

C<sub>6</sub>.

( )  
(IPM)

aashokri@tpnu.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۸۹/۹/۱۵؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۰/۱۲/۱۴)

(C<sub>6</sub>.)

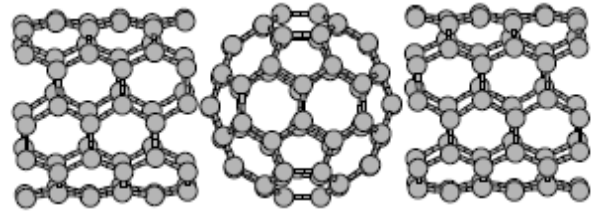
( )

مهمی برای دستگاه‌های نانوالکترونیکی محسوب می‌شوند. از میان بسیاری از انواع مولکول‌ها، فولرین C<sub>60</sub> به عنوان پل مولکولی مناسب‌تر است، چون پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده آن (LUMO) در مقایسه با سایر مولکول‌های آلی در انرژی‌های نسبتاً پایین‌تری واقع است [۴]. بیست و جهی بریده شده C<sub>60</sub>، متشکل از دوازده پنج‌ضلعی و بیست شش ضلعی است. پیوندهای کربن-کربن در این مولکول دارای دو طول مختلف هستند: ۱٫۴۶ Å برای پیوندهای منفرد، یعنی پیوندهای روی پنج‌ضلعی‌ها و ۱٫۴۰ Å برای پیوندهای دوگانه یا پیوندهای واقع بر شش ضلعی‌هایی که با پنج‌ضلعی‌ها اشتراک ندارند [۵].

از سوی دیگر نانولوله‌های کربنی نیز به دلیل ساختار و

در سال‌های اخیر استفاده از مولکول‌ها در الکترونیک، حوزه جدیدی را در نانوفناوری گشوده است که به آن الکترونیک مولکولی می‌گویند. این فناوری که در آن از مولکول‌ها به عنوان اجزاء فعال دستگاه‌های الکترونیکی استفاده می‌شود، در سال‌های کنونی رشد سریعی به خود گرفته است و امید می‌رود که در آینده نزدیک بتوان به طور گسترده از مولکول‌ها به عنوان عناصر اصلی دستگاه‌های الکترونیکی استفاده کرد [۱].

پیشرفت‌های اخیر در دستکاری مولکول‌های منفرد با تعداد کمی از مولکول‌ها این امکان را فراهم می‌سازد تا بتوان مولکول‌ها را به الکترودها متصل کرد و خواص ترابرد الکتریکی آنها را اندازه گرفت [۳ و ۲]. پل‌های مولکولی کاندیداهای بسیار



شکل ۱. جفت‌شدگی مولکول  $C_{60}$  با دو نانولوله کربنی دسته‌صندلی (۵ و ۵)

سیستم مورد نظر مطابق شکل ۱ است. هامیلتونی کل سیستم در تقریب بستگی قوی را می‌توان به صورت

$$H_{\alpha} = \sum_{n_{\alpha}} \varepsilon_{n_{\alpha}} c_{n_{\alpha}}^{\dagger} c_{n_{\alpha}} + \sum_{\langle n_{\alpha}, n'_{\alpha} \rangle} t_{n_{\alpha}, n'_{\alpha}} (c_{n_{\alpha}}^{\dagger} c_{n'_{\alpha}} + h.c.), \quad (1)$$

نوشت [۷ و ۸]. به طوری که هامیلتونی برای الکترودهای نانولوله کربنی منفرد چپ و راست و سیم مولکولی منفرد به ترتیب با  $\alpha (= L, R, W)$  نشان داده می‌شود.

در رابطه (۱)،  $\varepsilon$  انرژی پتانسیل جایگاه محلی<sup>۲</sup> است. در جمله آخر،  $\langle \dots \rangle$  جمع روی اتم‌های نزدیک‌ترین همسایه را نشان می‌دهد و  $t_{n_{\alpha}, n'_{\alpha}}$  انتگرال همپوشانی بین اوربیتال‌های  $\pi$  اتم‌های کربن در الکتروده چپ و راست و سیم مولکولی را نشان می‌دهد. همچنین اگر سیم مولکولی را  $C_{\infty}$  در نظر بگیریم، انتگرال همپوشانی در آن  $t_{n_c, n'_c}$  به طول پیوند کربن-کربن (پیوندهای منفرد و دوتایی در فولرین طول‌های مختلف دارند) بستگی دارد؛ بنابراین، در این مورد عناصر ماتریسی همپوشانی مختلف را در نظر می‌گیریم:  $t_1$  برای پیوندهای منفرد و  $t_2$  برای پیوندهای دوگانه. همچنین،  $c_{n_{\alpha}}^{\dagger} (c_{n_{\alpha}})$  عملگر خلق (نابودی) برای یک الکترون در حالت شبه وانیر<sup>۳</sup> روی اتم  $n_{\alpha}$  است. جمله  $\varepsilon_{n_{\alpha}}$  (انرژی جایگاه محلی روی اتم  $n_{\alpha}$ )، در بردارنده اثر انرژی در محل اتم به تنهایی  $(\varepsilon, n_{\alpha})$ ، ولتاژ درگاه  $V_g$  (که سطوح انرژی ناحیه مولکولی را جابه‌جا می‌کند) و پتانسیل خارجی  $U_n^{ext}$  است. این پتانسیل الکتروستاتیک به علت یک میدان الکتریکی اعمال شده است و در ساختار مورد نظر به صورت زیر داده می‌شود:

$$U_{n_{\alpha}}^{ext} = \begin{cases} -eV_a / 2 & n \in \text{الکتروده چپ}, \\ V_g & n \in \text{منطقه مرکزی}, \\ +eV_a / 2 & n \in \text{الکتروده راست}, \end{cases} \quad (2)$$

به طوری که  $V_a$  ولتاژ بایاس است.

در اینجا، فرض می‌شود که برهم‌کنش مستقیم بین الکترودهای چپ و راست نادیده گرفته شده است و الکترودها

خصوصیات منحصر به فرد خود کاندیداهای بسیار خوبی برای کار در مقیاس کوچک‌اند و خصوصیات منحصر به فرد آنها نیز تحقیق‌های کاربردی وسیعی را پیش روی ما قرار می‌دهند. در مورد نانولوله‌های کربنی پارامترهایی مانند طول، قطر، نحوه چپش اتم‌ها در ساختار نانولوله، تعداد دیواره‌ها و نقص‌های ساختاری از جمله خواصی هستند که در تعیین خواص الکتریکی آنها نقش بسزایی دارند [۶]. از آن‌جا که مقوله عبوردهی بار الکتریکی در سیستم‌های مزوسکوپیکی، مخصوصاً ساختارهای کربنی مانند نانولوله‌ها و فولرین به عنوان سازه‌های الکترونیک آینده بسیار مورد توجه است، بررسی عبوردهی این ساختارها در اتصال با هم می‌تواند به عنوان کاندیداهایی برای قطعات الکترونیکی آینده بسیار حائز اهمیت باشد.

ترابرد الکتریکی از طریق مولکول‌های منفرد به طبیعت و چگونگی اتصال مولکول با الکترودها وابسته است. مثلاً اگر یک مولکول به طور ضعیفی به الکترودها متصل شود بار در مولکول به طور محکمی جایگزیده می‌شود و ترابرد در رژیم انسداد کولنی<sup>۱</sup> رخ می‌دهد. اما در حالتی که جفت‌شدگی بین الکترودها و مولکول قوی باشد به رژیم بالستیک نزدیک می‌شویم.

ترتیب‌بندی مقاله به این صورت است: ابتدا مسئله مورد نظر را به صورت نظری فرمول‌بندی می‌کنیم. سپس نتایج محاسباتی را برای ترابرد الکتریکی همدوس از طریق پل مولکولی  $C_{60}$  با اتصال‌های مختلف مولکول-الکتروده و طول پیوندهای مختلف در حضور ولتاژ خارجی نشان می‌دهیم و در پایان یک نتیجه‌گیری مختصر خواهیم کرد.

۲. On - site energy

۳. Pseudo- Wannier state

۱. Coulomb blockade

منفی قسمت موهومی خودانرژی الکترونها است [۸]:

$$\Sigma_{\alpha} = \Lambda_{\alpha} - i\Delta_{\alpha} = \sum_{m_{\alpha}, m'_{\alpha}} t'_{m_{\alpha}} t'^{*}_{m'_{\alpha}} (g_{\alpha})_{m_{\alpha}, m'_{\alpha}}, \quad (7)$$

که در آن  $\alpha = L, R$  و انرژی جفت‌شدگی بین الکتروند چپ (راست) و سیم مولکولی مساوی  $t'$  است. بنابر رابطه (۷) تابع گرین شبکه الکتروند برای محاسبه سهم خودانرژی نیاز است. تابع گرین شبکه الکتروند با استفاده از عملگر گرین در پایه حالت محلی الکتروند نیم‌بینهایت می‌تواند محاسبه شود [۸]:

$$(g_{\alpha})_{n_y, n'_y} = \langle n_y | \left[ (E + i\epsilon^+) I - H \right]^{-1} | n'_y \rangle \\ = \sum_{k_x, k_y} \frac{\chi_{k_x} \Phi_{k_y}(n_y) \chi_{k_x}^* \Phi_{k_y}^*(n'_y)}{E + i\epsilon^+ - E_{k_x, k_y}}, \quad (8)$$

به طوری که  $\chi_{k_x}$  تابع موج در مبدا الکتروند و  $\Phi_{k_y}(n_y)$  شکل عرضی تابع موج است.

برای الکتروند نانولوله کربنی آرمچیر  $(l, l)$ ، تعداد اتم‌های کربن در سطح مشترک  $M = 2l$  است. در تقریب بستگی قوی، انرژی پاشندگی الکترون‌های  $\pi$  مشتمل بر یک نوار پیوندی (-) و یک نوار غیر پیوندی (+) به صورت [۱۱ و ۱۲]:

$$E_{\pm}(k_x^j, j) = \epsilon \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{j\pi}{l}\right) \cos\left(\frac{k_x^j a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_x^j a}{2}\right)}, \quad (9)$$

است، به طوری که انتگرال همپوشانی بین اوربیتال‌های  $\pi$  اتم‌های کربن در الکتروند چپ و راست را با  $t$  نشان دادیم. تکانه طولی به ناحیه بریلوئن  $(-\pi < k_x^j a < \pi)$  محدود شده است و عدد موج عرضی  $1 \leq j \leq 2l$  است. تابع موج عرضی به صورت  $\phi_j(n_y) = \exp(ik_y^j n_y a)$  است و کوانتس تکانه عرضی الکترونها ایجاب می‌کند که  $k_y^j a = \frac{2\pi j}{M}$  باشد [۸].

تابع گرین سطحی شبکه الکتروند می‌تواند به صورت زیر نوشته شود

$$(g_{\alpha})_{n_y, n'_y} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{2l} \phi_j(n_y) \tilde{G}^j(E) \phi_j^*(n'_y), \quad (10)$$

که در آن تابع گرین طولی نیمه نامحدود به صورت زیر است:

$$\tilde{G}^j(E) = \frac{a}{\lambda\pi} \sum_{\beta=\pm} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_x^j \frac{\sin^2(k_x^j a/2)}{E + i\epsilon^+ - E_{\beta}(k_x^j, j)}. \quad (11)$$

فقط توسط سیم مولکولی از طریق  $H_{contacts}$  برهم‌کنش می‌کنند. از این رو، جفت‌شدگی بین اتم‌های لایه انتهایی (سطحی) در الکتروند و اتم‌های در سیم مولکولی توسط هامیلتونی اتصال توصیف می‌شود:

$$H_{contacts} = \sum_{\langle m_L, m_w \rangle} t_{m_L, m_w} \left( c_{m_L}^+ c_{m_w} + h.c. \right) \\ + \sum_{\langle m_R, m_w \rangle} t_{m_R, m_w} \left( c_{m_R}^+ c_{m_w} + h.c. \right), \quad (3)$$

به طوری که  $t_{m_{L(R)}, m_w}$  انرژی جفت‌شدگی بین الکتروند چپ (راست) و سیم مولکولی است که آن را مساوی  $t'$  در نظر می‌گیریم. جمع‌ها در معادله (۳) روی اتم‌های لایه انتهایی سطحی الکتروند چپ (راست) و اتم‌های مربوطه در سیم مولکولی بسته می‌شوند.

ضریب عبوردهی  $T$  با دانستن سطوح انرژی مولکولی، طبیعت و هندسه اتصالات می‌تواند محاسبه شود. این مسئله را می‌توان با بیان کردن ماتریس تابع گرین کل مسئله به صورت زیر مشاهده کرد [۷-۹]:

$$G_w^{-1} = G_{s,w}^{-1} - \Sigma_L - \Sigma_R, \quad (4)$$

به طوری که:

$$G_{s,w}^{-1} = (E + i\epsilon^+) I - H_w.$$

در اینجا ماتریس تابع گرین کل برحسب تابع گرین سیم منفرد (بدون در نظر گرفتن اتصالات) و تصحیح‌های خودانرژی به علت حضور الکتروند‌های چپ ( $\Sigma_L$ ) و راست ( $\Sigma_R$ ) نوشته شده است. در این حالت ضریب عبوردهی الکترون فرودی به صورت [۱۰]

$$T(E) = 4 \text{Tr} \left\{ \Delta_L(E) G_w(E) \Delta_R(E) G_w^+(E) \right\}, \quad (5)$$

است که در آن

$$\Delta_{L(R)}(E) = \frac{i}{2} \left[ \Sigma_{L(R)}(z) - \Sigma_{L(R)}^+(z) \right]_{z=E+i\epsilon^+}. \quad (6)$$

جمله خودانرژی، ویژه مقادیر انرژی سیم مولکولی را تغییر می‌دهد. خودانرژی‌ها، دارای عناصر ماتریسی غیر صفری روی جایگاه‌هایی هستند که به طور مستقیم به الکترونها متصل شدند و بنابراین جایگزیده هستند [۷].  $\Delta_{L(R)}$  طبق رابطه زیر به تابع گرین الکتروند نیم‌بینهایت  $(g_{L(R)})$  مربوط می‌شود و برابر

هنگامی که دو الکترون به مولکول  $C_6$  متصل می‌شوند، تعداد نقاط اتصال مولکول با الکترون به جهت گیری مولکول وابسته خواهد بود. از این رو ممکن است اتصالات منفرد یا اتصال چندگانه رخ دهد [۵ و ۱۳].

در نهایت بعد از محاسبه ضریب عبوردهی الکتریکی با استفاده از رابطه (۵)، جریان الکتریکی با استفاده از رابطه لاندنور-بوتیکر به صورت زیر قابل محاسبه است [۱۴]:

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE T(E) [f_L(E) - f_R(E)], \quad (15)$$

به طوری که عامل ۲ برای اسپین الکترون در نظر گرفته شده است. در اینجا،  $f_{L(R)}$  توابع توزیع فرمی الکترون چپ (راست) با پتانسیل شیمیایی  $\mu_{L(R)} = E_F - (+) eV_a/2$  هستند.

در محاسبات عددی از مقادیر زیر استفاده می‌کنیم: همچنین  $T = 300 K$  و  $E_F = 0 eV$ ،  $t_2 = 1/1 t_1$ ،  $t_1 = 2/5 eV$  و انرژی جفت‌شدگی بین الکترودهای چپ (راست) و اوربیتال‌های  $\pi$  مولکول  $C_6$  مساوی  $t' = 0.5 t_1$  و جفت‌شدگی نزدیک‌ترین همسایگان در الکترودها  $t_L = t_R = t_1$  و تمام انرژی‌های جایگاه  $\varepsilon_L = \varepsilon_R = \varepsilon_w = 0$  در نظر گرفته شده‌اند. نانولوله‌های به کار رفته نیز دو نانولوله دسته‌سندلی (۵ و ۵) در نظر گرفته شده‌اند. در شکل‌های ۲ و ۳، جریان الکتریکی را به صورت تابعی از ولتاژ درگاهی با استفاده از رابطه (۱۵) و برنامه‌نویسی به زبان فرترن محاسبه و نشان می‌دهیم. برای این منظور، ولتاژ خارجی را به ترتیب  $V_a = 0.5 V$  و  $V_a = 0.1 V$  در نظر گرفتیم.

در محاسبات عددی، جفت‌شدگی از طریق یک، پنج و شش اتم کربن از مولکول به الکترودها به عنوان محتمل‌ترین اتصالات در نظر گرفته شده‌اند [۱۵]. ولتاژ درگاه، سطوح مولکولی را نسبت به سطح فرمی الکترودها جابه‌جا می‌کند و از این رو ضرایب عبوردهی ممکن است به طور مهمی تغییر کنند. همچنین، ظهور قله‌های جریان به علت سطوح مولکولی و اثر تداخل تشدیدی است. همچنین، با افزایش تعداد نقاط اتصال بین الکترودها و مولکول، اثرات تداخلی حول این نقاط مهم

انتگرال رابطه (۱۱) می‌تواند به طور تحلیلی و به وسیله گسترش دادن  $k_x^j$  به صفحه مختلط و جمع زدن مسیرهای عرضی حذف شده (موازی با محور موهومی) در طول مستطیل نیمه نامحدود در نیم صفحه  $\text{Im } k_x^j > 0$  و در بازه بین  $-\pi/a$  تا  $\pi/a$  حل شود. برای محاسبه قطب‌های انتگرال، با مساوی صفر قرار دادن مخرج، یک معادله درجه دو به صورت زیر به دست می‌آید:

$$(g_\alpha)_{n_y, n'_y} = \langle n_y | \left[ (E + i0^+) I - H \right]^{-1} | n'_y \rangle \\ = \sum_{k_x, k_y} \frac{\chi_{k_x} \Phi_{k_y}(n_y) \chi_{k_x}^* \Phi_{k_y}^*(n'_y)}{E + i0^+ - E_{k_x, k_y}},$$

به طوری که ریشه‌های این معادله همان قطب‌های انتگرال هستند:

$$\cos\left(\frac{q_\beta^j a}{2}\right) = -\frac{1}{2} \cos\left(\frac{j\pi}{l}\right) - \frac{\beta}{2} \sqrt{\left(\frac{E - \varepsilon}{2t}\right)^2 - \sin^2\left(\frac{j\pi}{l}\right)},$$

که به وضوح به ساختار نواری وابسته هستند، هر چند قطب‌ها به دلیل وجود مقدار موهومی  $i0^+$  نباید روی محور حقیقی باشند. به طوری که  $\beta = \pm 1$  است و مربوط به نوار پیوندی (-) و غیر پیوندی (+) است. با استفاده از روش حساب‌مانده‌ها، انتگرال رابطه (۱۱) به صورت تحلیلی محاسبه می‌شود:

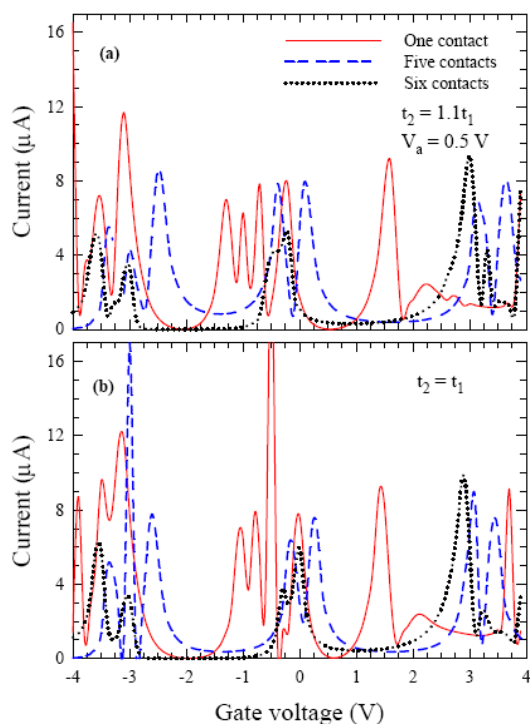
$$\tilde{G}^j(E) = \frac{E - \varepsilon}{2t^2} \left[ \frac{1}{2} + \frac{i \sin(q_\beta^j a/2)}{\sqrt{\left(\frac{E - \varepsilon}{2t}\right)^2 - \sin^2\left(\frac{j\pi}{l}\right)}} \right], \quad (12)$$

به طوری که انتخاب قطب شرکت کننده از طریق پارامتر شاخه‌ای  $\beta = \text{sign}(E - \varepsilon)$  باید درون محاسبه در نظر گرفته شود. بنابراین با استفاده از تابع گرین طولی نیمه نامحدود (رابطه (۱۲)) و قرار دادن آن در تابع گرین سطحی الکترون (رابطه (۱۰)) و با استفاده از رابطه (۷)، در نهایت خودانرژی می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

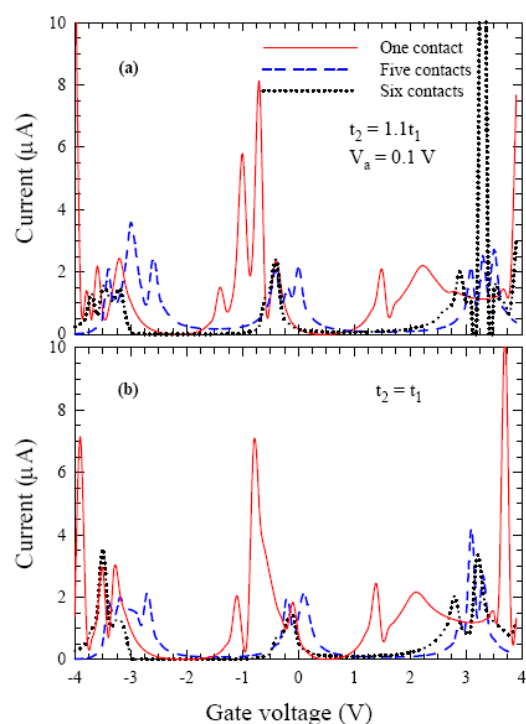
$$\Sigma = \frac{1}{2l} \sum_{j=1}^{2l} \tilde{G}^j(E) \eta_{j/l} [t'], \quad (13)$$

به طوری که:

$$\eta_{j/l} [t'] = \left| \sum_{m=1}^{2l} t'_m \phi_j(m) \right|^2. \quad (14)$$



شکل ۳. جریان الکتريکی برحسب ولتاژ درگاهی به ازای  $V_a = 0.5V$  در اتصالات مختلف در (a)  $t_2 = 1.1t_1$  و (b)  $t_2 = t_1$ .



شکل ۴. جریان الکتريکی برحسب ولتاژ درگاهی به ازای  $V_a = 0.1V$  در اتصالات مختلف در (a)  $t_2 = 1.1t_1$  و (b)  $t_2 = t_1$ .

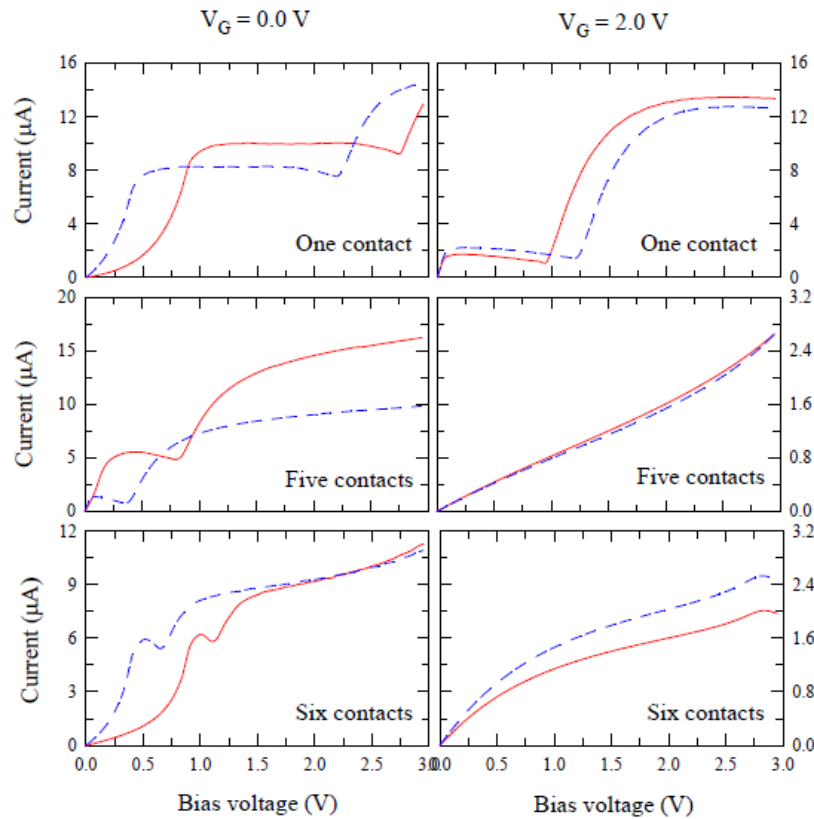
جریان-ولتاژ یک مولکول C<sub>60</sub> منفرد در بين الکترودهای نانولوله کربنی نشان می‌دهد. کاهش در جریان به علت جایگزیدگی حالت‌ها در دهانه‌های لوله‌ها با اعمال بایاس به وجود می‌آید. جایگزیدگی باعث کاهش در همپوشانی چگالی حالت‌های محلی الکترودها و سیم کوانتومی و در نتیجه کاهش در ضریب عبوردهی و جریان می‌شود [۱۶ و ۱۷ و ۱۸]. در اینجا به علت الکترودهای از جنس نانولوله کربنی، رفتار شبه پله‌ای جریان از بین می‌رود [۱۹].

همان‌طور که در شکل ۴ دیده می‌شود، در  $V_G = 0.7V$  و در هر سه نوع اتصال، پدیده NDR دیده می‌شود. این هنگامی روی می‌دهد که رسانش توسط حذف یک کانال رسانشی وارد شونده در ناحیه انتگرال‌گیری در رابطه لاندنور کاهش می‌یابد [۲۰]. در هر سه نوع اتصال، ولتاژ آستانه NDR در حالت  $t_2 = t_1$  کمتر از حالت  $t_2 = 1.1t_1$  است. هنگامی که ولتاژ بایاس بیشتر افزایش می‌یابد، این کاهش جریان کماکان باقی می‌ماند تا زمانی که جابه‌جایی سطح فرمی یک الکترودها باعث شود که کانال‌های دیگر برای رسانش شرکت کنند، بنابراین جریان دوباره شروع به افزایش می‌کند.

می‌شوند، بعضی از تشدیدها ممکن است کاملاً ناپدید شوند و جریان تغییر می‌کند. در واقع علت اختلاف بین جریان‌ها در اتصالات منفرد و چندگانه همین امر است.

همان‌طور که از شکل‌ها دیده می‌شود به ازای بعضی از ولتاژهای درگاهی، مقدار جریان صفر می‌شود. دلیل این امر عدم وجود تراز تشدیدی درون ناحیه انتگرال‌گیری انرژی در این ولتاژها است. به عبارت دیگر، انرژی فرمی الکترودها در داخل گاف HOMO-LUMO مولکول منفرد قرار می‌گیرد. نتایج نشان می‌دهند که رسانش الکترون می‌تواند قویاً وابسته به ولتاژ درگاهی باشد. به ازای مفادیری از ولتاژ درگاهی که جریان صفر می‌شود، مولکول مانند یک نیم‌رسانا و برای مقادیر دیگر آن مانند یک فلز رفتار می‌کند.

برای اینکه درک عمیق‌تری از ترابرد الکترونی به دست آوریم، در شکل ۴ مشخصه جریان-ولتاژ را با استفاده از رابطه (۱۵) به ازای  $V_G = 0.7V$  و  $V_G = 2.7V$  نشان می‌دهیم. شکل ۴ پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR) را در منحنی‌های



شکل ۴. مشخصه جریان-ولتاژ برای اتصالات مختلف در  $V_G = 0.0V$  (سمت چپ) و  $V_G = 2.0V$  (سمت راست) در دو حالت  $t_p = 1/1t_1$  (منحنی توپر) و  $t_p = t_1$  (منحنی خطچین) [۲۱].

در ادامه اهمیت ولتاژ درگاهی را در شارش جریان، روی منحنی جریان-ولتاژ بررسی می‌کنیم. برای  $V_G = 2.0V$  و در موارد اتصال تک‌تایی و شش‌تایی، جابه‌جایی در ضریب عبوردهی به اندازه کافی برای شرکت دادن کانال‌های رسانشی در انتگرال‌گیری جریان قابل توجه نیست. در نتیجه، جریان بعد از یک ولتاژ آستانه کاهش می‌یابد [۲۲]. در این‌جا نیز، ولتاژ آستانه NDR در حالت  $t_p = t_1$  کمتر از حالت  $t_p = 1/1t_1$  است. همچنین با اعمال گیت در اتصال پنج‌تایی، جابه‌جایی در ضریب عبوردهی برای شرکت دادن کانال‌های رسانشی در انتگرال‌گیری جریان، قابل توجه است. بنابراین همان‌طور که از شکل دیده می‌شود، در مورد پنج اتصال در مقایسه با حالت متناظر در  $V_G = 0.0V$  و در محدوده ولتاژ بایاس مورد نظر، پدیده NDR مشاهده نمی‌شود و احتمالاً در ولتاژهای بایاس بالاتر روی می‌دهد.

در هر دو حالت  $V_G = 0.0V$  و  $V_G = 2.0V$  عامل اصلی در اختلاف بین اتصالات منفرد و چندگانه آثار تداخلی است. وقتی مولکول از طریق یک اتم کربن با الکترودها در تماس قرار می‌گیرد، عبور الکترون از مولکول به اثرات تونل‌زنی تشدید می‌گردد. با افزایش تعداد نقاط اتصال، اثرات تداخلی حول این نقاط مهم می‌شوند و بعضی از قله‌های تشدید ممکن است کاملاً ناپدید شوند و بنابراین جریان تغییر خواهد کرد. مفهوم فیزیکی اثرات تداخلی این است که امواج الکترونی که از نقاط اتصال مختلف وارد مولکول می‌شوند، ممکن است یک جابه‌جایی فاز را تجربه کنند. از این رو، ممکن است یک تداخل سازنده یا ویرانگر در فرآیند انتشار الکترون از طریق مولکول رخ دهد.

همان‌طور که از شکل دیده می‌شود، وقتی تعداد اتم‌های کربنی که در جفت‌شدگی بین مولکول و الکترودها شرکت می‌کنند افزایش یابد، مشخصه جریان-ولتاژ، در ولتاژهای پایین رفتار اهمی از خود نشان می‌دهد. چنین رفتاری قابل انتظار

وجود دارند که به ازای آنها جریان صفر می‌شود (یعنی در این ولتاژها بار الکتریکی فیلتر می‌شود). بنابراین از آنچه در این بررسی به دست آمد می‌توان نتیجه گرفت که این وسیله در کاربردهای الکترونیکی می‌تواند به عنوان وسیله کلیدزنی جریان در مقیاس نانو<sup>۱</sup> عمل کند. همان طور که نتایج نشان دادند به ازای درگاه‌هایی که جریان صفر می‌شود، مولکول مانند یک نیم‌رسانا و به ازای درگاه‌های دیگر مانند یک فلز رفتار می‌کند. این نشان داده شده است که مشخصه جریان-ولتاژ در اتصالات تک‌تایی و چندتایی، به علت اثرات تداخلی کاملاً متفاوت هستند. همچنین پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی را در منحنی‌های جریان-ولتاژ نانو ساختار مورد نظر مشاهده کردیم که به علت کاهش یافتن همپوشانی چگالی حالت‌های محلی الکترونها و سیم کوانتومی روی می‌دهد. بنابراین نتایج به دست آمده می‌تواند به طراحی ادوات الکترونیکی مبتنی بر مولکول C<sub>60</sub> کمک کند.

است، زیرا در این وضعیت هیبریدشدگی با الکترونها قوی‌تر است و مسیرهای بیشتری برای الکترون‌ها جهت شارش از الکتروند به مولکول وجود دارد.

در این مقاله، ساختار دو الکتروند نیم‌بینهایت نانولوله کربنی دسته‌سندلی (۵و۵) جدا شده با مولکول C<sub>60</sub> را در نظر گرفتیم. به کمک روش تابع گرین، ضرایب عبوردهی الکترون فرودی را محاسبه کرده، سپس جریان الکتریکی را با استفاده از رابطه لاندنور-بوتیکر به دست آوردیم و با محاسبات عددی، اثرات اتصال‌های مختلف، طول پیوندهای مختلف، ولتاژ درگاهی و ولتاژ بایاس را روی جریان الکتریکی در ساختار مورد نظر بررسی کردیم. نتایج نشان می‌دهند که عوامل مذکور می‌توانند رسانش الکترون را در وسایل مولکولی مبتنی بر مولکول C<sub>60</sub> تغییر دهند. با توجه به شکل‌های ۲ و ۳، هم در ولتاژهای درگاهی مثبت و هم در ولتاژهای درگاهی منفی، ولتاژهایی

- Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **46** (1992) 1804.
13. R Gutierrez, G Fagas, G Cuniberti, F Grossmann, R Schmidt, and K Richter, *Phys. Rev. B* **65** (2002) 113410.
  14. M Buttiker, Y Imry, R Landauer, and S Pinhas, *Phys. Rev. B* **31** (1985) 6207; M Buttiker, *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 1761.
  15. A Saffarzadeh, *J. Appl. Phys.* **103** (2008) 083705.
  16. A A Shokri, M Mardaani, and K Esfarjani, *Physica E* **27** (2005) 325.
  17. A A Shokri, and M Mardaani, *Solid State Commun.* **137** (2006) 53.
  18. H Cheraghchi, and K Esfarjani, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 085123.
  19. C K Wang, and Y Lou, *J. Chem. Phys.* **119** (2003) 4923.
  20. A A Farajian, K Esfarjani, and Y Kawazoe, *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 5084.
  21. A A Shokri, and Sh. Nikzad, *J. Appl. Phys.* **110** (2011) 024303.
  22. H Cheraghchi, and H Esmailzade, *Nanotechnology* **21** (2010) 205306.

1. C Joachim, J K Gimzewski, and A Aviram, *Nature* **408** (2000) 541.
2. M A Reed, C Zhou, C J Muller, T P Burgin, and J M Tour, *Science* **278** (1997) 252.
3. C Kergueris, J P Bourgoin, D Esteve, C Urbina, M Magoga, and C Joachim, *Phys. Rev. B* **59** (1999) 12505.
4. S Nakanishi, and M Tsukada, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001) 126801.
5. Y L Lin, and F Nori, *Phys. Rev. B* **53** (1996) 3.
6. R Satio, G Dresselhaus, and M S Dresselhaus, "Physical Properties of Carbon nanotubes", World Scientific Publishing, London (1998).
7. A A Shokri, and M Mardaani, *Chem. Phys.* **330** (2006) 287.
8. G Cuniberti, G Fagas, and K Richter, *Chem. Phys.* **281** (2003) 465.
9. S Datta, "Electronic transport in mesoscopic systems", Cambridge University Press (1997).
10. D S Fisher, and P A Lee, *Phys. Rev. B* **23** (1981) 6851.
11. P R Wallace, *Phys. Rev.* **71** (1947) 622.
12. R Saito, M Fujita, G Dresselhaus, and M S

۱. Nanoscale current switch