است، ساختاری کروی و کاملاً متقارن دارد و بدین جهت به آن باکی‌بال نیز می‌گویند. این تقارن موجب پایداری شیمیایی بالا، تحرک الکترونی بالا و توانایی چشمگیر در پذیرش و انتقال بار الکتریکی می‌شود. همچنین ساختار کروی آن‌ها باعث می‌شود که هنگام پیوند با الکتروودهای فلزی، در شرایط خاص رفتار یکسوسازی جریان الکتریکی را از خود نشان داده و به‌عنوان یک جزء کلیدی در دیودهای مولکولی به کار روند [۱۲ و ۱۱]. وجود اربیتال‌های π غیرموضعی در باکی‌بال‌ها، امکان ایجاد پیوندهای قوی با پلیمرهای نیم‌رسانا و برهم‌کنش مؤثر با محیط اطراف را فراهم می‌کند، به طوری که از آن‌ها می‌توان به عنوان ماده اصلی پذیرنده الکترون در سلول‌های خورشیدی آلی و ساخت حساسه‌های گاز و حساسه‌های مولکول‌های زیستی استفاده کرد [۱۳]. در مقابل، B_{80} به عنوان یک فولرن مبتنی بر بور، از نظر ساختاری شباهت زیادی به C_{60} دارد اما به دلیل پیوندهای قوی‌تر و پایداری شیمیایی بالاتر، ویژگی‌های الکترونیکی منحصر به فردی ارائه می‌دهد. این ساختار، نسبت به C_{60} رسانایی الکتریکی بالاتری داشته و واکنش‌پذیری بیشتری از خود نشان می‌دهد که آن را برای استفاده در افزاره‌های الکترونیک مولکولی ایده‌آل می‌سازد. ترکیب این ویژگی‌ها باعث شده است که B_{80} گزینه‌ای مناسب‌تر برای طراحی و بهینه‌سازی افزاره‌های الکترونیکی پیشرفته باشد [۱۴].

این پژوهش با هدف درک بهتر اثر هندسه الکتروودها (خطی، سطحی، حجمی)، جنس الکتروودها، تعداد اتم‌های الکتروود، و ساختار الکترونی مولکول

در این روش، تزویج الکترونی به وسیله‌ی عرض طیفی همانند رابطه (۱) محاسبه می‌شود اما در اینجا، خودانرژی Σ از محاسبات DFT استخراج می‌شود که شامل اطلاعات دقیق‌تری درباره‌ی برهم‌کنش‌های الکترونی است. این ویژگی باعث می‌شود که روش DFT+NEGF نسبت به روش تابع گرین معمولی دقت بالاتری داشته باشد، زیرا اثرات تبادل-همبستگی الکترون‌ها بهتر لحاظ می‌شوند. باین‌حال، این روش به دلیل حل خودسازگار معادلات DFT هزینه‌ی محاسباتی بالاتری نسبت به روش‌های ساده‌تر مانند تابع گرین معمولی دارد. علاوه بر این، دقت آن به انتخاب تقریب‌های مناسب برای تابع تبادل-همبستگی وابسته است.

در مجموع، روش DFT+NEGF دارای دقت بسیار بالا، اما هزینه‌ی محاسباتی زیاد بوده و بیشتر برای مطالعه‌ی سیستم‌های پیچیده و واقعی، از جمله بررسی ترابرد الکترونی در نانوساختارها و اتصالات مولکولی، مورد استفاده قرار می‌گیرد.

در برخی موارد، برای محاسبه‌ی تزویج بین مولکول و الکتروند، از روش‌های پیشرفته‌تری مانند تقریب GW [۲۰ و ۲۱] و روش خوشه‌های کوپل شده (CC) [۲۲] استفاده می‌شود. این روش‌ها دقت بسیار بیشتری ارائه می‌دهند، اما به دلیل هزینه‌ی محاسباتی بسیار بالا، معمولاً تنها در سیستم‌های کوچک و یا برای انجام تصحیحات بر روی روش‌های ساده‌تر مورد استفاده قرار می‌گیرند. در روش GW، خودانرژی با استفاده از تابع دی‌الکتریک سیستم و تقریب مرتبه‌ی اول از برهم‌کنش بین الکترون‌ها و حفره‌ها تعیین می‌شود.

در روش خوشه‌های کوپل شده (CC) [۲۲]، برهم‌کنش‌های الکترونی به صورت غیرخطی و از طریق بسط موج الکترونی برحسب عملگرهای برانگیختگی مدل‌سازی می‌شوند. اگرچه این روش‌ها دقت بالایی دارند، اما هزینه‌ی محاسباتی آن‌ها بسیار زیاد بوده و کمتر برای محاسبه‌ی تزویج مولکول-الکتروند به کار می‌روند.

روش فضای حالت [۱۰] یکی از رویکردهای موثر

فرم ماتریسی به دست می‌دهد و امکان محاسبه تزویج موثر و تزویج در شرایط غیرتعدالی را ندارد. یکی دیگر از پرکاربردترین روش‌ها برای محاسبه تزویج، روش تابع گرین غیر تعادلی (NEGF) است. در این روش، اثر الکترونها از طریق خودانرژی Σ در معادله‌ی تابع گرین وارد شده و تزویج به کمک عرض طیفی که از قسمت موهومی خودانرژی استخراج می‌شود، تعیین می‌گردد [۱۶]:

$$\Gamma = i(\Sigma - \Sigma^\dagger) \quad (1)$$

که در آن، خودانرژی Σ ناشی از برهم‌کنش الکتروند با مولکول را نشان می‌دهد. تابع گرین کل سیستم به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۶]:

$$G(E) = (EI - H - \Sigma)^{-1} \quad (2)$$

که در آن، H همیلتونی سیستم و E انرژی الکترون است. تابع گرین اطلاعات جامعی درباره‌ی خواص الکترونیکی سیستم فراهم می‌کند و از آن می‌توان برای محاسبه‌ی چگالی حالت‌های محلی (LDOS) و رسانایی گذار استفاده کرد. یکی از مزایای این روش، دقت بالای آن در محاسبه‌ی برهم‌کنش بین مولکول و الکتروند است. باین‌حال، روش‌های تابع گرین نیازمند محاسبه‌ی دقیق خودانرژی الکترونها است که می‌تواند منجر به افزایش هزینه‌ی محاسباتی شود. در مجموع، روش تابع گرین دارای هزینه‌ی محاسباتی متوسط، دقت بالا و کاربرد گسترده در بررسی رسانش الکترونیکی و محاسبه‌ی تزویج بین مولکول و الکتروند است.

ترکیب نظریه‌ی تابعی چگالی با تابع گرین غیرتعدالی (DFT+NEGF) [۱۸] یکی از قدرتمندترین روش‌ها برای شبیه‌سازی سیستم‌های نانومقیاس و بررسی تزویج مولکول-الکتروند است. در این روش، ابتدا ساختار الکترونیکی سیستم متشکل از مولکول و الکترونها با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی و حل معادلات کوهن-شم تعیین شده و سپس با تابع گرین غیرتعدالی ترکیب می‌شود و به صورت خودسازگار حل می‌شود.

علاوه بر این، این رویکرد می‌تواند دیدگاه بهتری در خصوص تاثیر هندسه‌ی الکترودها و نوع فلز بر فرآیند تزویج ارائه دهد.

۳- مدل‌ها و روش‌ها

همیلتونی یک افزاره با ساختار الکترو-مولکول-الکترو در مدل تنگ‌بست (TB) در فضای حقیقی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_M + \hat{H}_R + \hat{V}_{LM} + \hat{V}_{MR} \quad (3)$$

که در آن، \hat{H}_L و \hat{H}_R به ترتیب ماتریس‌های همیلتونی الکترودهای سمت چپ و راست، و ماتریس همیلتونی مربوط به مولکول هستند. همچنین، \hat{V}_{LM} و \hat{V}_{MR} به ترتیب ماتریس‌های تزویج بین مولکول و الکترودهای چپ و راست را نشان می‌دهند. در این مدل، تزویج مستقیم بین دو الکترو صفر فرض می‌شود. تزویج بین اربیتال مولکولی i از الکترو و اربیتال مولکولی j از مولکول توسط رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود [۱۰]:

$$(\hat{V}_{L,M})_{i,j} = (C_{i,l}^L)^\dagger \beta_{l,m} C_{m,j}^M \quad (4)$$

در این رابطه، $C_{i,l}^L$ وزن اربیتال مولکولی i در محل اتم l از الکترو و $C_{m,j}^M$ وزن اربیتال مولکولی j در محل اتم m از مولکول هستند. $\beta_{l,m}$ انتگرال جفت‌شدگی است که در این پژوهش با توجه به نوع اتم‌های الکترو و مولکول از رابطه‌ی زیر تقریب زده می‌شود [۲۳]:

$$\beta_{l,m} = \left(\frac{1/397}{d_{l,m}} \right)^\xi \beta \quad (5)$$

در این رابطه، β_0 مقدار انتگرال جفت‌شدگی پایه در حالتی است که دو اتم برهم‌نهی کامل دارند. همچنین، $d_{l,m}$ بیانگر فاصله‌ی بین دو اتم l و m به ترتیب در الکترو و مولکول است.

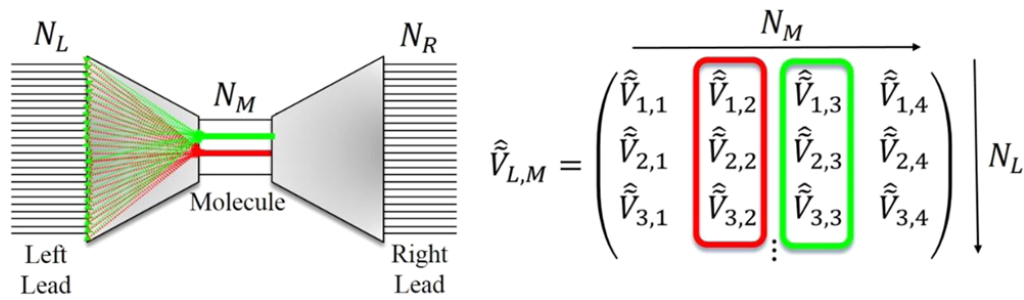
برای محاسبه تزویج در سیستم‌های مولکولی-الکترو است. در این روش، ابتدا همیلتونی سیستم در فضای حقیقی تعریف و محاسبه می‌شود و سپس با استفاده از یک تبدیل یکانی به فضای حالت منتقل می‌گردد. این تبدیل به طور موثری پیچیدگی محاسباتی را کاهش داده و امکان بررسی دقیق‌تر برهم‌کنش‌های الکترونی را فراهم می‌کند. از مزایای این روش می‌توان به توانایی استخراج مستقیم ضرایب تزویج الکترونی، به‌ویژه در مقیاس نانو اشاره کرد، که این امر امکان تحلیل دقیقی از نقش هندسه الکترودها و نوع فلز در فرآیند تزویج را فراهم می‌آورد.

در این چارچوب، محاسبه تزویج میان حالات مختلف مولکول و الکترودها به سادگی قابل انجام است، که باعث افزایش دقت در تحلیل‌های الکترونی می‌شود. همچنین، روش فضای حالت در مقایسه با روش‌های مبتنی بر تابع گرین (NEGF) هزینه محاسباتی کمتری دارد و از این رو، در مواردی که نیاز به محاسبات سریع و کارآمدتر باشد، به‌ویژه در سیستم‌های بزرگ یا پیچیده، مفید است.

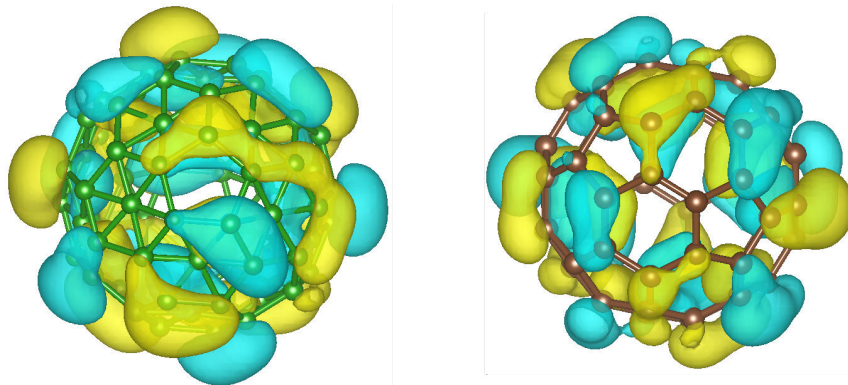
این روش به‌ویژه برای سیستم‌های مولکولی با تعداد زیادی درجه آزادی یا ساختارهای پیچیده که نیاز به محاسبات دقیق دارند، کاربردی است. به‌طور کلی دقت این روش بالا است و در کنار کاهش هزینه‌های محاسباتی، امکان مدل‌سازی دقیق و بهینه‌ای از فرایندهای تزویج را فراهم می‌آورد.

روش فضای حالت با وجود دقت مناسب، نسبت به روش‌های NEGF و DFT+NEGF دارای هزینه محاسباتی بسیار پایین‌تری است. به‌علاوه، این روش اجازه می‌دهد تزویج بین حالات مشخص مولکول و الکترو به صورت موضعی و قابل تفکیک تحلیل شود، که در بررسی اثرات هندسی الکترودها مزیت قابل توجهی دارد.

در این پژوهش، از روش تبدیل فضای حقیقی به فضای حالت برای محاسبه‌ی تزویج بین فولرن C_{60} و B_{80} با الکترودهای طلا و نقره استفاده می‌شود. این روش امکان توصیف دقیق برهم‌کنش‌های الکترونی و استخراج مستقیم ضرایب تزویج را فراهم می‌کند.



شکل ۱. عناصر تزویج بین حالات مولکول و الکتروود در فضای حالت برای افزاره‌ی الکتروود-مولکول-الکتروود [۱۰]



شکل ۲. توزیع اربیتال HOMO در فولرن (الف) C₆₀ و (ب) B₁₈

بدین ترتیب عناصر ماتریس تزویج در ستون‌های \hat{V}_{LM} یا سطرهای \hat{V}_{MR} قرار می‌گیرند.

تبدیل سایت به حالت نه تنها یک ابزار ریاضی برای قطری‌سازی همیلتونی در فضای حالت است، بلکه امکان تفکیک دقیق مشارکت هر حالت مولکولی و هر حالت الکتروودی را در فرآیند تزویج فراهم می‌کند. این ویژگی موجب تفسیر فیزیکی روشن‌تری از مکانیزم‌های انتقال بار می‌شود.

شکل ۱ ارتباط بین عناصر ماتریس تزویج در فضای حالت با حالات الکتروود و مولکول در فضای حقیقی را برای یک افزاره‌ی الکتروود-مولکول-الکتروود نشان می‌دهد. در این چارچوب، ماتریس تزویج \hat{V}_{MR} دارای ابعاد $N_L \times N_M$ است که هر ستون آن عناصر تزویج مربوط به حالات مولکول، و هر سطر آن متناظر با عناصر تزویج حالات الکتروود است.

پس از محاسبه‌ی تزویج بین تک‌تک حالات مولکول و الکتروود با استفاده از رابطه‌ی (۸)، می‌توان تزویج مؤثر بین هر حالت مولکول و تمام حالات الکتروود را با استفاده از فرمول طلایی فرمی به صورت

برای محاسبه تزویج الکتروود-مولکول، همیلتونی مدل تنگ‌بست در فضای حقیقی (\hat{H}) از معادله (۱) به نمایش در فضای حالت (\hat{H}), در پایه‌ی حالت‌های ویژه‌ی سیستم، تبدیل می‌شود. برای این منظور، از تبدیل یکانی سایت به حالت به صورت زیر استفاده می‌شود:

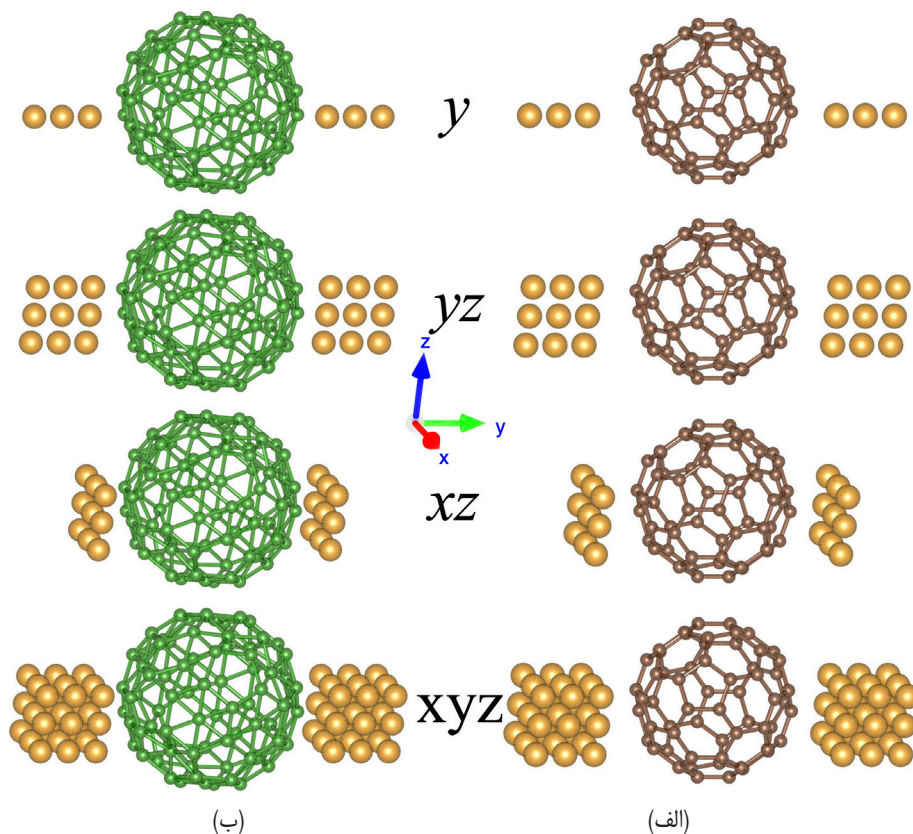
$$\hat{U} = \hat{U}_L + \hat{U}_M + \hat{U}_R \quad (۶)$$

به طوری که \hat{U}_L و \hat{U}_M و \hat{U}_R تبدیل‌های یکانی هستند که همیلتونی‌های هر بخش از افزاره (الکتروود سمت چپ و مولکول و الکتروود سمت راست) را در پایه ویژه حالات خودشان به صورت زیر قطری می‌کنند:

$$\hat{H}_I = \hat{U}_I^\dagger \hat{H}_I \hat{U}_I, I \in \{L, M, R\} \quad (۷)$$

با استفاده از این تبدیل، همیلتونی افزاره در فضای حالت به شکل زیر بیان می‌شود:

$$\hat{H} = \hat{U} \hat{H} \hat{U} = \hat{H}_L + \hat{H}_M + \hat{H}_R + \hat{V}_{LM} + \hat{V}_{MR} \quad (۸)$$



شکل ۳: الکتروادهای خطی (y) سطحی (yz, xz) و حجمی (xyz) طلا در تزویج با با فولرن (الف) C₆₀ و (ب) B₈₀.

زیر تعیین کرد [۲۴]:

$$\gamma^{L/R}(\epsilon_n) = 2\pi \sum_q |V_{n,q}^{L/R}|^2 \delta(\epsilon_n - \epsilon_q) \quad (9)$$

که در آن $V_{n,q}^{L/R}$ عناصر ماتریس تزویج بین حالتی با انرژی ϵ_n از مولکول و حالتی با انرژی ϵ_q از الکتروود است. در نهایت تزویج مؤثر کلی هر الکتروود به مولکول از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

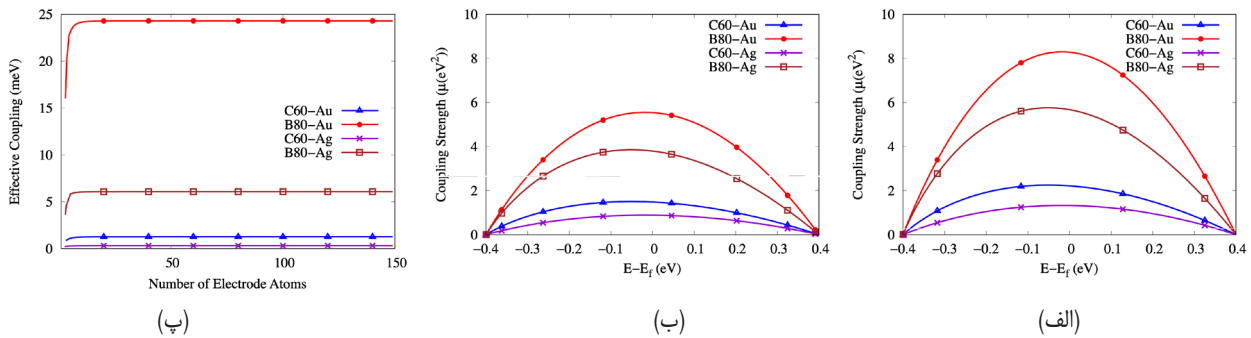
$$\Gamma^{L/R} = \sum_n \gamma^{L/R}(\epsilon_n) \quad (10)$$

تزویج مؤثر، بر اساس قانون طلایی فرمی، از مجموع وزندار مربع عناصر ماتریس تزویج بین حالت‌های مولکول و الکتروود در ناحیه انرژی نزدیک به تراز فرمی به دست می‌آید. این کمیت علاوه بر شدت برهم‌کنش، شامل اطلاعات طیفی و چگالی حالت‌های الکتروود نیز هست و در نهایت با واحد انرژی (الکترون‌ولت) گزارش می‌شود.

۴- نتایج و بحث

در این پژوهش، از فولرن‌های C_{60} و B_{80} به‌عنوان مولکول‌های مدل برای بررسی اثر هندسه و جنس الکتروودها بر تزویج الکترونی استفاده شده است. در ابتدا، محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) در سطح B3LYP و با استفاده از توابع پایه گوسی 6-31G* در نرم‌افزار گوسین انجام شد تا اربیتال‌های مولکولی مؤثر این فولرن‌ها مورد ارزیابی قرار گیرد. شکل ۲، اربیتال‌های HOMO این دو گونه شیمیایی را نشان می‌دهد.

مقایسه این اربیتال‌ها بیانگر آن است که در B_{80} ، اربیتال HOMO به‌طور گسترده‌تری در سطح مولکول توزیع شده است، در حالی که در C_{60} ، این اربیتال نسبتاً متمرکزتر است. توزیع وسیع‌تر اربیتال HOMO در B_{80} منجر به افزایش همپوشانی بیشتر



شکل ۴: عناصر ماتریس تزویج الکترودهای خطی طلا و نقره به تراز HOMO فولرن C_{60} و B_{80} در الف) الکترودهای ۱۰۰ اتم و ب) الکترودهای ۱۵۰ اتم. پ) نمودار تغییرات تزویج موثر الکترودهای طلا و نقره به فولرن C_{60} و B_{80} بر حسب تعداد اتم‌های الکترودها.

شده است. همچنین، مقدار انتگرال جفت‌شدگی پایه برای پیوندهای کربن-طلا، کربن-نقره، بور-طلا و بور-نقره به ترتیب برابر با 0.025eV ، 0.08eV ، 0.05eV و 0.01eV فرض شده است.

۴-۱- الکترودهای خطی

شکل ۴. الف مقدار قدرت تزویج (قدرمطلق مربع عناصر ماتریس تزویج) بین الکترودهای خطی (y) با ۱۰۰ اتم و مولکول را، که توسط معادله (۴) تعریف شده‌اند، به عنوان تابعی از مقدار ویژه‌ی حالت‌های الکترودها نشان می‌دهد. در این محاسبات، اندیس i نشان دهنده‌ی مجموعه‌ای از حالت‌های الکترودها سمت چپ است. این تحلیل برای دو مولکول C_{60} و B_{80} و همچنین دو نوع الکترودها از جنس طلا و نقره انجام شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که قدرت تزویج تراز HOMO به حالات الکترودها در فولرن B_{80} نسبت به C_{60} بیشتر است. علاوه بر این، تزویج به الکترودهای طلا در مقایسه با نقره، قوی‌تر مشاهده می‌شود. همچنین، شدت تزویج در تراز فرمی الکترودها به بیشینه مقدار خود می‌رسد و با دور شدن از آن، به صورت سهمی کاهش می‌یابد.

شکل ۴. ب نتایج محاسبات در شرایطی که تعداد اتم‌های الکترودها به ۱۵۰ اتم افزایش یافته را نشان می‌دهد. مقایسه نمودارهای شکل ۴ الف و ب نشان می‌دهد که با افزایش تعداد اتم‌های الکترودها، قدرت تزویج کاهش می‌یابد. این کاهش ناشی از شرط

با توابع موج الکترونی الکترودها می‌شود و تزویج الکترونی مؤثرتری را فراهم می‌کند. تحلیل سطوح انرژی نشان می‌دهد که ترازهای HOMO و LUMO در C_{60} به ترتیب در -6.5eV و -54.3eV و در B_{80} به ترتیب در -44.5eV و -54.3eV قرار دارند. این اختلاف چشمگیر در سطوح انرژی بیانگر پایداری الکترونیکی بالاتر در B_{80} بوده و نشان می‌دهد که این مولکول دارای گاف انرژی بیشتری نسبت به C_{60} است. بنابراین، انتظار می‌رود که B_{80} پتانسیل بالاتری برای ایجاد پیوندهای قوی‌تر با الکترودها و در نتیجه تزویج مؤثرتر داشته باشد. برای تحلیل اثر هندسه الکترودها بر روی تزویج مؤثر بین الکترودها مولکول، چهار نوع پیکربندی مختلف برای الکترودها در نظر گرفته شده است که شکل ۳ آن‌ها را نمایش می‌دهد. ابتدا الکترودهای خطی (یک‌بعدی در راستای y)، سپس الکترودهای سطحی (دو‌بعدی در صفحات yz و xz)، و در نهایت الکترودهای حجمی (سه‌بعدی در xyz) مورد بررسی قرار گرفته‌اند. در تمامی مدل‌سازی‌ها، مرکز هندسه فولرن در مبدا مختصات قرار گرفته و فاصله‌ی آن از الکترودها در راستای y ثابت فرض شده است. این موقعیت‌گذاری باعث شده که تأثیر تغییرات هندسی در راستاهای x و z به صورت موضعی بر شدت تزویج مشاهده شود. در این تحلیل‌ها، از رویکرد فضای حالت برای محاسبه تزویج استفاده شده و مقدار انتگرال جفت‌شدگی برای پیوندهای طلا-طلا و نقره-نقره 0.2eV در نظر گرفته

۴-۲- الکتروود سطحی

جدول ۱ مقدار تزویج مؤثر بین الکترودهای سطحی دوبعدی در دو صفحه YZ و XZ را با فولرن‌های C_{60} و B_{80} در شرایطی که تعداد اتم‌های الکتروود افزایش می‌یابد، نمایش می‌دهد. مقادیر تزویج محاسبه‌شده نسبت به حالتی که الکترودهای یک‌بعدی استفاده شده‌اند، افزایش یافته است. علت این افزایش را، در حالتی که تعداد کل اتم‌های الکتروود ثابت در نظر گرفته شود، می‌توان به افزایش تعداد اتم‌هایی نسبت داد که در فاصله نزدیک‌تری از مولکول قرار دارند.

نتایج همچنین نشان می‌دهد که تزویج مؤثر B_{80} با الکترودهای طلا در مقایسه با سایر حالات، بیشترین مقدار را دارد. علاوه بر این، الکترودهای XZ در مقایسه با YZ ، تزویج قوی‌تری با فولرن‌ها نشان می‌دهند. این امر به دلیل نزدیکی بیشتر اتم‌های الکتروود در پیکربندی XZ به فولرن است. از آنجا که می‌دانیم مقدار انتگرال جفت‌شدگی با افزایش فاصله کاهش می‌یابد، این افزایش تزویج منطقی به نظر می‌رسد.

همچنین، مشابه الکترودهای یک‌بعدی خطی، زمانی که الکترودهای دوبعدی سطحی مورد استفاده قرار می‌گیرند، افزایش تعداد اتم‌های الکتروود پس از یک مقدار آستانه، تأثیر چندانی بر تزویج مؤثر ندارد. نتایج نشان می‌دهد که در این پژوهش، مقدار آستانه برای تعداد اتم‌های الکتروود، ۳۰۳ است.

بهنجار بودن اربیتال‌های مولکولی الکتروود و کاهش وزن آن‌ها با افزایش تعدادشان است. این امر موجب می‌شود که مقدار تزویج مؤثر (شکل ۴.۴ پ)، که از قانون طلایی فرمی (رابطه ۹) به‌دست می‌آید، پس از افزایش تعداد محدودی از اتم‌های الکتروود، به یک مقدار ثابت همگرا شود.

همچنین، نوع اتم‌های الکتروود و کانال در تزویج مؤثر نقش چشمگیری دارد. رفتار نمودارهای تزویج به‌دست‌آمده برای الکترودهای طلا و نقره، در ترکیب با مولکول‌های C_{60} و B_{80} ، با پژوهش پیشین [۱۰] مطابقت دارد که این موضوع صحت محاسبات را تأیید می‌کند. البته، پژوهش پیشین تنها مولکولی با چهار اتم گوگرد را مطالعه کرده است و مقادیر تزویج در آن پژوهش، با مقادیر محاسبه‌شده در این مقاله تفاوت دارد.

نمودار شکل ۴.۴ پ تأثیر افزایش تعداد اتم‌ها در الکترودهای خطی طلا و نقره را در تزویج مؤثر به فولرن‌های C_{60} و B_{80} نشان می‌دهد. این نمودارها بیانگر آن هستند که مقدار تزویج مؤثر الکترودهای طلا و نقره به B_{80} بیش از تزویج مؤثر C_{60} به طلا و نقره است.

این تفاوت را می‌توان به توزیع گسترده‌تر اربیتال HOMO در B_{80} نسبت داد که منجر به افزایش برهم‌کنش‌های توابع موج الکترونی و در نتیجه افزایش شدت تزویج می‌شود. همچنین پس از افزایش تعداد اتم‌های الکتروود به حدود ۵ اتم، تغییری در تزویج مؤثر مشاهده نمی‌شود.

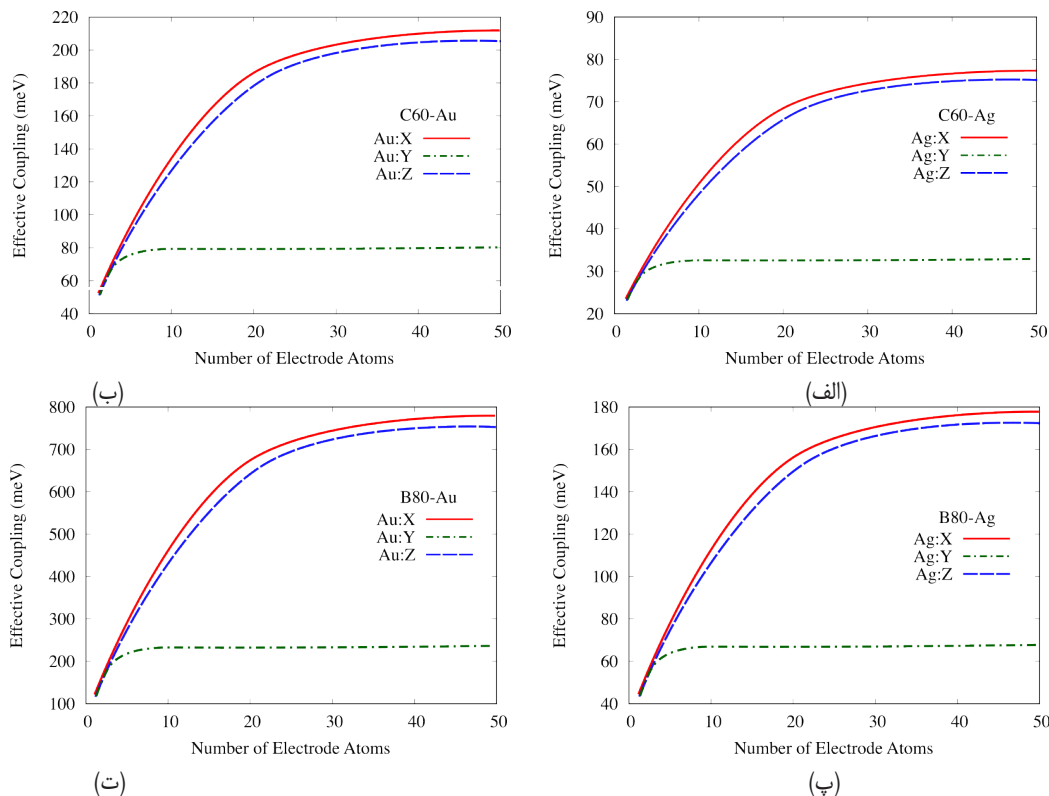
جدول ۱: مقادیر تزویج مؤثر الکتروود سطحی به فولرن C_{60} و B_{80} بر حسب میلی‌الکترون ولت.

تعداد اتم‌های الکتروود	الکتروود yz				الکتروود xz			
	C_{60}		B_{80}		C_{60}		B_{80}	
	Au	Ag	Au	Ag	Au	Ag	Au	Ag
۳×۳	۳۲	۱۲/۵	۱۱۰/۲	۲۳/۵	۳۶/۷	۱۴/۳	۱۱۳/۸	۲۴/۳
۵×۵	۳۲/۵	۱۲/۹	۱۱۰/۵	۲۴	۳۷/۲	۱۴/۶	۱۱۴/۱	۲۴/۷
۹×۹	۳۲/۶	۱۳	۱۱۰/۵	۲۴/۱	۳۷/۳	۱۴/۶	۱۱۴/۲	۲۴/۸
۱۵×۱۵	۳۲/۶	۱۳	۱۱۰/۵	۲۴/۱	۳۷/۳	۱۴/۷	۱۱۴/۲	۲۴/۸

۴-۳- الکترودهای حجمی

بر این، شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهند که افزایش تعداد اتم‌ها در راستای Y تأثیر چندانی بر افزایش تزویج مؤثر ندارد، در حالی که افزایش تعداد اتم‌ها در راستاهای X و Z موجب افزایش قابل توجه تزویج می‌شود. این رفتار را می‌توان به موقعیت فولرن نسبت به اتم‌های الکتروود نسبت داد. هنگامی که تعداد اتم‌ها در راستای Y افزایش می‌یابد، فاصله آن‌ها از فولرین به شدت زیاد شده و در نتیجه، اثر تزویج کاهش می‌یابد. اما در راستاهای X و Z ، که موازی با سطح فولرن هستند، افزایش تعداد اتم‌ها به صورت تدریجی منجر به افزایش فاصله آن‌ها از فولرن می‌شود، بنابراین تزویج همچنان روند افزایشی دارد. در حالی که در راستای Y ، که عمود بر سطح کره است، افزایش تعداد اتم‌ها باعث افزایش ناگهانی فاصله آن‌ها از کانال شده و در نتیجه تأثیر آن بر تزویج کمتر خواهد بود. همچنین، شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهند که افزایش تعداد اتم‌ها در راستاهای X و Z تأثیر تقریباً

الکتروود سه‌بعدی، کامل‌ترین مدل ساختاری الکتروود است که می‌توان از آن در افزاره‌های الکترونیکی بهره برد. این نوع الکتروود می‌تواند در اشکال مختلفی همچون مکعبی یا هرمی شکل مدل‌سازی شود که در این مقاله مدل مکعبی آن مورد بررسی قرار گرفته است. در الکترودهای سه‌بعدی، هر دو عامل هندسه و تعداد اتم‌ها به‌طور هم‌زمان نقش دارند، بنابراین انتظار می‌رود که تزویج در این حالت نسبت به الکترودهای سطحی دوبعدی و خطی یک‌بعدی افزایش یابد. شکل ۵ تزویج مؤثر الکتروود سه‌بعدی XYZ به فولرن C_{60} و B_{80} را به‌عنوان تابعی از افزایش تعداد اتم‌ها در راستاهای X و Y و Z نمایش می‌دهد. همانند الکترودهای یک‌بعدی و دوبعدی، در الکتروود سه‌بعدی نیز تزویج مؤثر طلا به B_{80} بیشترین مقدار را دارد، در حالی که تزویج C_{60} به نقره کمترین مقدار را نشان می‌دهد. علاوه



شکل ۵: نمودار تغییرات تزویج مؤثر الکترودهای حجمی و سه بعدی طلا و نقره به فولرن C_{60} و B_{80} نسبت به افزایش اتم‌های الکتروود در راستاهای x و y و z . (الف) تزویج C_{60} به طلا (ب) تزویج C_{60} به نقره (پ) تزویج B_{80} به طلا (ت) تزویج B_{80} به نقره

منابع

- [1] J. D. Meindl, Q. Chen, and J. A. Davis, "Limits on Silicon Nanoelectronics for Terascale Integration," *Science*, vol. 293, 2044-2049, 2001. <https://doi.org/10.1126/science.293.5537.2044>
- [2] C. Joachim, J. K. Gimzewski, and A. Aviram, "Electronics Using Hybrid-Molecular and Mono-Molecular Devices," *Nature*, vol. 408, 541-548, 2000. <https://doi.org/10.1038/35046000>
- [3] L. Lafferentz, F. Ample, H. Yu, S. Hecht, C. Joachim, and L. Grill, "Conductance of a Single Conjugated Polymer as a Continuous Function of Its Length," *Science*, vol. 323, 1193-1197, 2009. <https://doi.org/10.1126/science.1168255>
- [4] Y. Li, Z. Tan, and Y. Zhang, "Recent Advances in Flexible Perovskite Solar Cells: Fabrication and Applications," *Adv. Mater.*, vol. 35, 2209088, 2023.
- [5] C. Jia and X. Guo, "Molecule-Electrode Interfaces in Molecular Electronic Devices," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 42, 5642-5660, 2013. <https://doi.org/10.1039/c3cs35527f>
- [6] C. M. Goringe, D. R. Bowler, and E. Hernández, "Tight-Binding Modelling of Materials," *Rep. Prog. Phys.*, vol. 60, 1447-1512, 1997. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/60/12/001>
- [7] S. K. Maiti, "Quantum Transport through Mesoscopic Systems: Effect of Interactions, Disorder, and Magnetic Fields," *arXiv preprint arXiv:0909.2024*, 2009.
- [8] O. Adak, R. Korytár, A. Y. Joe, F. Evers, and L. Venkataraman, "Breakdown of Interference Rules in Azulene, a Non-Alternant Hydrocarbon," *arXiv preprint arXiv:1504.00242*, 2015.
- [9] M. Brandbyge, J.-L. Mozos, P. Ordejón, J. Taylor, and K. Stokbro, "Density-Functional Method for Nonequilibrium Electron Transport," *Phys. Rev. B*, vol. 65, 165401, 2002. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.165401>
- [10] T. Zelovich, L. Kronik, and O. Hod, "State Representation Approach for Atomistic Time-Dependent Transport Calculations in Molecular Junctions," *J. Chem. Theory Comput.*, vol. 11, 4861-4869, 2015. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00612>
- [11] J. Liu, L. Qiu, and S. Shao, "Recent Advances in Organic Thermoelectric Materials and Devices," *J. Mater. Chem. C*, vol. 9, 16143-16161, 2021. <https://doi.org/10.1039/D1TC04038C>
- [12] K. Kim, T. H. Lee, E. J. G. Santos, P. S. Jo, A. Salleo, Y. Nishi, and Z. Bao, "Structural and Electrical Investigation of Solution-Processed Bottom-Gate Thin-Film Transistors Based on Layered

مشابهی بر افزایش تزویج دارد، اما اختلاف ناچیزی بین این دو راستا مشاهده می‌شود. این اختلاف ناشی از این واقعیت است که توزیع اوربیتال‌های مولکولی C_{60} و B_{80} در سطح فولرن کاملاً متقارن در دو راستای X و Z نیستند.

۵- نتیجه گیری

مطالعه حاضر نشان داد که هندسه و جنس الکترودها تأثیر مستقیمی بر میزان تزویج فولرن‌ها با الکترودها دارد. فولرن B_{80} نسبت به C_{60} تزویج قوی‌تری با طلا دارد، درحالی‌که هر دو فولرن با نقره تزویج ضعیف‌تری نشان می‌دهند. الکترودهای حجمی در مقایسه با سایر انواع الکترودها، بیشترین میزان تزویج را ایجاد می‌کنند. همچنین، مشخص شد که افزایش ابعاد الکترودها در راستای موازی با سطح فولرن، تزویج را تقویت می‌کند، درحالی‌که در راستای عمود بر سطح فولرن، تأثیر کمتری بر افزایش تزویج دارد. این نتایج اهمیت انتخاب نوع الکترودها، تعداد اتم‌های الکترودها و موقعیت آن‌ها نسبت به مولکول را در طراحی افزاره‌های مولکولی از جمله نانوحسگرها و یکسوسازهای مولکولی نشان می‌دهد. علاوه بر این، نتایج این پژوهش بر اهمیت دقت در محاسبه ماتریس‌های همیلتونی سیستم قبل از تبدیل به فضای حالت تأکید دارد، زیرا صحت این ماتریس‌ها نقش کلیدی در دقت تحلیل‌های تزویج ایفا می‌کند. روش تبدیل سایت به حالت، در صورتی‌که با محاسبات دقیق همیلتونی همراه باشد، ابزار قدرتمندی برای بررسی تزویج در سیستم‌های مولکولی پیچیده خواهد بود.

تعارض منافع

نویسندگان این مقاله بدین‌وسیله اعلام می‌دارند که در ارتباط با انجام، تحلیل، نگارش و انتشار این پژوهش، هیچ‌گونه تعارض منافع مالی، شخصی، علمی یا سازمانی وجود ندارد.

- <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.035116>
- [19] I.-T. Lu, J. Park, J.-J. Zhou, and M. Bernardi, "Ab Initio Electron-Phonon Interactions for Excited Carrier Dynamics and Transport in Semiconductors," *Comput. Mater.*, vol. 6, 17, 2020.
- [20] M. J. van Setten, F. Weigend, and F. Evers, "The GW-Method for Quantum Chemistry Applications: Theory and Implementation," *J. Chem. Theory Comput*, 9, 232-246, 2013. <https://doi.org/10.1021/ct300648t>
- [21] C. Jin, M. Strange, T. Markussen, G. C. Solomon, and K. S. Thygesen, "Quantum Interference Effects in Molecular Junctions: Combining Wave-Function Analysis with Nonequilibrium Green's Function Transport Calculations," *J. Chem. Phys*, vol. 139, 184307, 2013. <https://doi.org/10.1063/1.4829520>
- [22] T. D. Crawford and H. F. Schaefer III, "An Introduction to Coupled Cluster Theory for Computational Chemists," *J. Chem. Phys*, vol. 104, 6259-6278, 1996.
- [23] G. Taubmann, "A Simple Introduction to Particle Physics Part II," *J. Chem. Edu*, vol. 69, 96-100, 1992. <https://doi.org/10.1021/ed069p96>
- [24] L. Chen, T. Hansen, and I. Franco, "Atomic Scale Design Principles for Single-Molecule Switches," *J. Phys. Chem. C*, vol. 118, 20009-20015, 2014. <https://doi.org/10.1021/jp505771f>
- Transition Metal Dichalcogenides," *ACS Nano*, vol. 9, 5922-5933, 2015. <https://doi.org/10.1021/acsnano.5b00581>
- [13] M. A. Malik, M. Afzaal, and P. O'Brien, "Precursor Chemistry for Deposition of Group 12 and 16 Chalcogenides," *J. Mater. Chem.*, vol. 21, 12358-12362, 2011.
- [14] H. He, R. Pandey, I. Boustani, and S. P. Karna, "First-Principles Study of the Electronic Structure of One-Dimensional Boron Nanotubes," arXiv preprint arXiv:0809.2238, 2008.
- [15] D. H. Kim and T. Kim, "Spin-Dependent Transport in Ferromagnetic Graphene Junctions," *J. Korean Phys. Soc.*, vol. 66, 1499-1503, 2015.
- [16] S. Datta, "Nanoscale Device Modeling: The Green's Function Method," *Superlattices Microstruct.*, vol. 28, 253-278, 2000. <https://doi.org/10.1006/spmi.2000.0920>
- [17] T. Markussen, R. Rurali, and M. Brandbyge, "Electronic Transport through Si Nanowires: Role of Bulk and Surface Disorder," *Phys. Rev. B*, vol. 74, 245407, 2006. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.245313>
- [18] T. Ozaki, K. Nishio, and H. Kino, "Efficient Implementation of the Nonequilibrium Green Function Method for Electronic Transport Calculations," *Phys. Rev. B*, vol. 81, 035116, 2010.