

( )

aashokri@tpnu.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۹۱/۸/۶؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۲/۳/۱)

$$n(۱۲,۰) / m(۱۱,۰) \quad n(۱۲,۰) / m(۶,۶)$$

( )

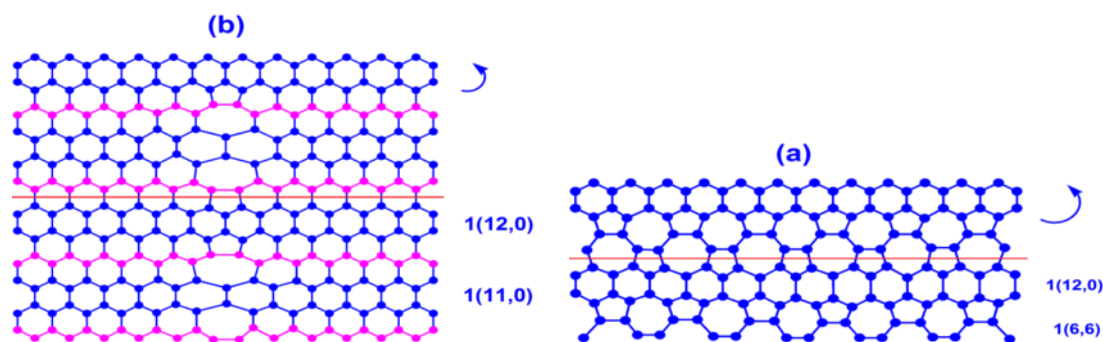
از این نوع می توان به اتصال فلز- فلز، فلز- نیم رسانا و نیم رسانا- نیم رسانا در ابر شبکه ها اشاره کرد [۷-۱۰].

در اینجا، ما خواص الکترونی ابر شبکه های نانولوله کربنی [۱۱-۱۳] تک دیواره  $n(۱۲,۰) / m(۶,۶)$  و  $n(۱۲,۰) / m(۱۱,۰)$  برای حالت  $n \neq m$  را بر پایه روش تقریب بستگی قوی برای  $n = ۱$  و  $m = ۱-۴$  بررسی می کنیم، که در آن از اتصال نانولوله های کربنی زیگزاگ- زیگزاگ و زیگزاگ- دسته صندلی برای یاخته های مختلف استفاده کرده ایم، و در واقع شاهد اتصال فلز- فلز و فلز- نیم رسانا هستیم. بر این اساس شاهد تغییرات ساختار نواری و چگالی حالت های الکترونی نانولوله کربنی در ابر شبکه با تغییرات کایرالیته و افزایش طول ابر شبکه ها هستیم.

در این مقاله، بعد از مرور کوتاه در مقدمه، در قسمت بعدی

بعد از کشف نانولوله های کربنی در سال ۱۹۹۱ [۱]، مطالعات زیادی به واسطه کاربرد فراوانشان در ساخت وسایل نانو الکترونیکی بر روی آنها صورت گرفته است. نانولوله های کربنی بر اساس هندسه شان می توانند فلز یا نیم رسانا باشند [۲] که استفاده از آنها در ساخت ادوات نانو الکترونیکی مثل دیودها، ترانزیستورها و غیره متنوع کرده است [۳-۵]. در برخی از این کاربردها از نقص های توپولوژیکی نانولوله بهره می گیرند [۶]. این نقص های توپولوژیکی باعث تغییر کایرالیته<sup>۱</sup> در شبکه شش گوشه کربن می شوند و در نتیجه خواص الکترونیکی نانولوله هم تغییر می کند.

۱. Cairality



شکل ۱. شماتیکی از اتصال پیکان‌ها نحوه لوله شدن را در نانولوله نشان می‌دهند.  $1(12,0)/1(11,0)$  و  $1(12,0)/1(6,6)$ .

مشخص هستند. پارامتر پرش بین نزدیک‌ترین همسایگان را  $2,7$ - الکترون ولت و انرژی جایگاه برای اتم کربن صفر در نظر گرفته شده است. محاسبات در این تحقیق با استفاده از نرم افزار MATLAB انجام گرفته‌اند.

همان طوری که در شکل ۱ می‌بینید با اتصال نانولوله‌های زیگزاگ- دسته‌سندلی [۱۵]، زنجیره‌ای از پنج و هفت ضلعی‌ها در محل اتصال ایجاد می‌شوند [۱۶] و با اتصال نانولوله‌های زیگزاگ- زیگزاگ، علاوه بر ایجاد یک جفت پنج- هفت ضلعی در محل اتصال، شاهد ظهور یک زنجیره اضافی نیز در ناحیه اتصال هستیم که در شکل این زنجیره با رنگ صورتی (کم رنگ) مشخص شده است. این اثر ناشی از تفاوت دستگردی در دو نوع نانولوله است که از آن به عنوان نقص توپولوژیکی پنج- هفت ضلعی در سیستم یاد می‌شود. هر ابرشبکه از یاخته  $1(12,0)/1(6,6)$  شامل ۷۲ اتم است که در شش لایه اتمی قرار گرفته‌اند همچنین هر ابرشبکه از یاخته  $1(12,0)/1(11,0)$  شامل ۱۳۸ اتم است که در دوازده لایه اتمی قرار گرفته‌اند.

در این قسمت به بررسی نوارهای انرژی و چگالی حالات ابرشبکه‌ها می‌پردازیم، اما با توجه به اینکه ابرشبکه‌ها از نانولوله‌های کربنی  $(12,0)$  و  $(6,6)$  تشکیل شده‌اند ابتدا این نانولوله‌ها را بررسی می‌کنیم. با توجه به نمودارهای چگالی حالت و ساختار نواری در شکل ۲ می‌بینیم که نانولوله‌های  $(12,0)$  و  $(6,6)$  هر دو روی سطح فرمی دارای چگالی حالت

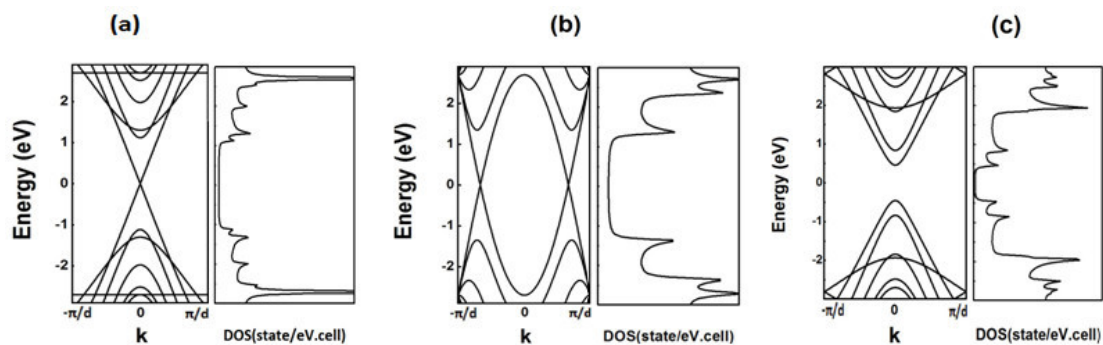
مدل مورد نظر را معرفی و در قسمت سوم نتایج محاسبات مطرح می‌شود. در آخر نتیجه‌گیری ارائه می‌شود.

فرض کنید که ابرشبکه‌های نانولوله کربنی تک دیواره شکل ۱ باشد. همان طوری که اشاره شد برای اتصال در فصل مشترک نقص‌های توپولوژیکی جفت‌های پنج و هفت ضلعی تشکیل می‌شود. برای بررسی خصوصیات الکترونی آنها، هامیلتونی ساختار را با در نظر گرفتن تعداد اتم‌های مورد نظر در یاخته آن (مطابق شکل ۱) در تقریب بستگی قوی [۱۴] (نزدیک‌ترین همسایه) نوشته و ویژه مقادیر انرژی محاسبه می‌شود. از روی ویژه مقادیر، چگالی حالت و سایر مشخصات نواری ساختار مورد نظر به دست می‌آید:

$$H\psi_n = E\psi_n \quad (1)$$

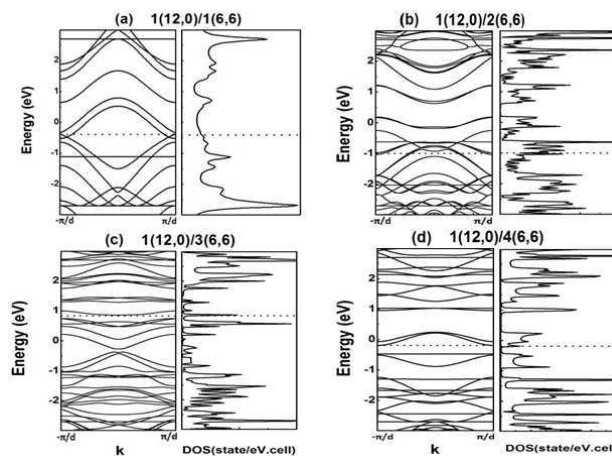
$$H_n\psi_n + H_{n,n+1}\psi_{n+1} + H_{n,n-1}\psi_{n-1} = E\psi_n$$

همان طوری که از معادله (۱) دیده می‌شود هامیلتونی سیستم شامل سه جمله است. جمله اول ( $H_n$ ) شامل اثر هر اتم بر نزدیک‌ترین همسایگان خود می‌باشد، جمله دوم ( $H_{n,n+1}$ ) و جمله سوم ( $H_{n,n-1}$ ) در واقع شامل پتانسیل‌های برهمکنشی هر ابرشبکه بر دیگری می‌باشد، که به ترتیب شامل عبارتهای  $e^{ikd}$  و  $e^{-ikd}$  می‌باشند. در این جملات،  $d$  طول ابرشبکه و  $k$  بردار موج است که در منطقه اول بریلوئن و به صورت  $-\frac{\pi}{d} < k < \frac{\pi}{d}$  تعریف می‌شود. در این روش جایگاه هر اتم مشخص است، بنابراین نزدیک‌ترین همسایگان هر اتم نیز



شکل ۲. نمایشی از ساختار نواری و چگالی حالت برای نانولوله‌های کربنی (a) دسته صندلی، (b) زیگزاگ  $(12,0)$ ، و (c) زیگزاگ  $(11,0)$ . طول یاخته واحد برای نانولوله‌ها به ترتیب به صورت  $1,42 \text{ \AA}$  و  $2,26 \text{ \AA}$  و  $2,26 \text{ \AA}$  است و سطح فرمی برای هر سه مورد در انرژی صفر قرار دارد.

همچنین ابرشبکه‌های  $(6,6)/3(12,0)$  و  $(6,6)/4(12,0)$  و  $(11,0)/2(12,0)$  و  $(11,0)/3(12,0)$  و  $(11,0)/4(12,0)$  ایجاد خواهند شد. محاسبات شامل دو بخش می‌شوند که در حضور و غیاب اتم ناخالصی انجام گرفته‌اند که بررسی آنها پرداخته می‌شود.

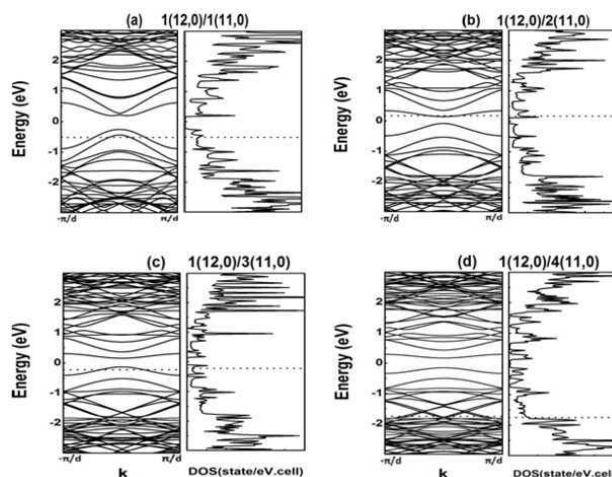


شکل ۳. نمایشی از ساختار نواری و چگالی حالات برای ابرشبکه‌های  $(6,6)/m(12,0)$  در اطراف سطح فرمی برای (a)  $m=1$ ، (b)  $m=2$ ، (c)  $m=3$  و (d)  $m=4$ . سطح فرمی با نقطه چین مشخص شده و برای سیستم‌های (a) تا (d) به ترتیب برابر با  $0,4$ ،  $-0,83$  و  $0,19$  و  $-0,19$  الکترون ولت است. طول یاخته‌ها در ابرشبکه‌ها به ترتیب برابر با (a)  $6,682$ ، (b)  $8,106$ ، (c)  $9,522$  و (d)  $10,942$  آنگستروم می‌باشد.

در ابرشبکه‌های  $(6,6)/m(12,0)$  برای  $m=2$  هر یاخته از این ابرشبکه شامل ۹۶ اتم است که در هشت لایه اتمی قرار گرفته‌اند، و برای  $m=3$  ابرشبکه شامل یاخته‌هایی با ۱۲۰ اتم است که در ده لایه اتمی قرار گرفته‌اند. برای  $m=4$  ابرشبکه حاوی یاخته‌هایی با ۱۴۴ اتم است که در دوازده لایه اتمی قرار گرفته‌اند. همچنین در ابرشبکه‌های  $(11,0)/m(12,0)$ ، برای  $m=2$  هر یاخته از ابرشبکه شامل ۱۸۲ اتم بوده که در شانزده لایه اتمی قرار گرفته‌اند و برای  $m=3$  و  $m=4$  ابرشبکه‌ها به ترتیب شامل یاخته‌هایی با ۲۲۶ و ۲۷۰ اتم بوده که در ۲۰ و ۲۴ لایه اتمی قرار گرفته‌اند. با توجه به شکل ۳ می‌بینیم که در هر چهار سیستم نوارهای انرژی سطح فرمی را قطع کرده‌اند بنابراین همگی سیستم‌هایی فلزی هستند. با توجه به اینکه نانولوله‌های  $(6,6)$  و  $(12,0)$  هر دو فلزی هستند و سطح فرمی آنها در انرژی صفر الکترون ولت قرار دارد، اما دیده می‌شود که پس از اتصال آنها به صورت ابرشبکه‌ای، سطح فرمی به بالا و یا پایین‌تر از انرژی صفر جابه‌جایی پیدا می‌کند و باعث قرار گرفتن سطح فرمی در ناحیه نوارهای ظرفیت یا رسانش می‌شود. این

می‌باشند و نوارهای انرژی سطح فرمی را قطع کرده‌اند، بنابراین هر دو خاصیت فلزی دارند. اما همان‌طور که در شکل می‌بینیم، برای نانولوله  $(11,0)$  در اطراف سطح فرمی گاف انرژی وجود دارد و نوارهای انرژی سطح فرمی را قطع نکرده‌اند، بنابراین نانولوله خاصیت نیم‌رسانایی دارد. با دانستن این اطلاعات به سراغ محاسبه چگالی حالت و ساختار نواری ابرشبکه‌ها می‌رویم. برای این منظور با ثابت قرار دادن  $n$  به صورت  $n=1$  و با افزایش  $m$  به صورت  $m=1-4$  به ترتیب ابرشبکه‌های  $(6,6)/2(12,0)$  و

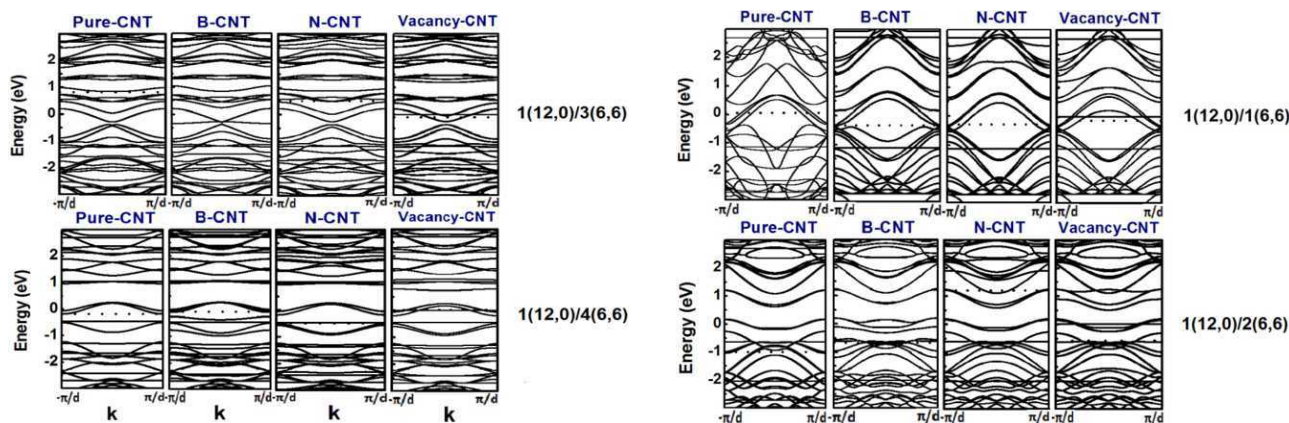
در این بخش ابرشبهه‌هایی از نانولوله کربنی را بررسی می‌کنیم که به جای یکی از اتم‌های کربن در یاخته ابرشبهه، اتم دیگری به صورت ناخالصی در سیستم قرار بگیرد. با توجه به اینکه چگونگی اتصال، طول یاخته و تعداد اتم‌ها در بخش قبل توضیح داده شد، در اینجا از ذکر آنها صرف‌نظر می‌کنیم. اتم‌های بور (B)، نیتروژن (N) و تهی‌جای<sup>۱</sup> به عنوان ناخالصی در سیستم‌ها استفاده شده‌اند. در محاسبات انرژی جایگاهی برای اتم بور ۲,۳۳ الکترون ولت [۱۷]، برای اتم نیتروژن ۲,۵- الکترون ولت [۱۸] و برای تهی‌جای انرژی جایگاهی را یک مقدار بزرگ به صورت ۴۰ الکترون ولت در نظر گرفته شده‌اند. با توجه به اینکه بور از گروه سوم و نیتروژن از گروه پنجم است، بنابراین این دو اتم به ترتیب دارای خاصیت پذیرندگی و گیرندگی نسبت به گروه چهارم هستند که کربن در آن قرار دارد و علامت مثبت و منفی در انرژی جایگاهی هم به همین امر مربوط است. با توجه به اینکه محاسبات بر اساس تقریب بستگی انجام می‌گیرد، بنابراین پارامتر پرش بین نزدیکترین همسایگان را برای اتم‌های بور و نیتروژن با اتم‌های کربن همسایه  $2.7 \text{ \AA}$ - در نظر گرفته شد، اما پارامتر پرش برای تهی‌جای با توجه به تهی‌جای بودن صفر در نظر گرفته شده است. با داشتن این اطلاعات و داده‌ها می‌توان ساختار نوار الکترونی و چگالی حالت را برای سیستم‌ها در حضور اتم ناخالصی با توجه به معادله (۱) رسم کرد. همان‌طور که در شکل‌های ۵ و ۶ می‌بینید نوارهای انرژی و چگالی حالت برای سیستم‌های  $n(12,0)/m(6,6)$  رسم شده‌اند، که در آنها می‌بینیم نتایج برای هر سه اتم ناخالصی نمایش داده شده و مقایسه‌ای بین آنها و حالت بدون ناخالصی انجام گرفته است. در شکل ۵ مشاهده می‌شود که با تغییر اتم ناخالصی در سیستم‌ها رفتار نوارهای انرژی در اطراف سطح فرمی تغییر کرده و بنابراین انرژی فرمی هم جابه‌جا شده است. می‌بینیم که در سیستم‌های با ناخالصی بور تراکم نوارهای انرژی در اطراف سطح فرمی به نسبت سیستم‌های با



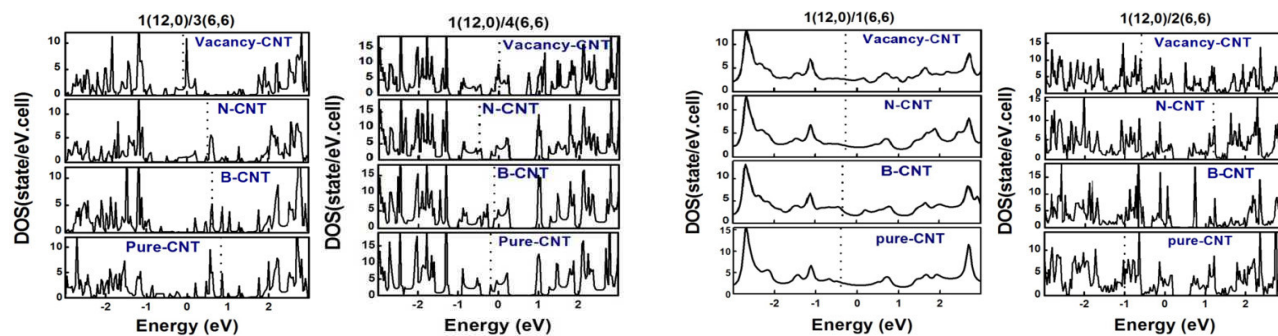
شکل ۴. نمایشی از ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات برای ابرشبهه‌های  $1(12,0)/m(11,0)$  در اطراف سطح فرمی برای (a)  $m=1$ ، (b)  $m=2$ ، (c)  $m=3$  و (d)  $m=4$ . سطح فرمی در شکل‌ها با نقطه چین نشان داده شده است که برای سیستم‌های (a) تا (d) به ترتیب برابر با  $0.52$ ،  $0.17$ ،  $-0.22$  و  $-0.75$  الکترون ولت است. طول یاخته‌ها در ابرشبهه‌ها به ترتیب برابر با (a)  $12.78$ ، (b)  $17.04$ ، (c)  $21.3$  و (d)  $25.56$  آنگستروم می‌باشد.

ناشی از اثر نقص توپولوژیکی پنج-هفت ضلعی است که با شکستن تقارن الکترون-حفره باعث جابه‌جایی سطح فرمی می‌شود. همچنین با توجه به انطباق چگالی حالت‌ها بر نوارهای انرژی در شکل‌ها شاهد چگونگی افزایش و کاهش حالت‌ها در ساختار نوار هستیم. در بررسی ابرشبهه‌های  $n(12,0)/m(11,0)$  با توجه به نیم‌رسانا بودن نانولوله کربنی  $(11,0)$  می‌بینیم که پس از اتصال همه سیستم‌ها دارای رسانندگی هستند و در هر چهار سیستم نوارهای انرژی سطح فرمی را قطع می‌کنند (به شکل ۴ توجه کنید) که این هم از اثرات نقص پنج-هفت ضلعی است که با تغییر کایرالیته نانولوله باعث تغییر خواص الکترونی سیستم‌ها می‌شود، که با وجود گاف نوار بین نوارهای ظرفیت و رسانش، با جابه‌جایی انرژی فرمی در ابرشبهه‌ها باعث بوجود آمدن رسانندگی در سیستم‌ها می‌شود. همچنین در تعدادی از موارد سطح فرمی در محدوده نوارهای ظرفیت قرار دارد، که می‌توان گفت در این موارد حفره‌ها نقش رسانندگی را در سیستم‌ها ایفا می‌کنند.

۱. Vacancy



شکل ۵. نمایشی از ساختار نواری برای ابرشبکه‌های  $1(12,0)/m(6,6)$  برای  $m=1-4$  در حضور اتم‌های ناخالصی بور، نیتروژن و تهی‌جای در اطراف سطح فرمی. انرژی فرمی برای سیستم‌های  $1(12,0)/1(6,6)$  به ترتیب از چپ به راست برابر  $0.4$ ،  $0.34$ ،  $0.28$  و  $0.13$  الکترون ولت است همچنین برای سیستم‌های  $1(12,0)/2(6,6)$  به ترتیب برابر  $1$ ،  $0.67$ ،  $0.19$  و  $0.61$  الکترون ولت می‌باشد. برای ابرشبکه‌های  $1(12,0)/3(6,6)$  انرژی فرمی به ترتیب برابر با  $0.83$ ،  $0.62$ ،  $0.5$  و  $0.1$  الکترون ولت است و برای سیستم‌های  $1(12,0)/4(6,6)$  برابر با  $0.19$ ،  $0.1$ ،  $0.49$  و  $0.02$  الکترون ولت می‌باشد.

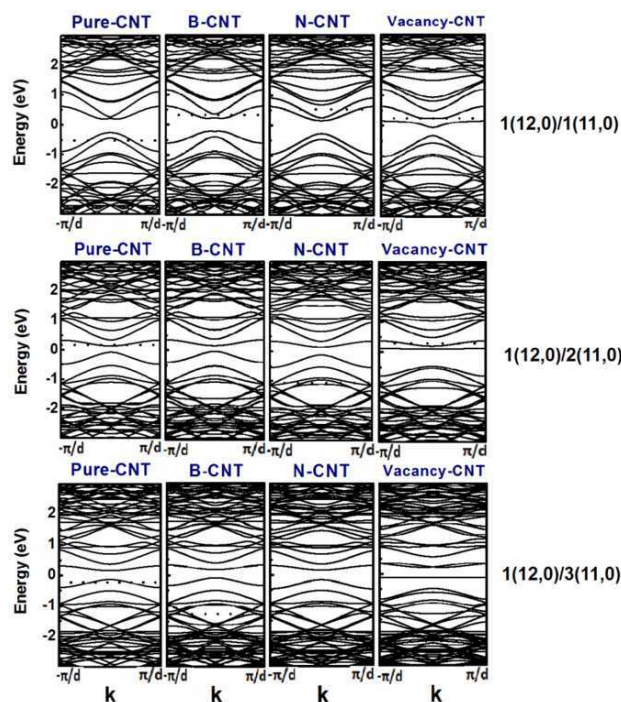


شکل ۶. نمایشی از چگالی حالت‌ها برای ابرشبکه‌های  $1(12,0)/m(6,6)$  برای  $m=1$  در اطراف سطح فرمی در حضور اتم‌های ناخالصی بور، نیتروژن و تهی‌جای. انرژی فرمی برای سیستم‌های  $1(12,0)/1(6,6)$  به ترتیب از چپ به راست برابر  $0.4$ ،  $0.34$ ،  $0.28$  و  $0.13$  الکترون ولت است. همچنین برای سیستم‌های  $1(12,0)/2(6,6)$  به ترتیب برابر  $1$ ،  $0.67$ ،  $0.19$  و  $0.61$  الکترون ولت می‌باشد. برای ابرشبکه‌های  $1(12,0)/3(6,6)$  انرژی فرمی به ترتیب برابر با  $0.83$ ،  $0.62$ ،  $0.5$  و  $0.1$  الکترون ولت است و برای سیستم‌های  $1(12,0)/4(6,6)$  برابر با  $0.19$ ،  $0.1$ ،  $0.49$  و  $0.02$  الکترون ولت می‌باشد.

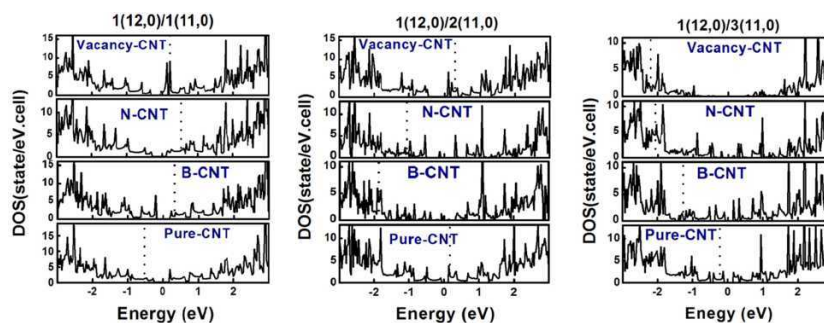
فرمی هستیم، اما با توجه به اینکه در تمامی سیستم‌ها سطح فرمی نوارهای انرژی را قطع کرده، همه سیستم‌ها دارای خاصیت رسانندگی هستند. همچنین با توجه به اینکه در ابرشبکه‌ها شاهد اتصال نانولوله‌های فلز-نیم‌رسانا هستیم، بنابراین می‌بینیم که بین نوارهای ظرفیت و رسانش، گاف نواری وجود دارد، اما به دلیل وجود نقص پنج-هفت ضلعی در ابرشبکه‌ها، با به هم خوردن تقارن الکترون-حفره و در نتیجه جابه‌جایی انرژی فرمی، شاهد رسانندگی در سیستم‌های

دیگر اتم‌های ناخالصی بیشتر است. البته بعد از اتم بور می‌توان تراکم نوارهای انرژی در نقص تهی‌جای را در دومین مرتبه قرار داد.

در گام بعدی به دنبال محاسبه ساختار نواری و چگالی حالت‌ها برای ابرشبکه  $1(12,0)/m(11,0)$  در حضور اتم‌های ناخالصی هستیم که نتایج را در شکل‌های ۷ و ۸ می‌توان دید. با توجه به شکل ۷ می‌بینیم که با تغییر اتم ناخالصی رفتار نوارهای انرژی اطراف سطح فرمی تغییر کرده و شاهد جابه‌جایی انرژی



شکل ۷. نمایشی از ساختار نوار الکترونی برای ابرشبکه‌های  $1(12,0)/m(11,0)$  برای  $m=1$  در اطراف سطح فرمی در حضور اتم‌های ناخالصی بور، نیتروژن و تهی‌جای. انرژی فرمی برای سیستم‌های  $1(12,0)/1(11,0)$  به ترتیب از چپ به راست برابر  $0.52$ ،  $0.32$ ،  $0.53$  و  $0.23$  الکترون ولت است. همچنین برای سیستم‌های  $1(12,0)/2(11,0)$  به ترتیب برابر  $0.17$ ،  $0.87$ ،  $-0.06$  و  $0.29$  الکترون ولت می‌باشد. برای ابرشبکه‌های  $1(12,0)/3(11,0)$  انرژی فرمی به ترتیب برابر با  $-0.22$ ،  $-1.27$ ،  $-2.08$  و  $-2.2$  الکترون ولت است.



شکل ۸. نمایشی از چگالی حالت‌ها برای ابرشبکه‌های  $1(12,0)/m(11,0)$  برای  $m=1$  در اطراف سطح فرمی در حضور اتم‌های ناخالصی بور، نیتروژن و تهی‌جای. انرژی فرمی برای سیستم‌های  $1(12,0)/1(11,0)$  به ترتیب از چپ به راست برابر  $0.52$ ،  $0.32$ ،  $0.53$  و  $0.23$  الکترون ولت است. همچنین برای سیستم‌های  $1(12,0)/2(11,0)$  به ترتیب برابر  $0.17$ ،  $0.87$ ،  $-0.06$  و  $0.29$  الکترون ولت می‌باشد. برای ابرشبکه‌های  $1(12,0)/3(11,0)$  انرژی فرمی به ترتیب برابر با  $-0.22$ ،  $-1.27$ ،  $-2.08$  و  $-2.2$  الکترون ولت است.

ابرشبکه‌ای هستیم، که در سیستم‌هایی که سطح فرمی آنها در ناحیه نوارهای ظرفیت قرار گرفته است، حفره‌ها عامل رسانش خواهند بود. می‌بینیم که با تغییر اتم ناخالصی گاف نواری بین نوارهای ظرفیت و رسانش کاهش یا افزایش می‌یابد، که این کاهش برای اتم بور بیشتر دیده می‌شود. در ابرشبکه‌ها

ابرشبکه‌ای هستیم، که در سیستم‌هایی که سطح فرمی آنها در ناحیه نوارهای ظرفیت قرار گرفته است، حفره‌ها عامل رسانش خواهند بود. می‌بینیم که با تغییر اتم ناخالصی گاف نواری بین نوارهای ظرفیت و رسانش کاهش یا افزایش می‌یابد، که این کاهش برای اتم بور بیشتر دیده می‌شود. در ابرشبکه‌ها

از نوارهای انرژی و چگالی حالات می‌بینیم که با قرار دادن هر اتم ناخالصی در سیستم‌ها جایگاه سطح فرمی تغییر می‌کند و با توجه به نوع اتم انرژی فرمی افزایش یا کاهش می‌یابد. برای ابرشبکه‌های  $n(12,0)/m(6,6)$  مشاهده می‌شود که در حضور هر سه اتم ناخالصی سیستم‌ها دارای خاصیت فلزی هستند و نوارهای انرژی سطح فرمی را قطع کرده‌اند. می‌بینیم که در سیستم‌های با ناخالصی بور تراکم نوارهای انرژی در اطراف سطح فرمی به نسبت سیستم‌های با دیگر اتم‌های ناخالصی بیشتر است. برای ابرشبکه  $n(12,0)/m(11,0)$  در حضور اتم‌های ناخالصی می‌بینیم که با تغییر اتم ناخالصی رفتار نوارهای انرژی اطراف سطح فرمی تغییر کرده و شاهد جابه‌جایی انرژی فرمی هستیم، اما با توجه به اینکه در تمامی سیستم‌ها سطح فرمی نوارهای انرژی را قطع کرده است، همه سیستم‌ها دارای خاصیت رسانندگی هستند. همچنین با توجه به اینکه در این ابرشبکه‌ها شاهد اتصال نانولوله‌های فلز-نیم‌رسانا هستیم، بنابراین می‌بینیم که بین نوارهای ظرفیت و رسانش، گاف نواری وجود دارد اما به دلیل وجود نقص پنج-هفت ضلعی در ابرشبکه‌ها، با به هم خوردن تقارن الکترون-حفره و در نتیجه جابه‌جایی انرژی فرمی، شاهد رسانندگی در سیستم‌های ابرشبکه‌ای هستیم که در سیستم‌هایی که سطح فرمی آنها در ناحیه نوارهای ظرفیت قرار گرفته، حفره‌ها عامل رسانش خواهند بود. می‌بینیم که با تغییر اتم ناخالصی گاف نواری بین نوارهای ظرفیت و رسانش کاهش یا افزایش می‌یابد، که این کاهش برای اتم بور بیشتر دیده می‌شود.

این کار حاصل پژوهشی است که به وسیله دانشگاه پیام نور (مرکز تهران شرق) حمایت مالی شده است.

چگالی حالت‌های الکترونی در اطراف سطح فرمی افزایش می‌یابد. می‌بینیم که در ابرشبکه  $n(12,0)/m(11,0)$  برای ناخالصی تھی جای گاف بزرگی در محدوده انرژی ۱- و ۱ الکترون ولت وجود دارد (گاف انرژی بین نوارهای ظرفیت و رسانش) که نسبت به دیگر اتم‌های ناخالصی و حالت خالص مقدار قابل توجهی است.

رفتار مشابهی نیز در کار دیگر محققان بر روی اتصالات گرافین زیگزاگ و دسته صندلی دیده می‌شود. در چنین اتصالاتی نقص‌های توپولوژیکی و هندسی نیز وجود دارد. به واسطه چنین نقص‌هایی خصوصیات ترابرد الکتریکی ساختار مورد نظر تغییر می‌کند. به طوری که در آنها گاف انرژی صفر و یا گاف انرژی باریک دیده می‌شود [۱۹-۲۱]. در این کار نیز چنین خصوصیتی دیده می‌شود که نشان دهنده صحت کار بر روی ساختارهای ابرشبکه‌ای از نانولوله‌های مختلف می‌باشد.

در این مقاله، دیدیم که نقص‌های توپولوژیکی پنج-هفت ضلعی در سیستم‌ها با تغییر در کایرلبیتی نانولوله‌های کربنی باعث برهم زدن تقارن سیستم شده و در نتیجه منجر به تغییر خواص الکتریکی ابرشبکه‌ها می‌شوند. با توجه به نتایج به دست آمده از نوارهای انرژی و چگالی حالات مشاهده شد که در غیاب ناخالصی هر چهار ساختار در ابرشبکه‌های  $n(12,0)/m(6,6)$  و  $n(12,0)/m(11,0)$  دارای خاصیت رسانندگی هستند و انرژی فرمی به وسیله نوارهای انرژی قطع شده است. ولی فواصل کمی دورتر از انرژی فرمی گاف انرژی دیده می‌شود. یعنی با کنترل ولتاژ می‌توان خاصیت الکترونی ساختار را به حالت عایق یا فلزی تغییر داد. اما در حضور ناخالصی با توجه به نتایج به دست آمده

6. P G Collins, A Zettl, H Bando, A Thess, and R E Smalley, *Science* **278** (1997) 100.
7. W Lu, E G Wang, and H Guo, *Phys. Rev. B* **68** (2003) 075407.
8. W Jaskólski, S Stachów, and L Chico, *Acta Phys. Pol. A* **108** (2005) 697.

1. S Iijima, *Nature* **354** (1991) 56.
2. J Charlier, X Blase, and S Roche, *Rev. Mod. Phys.* **79** (2005) 677.
3. S G Lemay et al., *Nature* **412** (2001) 617.
4. L Cvenema et al., *Science* **283** (1999) 52.
5. S J Tans, A R M Verschueren, and C Dekker, *Nature* **393** (1998) 49.

15. F Khoeini and H Farman, *Iranian Journal of Physics Research* **8** (2008) 39.
16. H Santos, A Ayuela, W Jaskólski, M Pelc, and L Chico, *Phys. Rev. B* **80** (2009) 035436.
17. R. Moradian, *Phys. Rev. B* **70** (2004) 205425; F Khoeini, A A Shokri, and H Farman, *Solid State Communications* **149** (2009) 874.
18. R H Xie, *Phys. Lett. A* **258** (1999) 51.
19. G-X Wu, Q-Y Meng, and Y-H Jing, *Chem. Phys. Lett.* **531** (2012) 119.
20. H Zeng *et al.*, *Modern Phys. Lett.* **24** (2010) 2445.
21. Y O Klimenko, *Low Temp. Phys.* **37** (2011) 496.
9. M S Fuhrer, J Nygård, L Shih, M Forero, S G Louie, A Zettl, P L Y G Yoon, M S C Mazzoni, H J Choi, and J Ihm McEuen, *Science* **288** (2000) 494.
10. L Chico, L X Benedict, S G Louie, and L Cohen, *Phys. Rev. B* **54** (1996) 2600 .
11. R Saito, G Dresselhaus, and M S Dresselhaus, “*Physical Properties of Carbon Nanotubes*”, Imperial College Press, London (1998).
12. R Saito, G Dresselhaus, and M S Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **53** (1996) 2044.
13. A Ayuela, L Chico, and W Jaskólski, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 085435.
14. K Grove-Rasmussen, “*Electronic Transport in Single Wall Carbon Nanotubes*”, PhD thesis, Denmark (2006).