

# طراحی ادوات الکترونیکی مبتنی بر اتصالات نامتجانس نانولوله‌های

## کربنی با لایه‌های حلقوی Zn

علی‌اصغر شکری<sup>۱</sup>، الهه یزدی<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup> گروه فیزیک، دانشگاه پیام‌نور، ص.پ ۳۶۹۷-۱۹۳۹۵، تهران، ایران

**چکیده:** در سال‌های اخیر، به دلیل ویژگی‌های ترابرد الکترونی نانوساختارهای مبتنی بر نانولوله کربنی، توجه زیادی را جهت طراحی ادوات الکترونیکی در حوزه نانو به خود جلب کرده است. نانولوله‌های کربنی در سه نوع زیگزاگ، دسته‌صندلی و کایرال (نامتقارن) وجود دارند. از آنجایی که نوع دسته‌صندلی رسانا هستند از ترکیب آن با یک فلز مانند فلز روی می‌توان وسایل متنوعی بدست آورد که کاربردهای متمایزی دارند. از این جهت ما اتصالات مختلف لایه‌های حلقوی روی با تعداد اتم‌های ۱۰، ۲۰ و ۳۰ به ترتیب در سیستم‌های  $A-Zn_{10}-A$ ،  $A-Zn_{20}-A$  و  $A-Zn_{30}-A$  که در آن (A:armchair) را برمی‌گزینیم. محاسبات ما مبتنی بر تابع گرین غیرتعدالی با تقریب تنگ‌بست در نزدیک‌ترین همسایگی در چارچوب نظریه لاندائور می‌باشد. نتایج عددی ما پیشگویی می‌کند که قادریم وسایلی با عملکرد مختلف مانند رسانای سیم‌گونه کوانتومی، مقاومت دیفرانسیلی منفی و متغیرساز و همچنین یکسوکندنگی طراحی کنیم. این نتایج ممکن است در طراحی ادوات الکترونیک در مقیاس نانومتری مفید باشد.

**واژه‌های کلیدی:** ترابرد الکترونیک، نانولوله کربنی، لایه‌های حلقوی روی، تابع گرین غیرتعدالی، تقریب تنگ‌بست

PACS No.: 68, 73, 81

### ۱. مقدمه

کربن یکی از عناصر شگفت‌انگیز طبیعت در گروه ششم جدول تناوبی قرار دارد و از دیر باز برای انسان به صورت دوده و ذغال چوب شناخته شده بود. این عنصر ترکیب اصلی موجودات زنده را در بر گرفته و کاربردهای متعددی در زندگی بشر ایجاد کرده است. این عنصر گونه‌های متفاوت دیگری از کربن نیز وجود دارند که تفاوت این گونه‌ها صرفاً به شکل‌گیری اتم‌های کربن نسبت به هم یا به ساختار شبکه‌ای آنها برمی‌گردد. تا سال ۱۹۸۰ تنها سه آلوتروپ کربن به نام‌های الماس، گرافیت و کربن بی‌شکل شناخته شده بودند [۱]. اما امروزه می‌دانیم که خانواده کاملی از سایر اشکال کربن نیز وجود دارد. در سال ۱۹۹۱ دانشمندی به نام سومیو ایچیمیا به طور کاملاً اتفاقی در آزمایشگاه، ساختار دیگری از کربن را کشف و تولید کرد که خواص منحصر به فردی دارد [۲]. وی در ابتدا این ساختار را نوعی فولرین تصور نمود که در یک جهت کشیده شده است، اما بعدها متوجه شد که این ساختار خواص متفاوتی از فولرین‌ها دارد و به همین دلیل آن را نانولوله کربنی نامید. اولین نانولوله‌های کشف شده از چندین پوسته استوانه‌ای هم مرکز که به طور منظم قرار گرفته ساخته شدند. این لوله‌های چند دیواره در ابتدا از ترکیب حلقه‌هایی با قطر چند نانومتر به ترتیب برای پوسته‌های داخلی و خارجی به وجود آمدند که از نظر طول تا چند میکرون گسترش می‌یابند [۳].

در یک نانولوله کربنی، اتم‌های کربن در ساختاری استوانه‌ای آرایش یافته‌اند. یعنی یک لوله توخالی که جنس دیواره-اش از اتم‌های کربن است. آرایش اتم‌های کربن در دیواره این ساختار استوانه‌ای، دقیقاً مشابه آرایش کربن در صفحات گرافیت است. در گرافیت، شش ضلعی‌های منظم کربنی در کنار یکدیگر صفحات گرافیت را می‌سازند. صفحات کربنی روی یکدیگر انباشته می‌شوند و هر لایه از طریق پیوندهای ضعیف واندرواس به لایه زیرین متصل می‌شود. به همین دلیل است که گرافیت سخت نیست، روغنی است و از آن می‌توان به عنوان یک روان‌کننده استفاده کرد. وقتی که ورقه‌های گرافیتی در هم پیچیده می‌شوند، تشکیل نانولوله‌های کربنی را می‌دهند. بعد از کشف نانولوله‌های کربنی تحقیقات وسیع نظری و تجربی به واسطه کاربردی بودنشان در صنایع و قطعات الکترونیکی صورت گرفته است. علت آن به خاطر خصوصیات جالب الکترونیکی، مکانیکی و گرمایی آن می‌باشد [۴-۷].

در این مقاله، هدف ما بررسی خواص ترابرد الکتریکی مانند ضریب عبوردهی الکترون، چگالی حالات، مشخصه جریان - ولتاژ و اثر اعمال ولتاژهای خارجی مختلف بر روی جریان الکتریکی است که از لایه‌های روی (Zn) متصل به دو الکتروند نیم‌بی‌نهایت فلزی (نوع صندلی) عبور می‌کند. در اینجا، چگالی حالت به واسطه اینکه بسیاری از کمیات فیزیکی نظیر ظرفیت گرمایی و رسانندگی الکتریکی از آن تاثیر می‌پذیرند مهم می‌باشد. نانولوله‌های کربنی در سه نوع زیگزاک، دسته صندلی و کایرال (نامتقارن) وجود دارند. از آنجایی که نوع دسته صندلی رسانا هستند از ترکیب آن با یک فلز مانند فلز روی می‌توان وسایل متنوعی بدست آورد که کاربردهای متمایزی دارند. از این جهت ما اتصالات مختلف لایه‌های حلقوی روی با تعداد اتم‌های ۱۰، ۲۰ و ۳۰ به ترتیب در سیستم‌های  $A-Zn_1-A$ ،  $A-Zn_2-A$  و  $A-Zn_3-A$  که در آن  $A$ : (armchair) را برمی‌گزینیم. با افزودن لایه‌های روی بین نانولوله صندلی ما قادریم که وسایلی در مقیاس نانو با ویژگی‌های مختلف طراحی کنیم. برای نمونه سه مورد فوق به ترتیب می‌توانند به عنوان سیم کوانتومی رسانا، مقاومت دیفرانسیلی منفی و یکسوکننده در ادوات الکترونیکی به کار روند [۸-۱۱]. با وجودی که راه‌های مختلف زیادی مانند استفاده پیوندهای آلی برای اتصال نانولوله‌های کربنی به یکدیگر وجود دارد، اما مطالعات نشان می‌دهد که استفاده از فلزات انتقالی برای گسترش وسایل در مقیاس نانو ممکن‌تر است [۹]. از این رو، انتظار می‌رود نتایج استخراج شده در ادوات موردنظر متفاوت‌تر از رفتار با پیوندهایی که تماماً از جنس مواد آلی هستند باشند.

ترتیب‌بندی مقاله به این صورت است: ابتدا یک سیستم مزوسکوپیک مانند سیم‌های کوانتومی متصل به دو الکتروند نیم‌بی‌نهایت ایده‌ال در نظر می‌گیریم سپس روابط مربوط به خواص ترابرد الکتریکی را به طوری که در آن عبوردهی الکترون را با استفاده از روش بازگشتی سان-چو با اعمال شرایط مرزی مربوطه استخراج می‌کنیم. جریان الکتریکی و رسانش الکتریکی سیستم مورد نظر از لاندائور-بوتیکر تعیین می‌شود. در ادامه، نتایج محاسبات عددی خواص مورد نظر در ساختارهای نامتجانس مذکور بیان و توصیف می‌شود. در پایان یک نتیجه‌گیری مختصر خواهیم کرد.

## ۲. فرمول‌بندی مساله

در این بخش ما روش مفیدی را برای محاسبات واقعی ویژگی‌های عبوردهی الکتریکی در سیستم‌های گسترده ارائه می‌دهیم. این تعمیم روش حاضر را فوق‌العاده انعطاف‌پذیر و کاربردی می‌سازد. این فرمول به ما اجازه می‌دهد تا ساختار میکروسکوپی کاملی از الکترودهای نیم‌بی‌نهایت (به شکل الکتروند-رسانا-الکتروند) در نظر بگیریم، در حالی که تنها کمیت‌هایی که به فرمول وارد می‌شوند، اجزای ماتریس عملگر هامیلتونی است.



شکل ۱: نانو ساختار متشکل از یک رسانای محدود (C) که دو الکتروند چپ و راست را از هم جدا کرده است.

اکنون روابط بین رسانش و تابع گرین معرفی می‌شود. برای این کار سیستم ترکیبی از یک رسانای کربنی که به دو الکتروند نیم‌بی‌نهایت چپ و راست متصل است در نظر می‌گیریم، (شکل ۱، ترابرد الکتریکی در سیستم‌های گسترده). نتیجه اساسی در نظریه ترابرد الکتریکی، رسانش از محل برهمکنش الکترون‌ها (منطقه C در شکل ۱) که با ویژگی‌های پراکندگی منطقه طبق فرمول در ارتباط است [۱۲].

$$C = \frac{2e^2}{h} T \quad (۱)$$

که در آن T تابع احتمال عبوردهی الکترون و C رسانش الکتریکی است که احتمال انتقال یک الکترون از یک طرف رسانا به انتهای دیگر را بیان می‌کند. طبق نظریه لاندائور، T می‌تواند بر حسب تابع گرین ناحیه میانی در حضور الکترونها به صورت زیر بیان شود:

$$T = Tr(\Gamma_L G_C^r \Gamma_R G_C^a) \quad (۲)$$

$G_C^{(r,a)}$ ، توابع گرین پیشرو و پسرو در رسانا است و  $\Gamma_{\{L,R\}}$  توابع اتصال رسانا به الکتروند را بیان می‌کند. برای محاسبه تابع گرین رسانا از معادله تابع گرین کل سیستم شروع می‌کنیم:

$$(\varepsilon - H)G = I \quad (۳)$$

در اینجا،  $\varepsilon = E + i\eta$  و  $\eta$  عددی فوق‌العاده کوچک هستند و I ماتریس واحد می‌باشد. با فرض اینکه هامیلتونی سیستم می‌تواند به صورت ماتریس مجزا در فضای حقیقی بیان شود. تابع گرین (۳) می‌تواند به زیر ماتریس‌هایی که متناظر با زیر دستگاه‌های مجزا است، بخش بندی شود.

$$\begin{pmatrix} G_L & G_{LC} & G_{LCR} \\ G_{CL} & G_C & G_{CR} \\ G_{LRC} & G_{RC} & G_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\varepsilon - H_L) & h_{LC} & 0 \\ h_{LC}^+ & (\varepsilon - H_C) & h_{CR} \\ 0 & h_{CR}^+ & (\varepsilon - H_R) \end{pmatrix}^{-1} \quad (۴)$$

ماتریس  $(\varepsilon - H_C)$  بیان‌کننده رسانای ایزوله شده متناهی، ماتریس  $(\varepsilon - H_{\{R,L\}})$  بیان‌کننده الکتروندهای نامتناهی و  $h_{CR}$  و  $h_{LC}$  ماتریس‌های اتصال هستند که فقط برای نقاط مجاور رسانا و الکتروندها به ترتیب غیرصفر هستند. از این معادله می‌توان عبارتی برای  $G_C$  به دست آورد:

$$G_C = (\varepsilon - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R)^{-1} \quad (۵)$$

در رابطه (۵)، عبارت‌های  $\Sigma_L = h_{LC}^+ g_L h_{LC}$  و  $\Sigma_R = h_{RC} g_R h_{RC}^+$  به ترتیب به عنوان خودانرژی ناشی از الکتروندهای نیم‌بی‌نهایت و  $g_{\{L,R\}} = (\varepsilon - H_{\{L,R\}})^{-1}$  تابع گرین الکتروندها هستند. جملات خودانرژی می‌تواند به عنوان هامیلتونی موثری که از اتصال رسانا با الکتروندها رشد می‌یابد، نشان داده شود. اولین تابع گرین که مشخص شود، توابع اتصال  $\Gamma_{\{L,R\}}$  به آسانی به دست می‌آید:

$$\Gamma_{\{L,R\}} = i[\Sigma_{\{L,R\}}^r - \Sigma_{\{L,R\}}^a] \quad (۶)$$

در اینجا،  $\Sigma_{\{L,R\}}^a$  مزدوج هرمیتی  $\Sigma_{\{L,R\}}^r$  است. برای محاسبه تابع گرین الکتروندهای نیم‌بی‌نهایت از روشی که در ادامه ذکر می‌شود استفاده می‌کنیم.

هر سیستم نیم‌بی‌نهایت از لایه‌های اصلی با برهمکنش نزدیک‌ترین همسایه را می‌توان متناظر با زنجیره خطی از لایه‌های اصلی دانست. با این روش اجزای ماتریس معادله (۴) بین اوربیتال‌های لایه‌ای به مجموعه معادله توابع گرین تبدیل می‌شوند:

$$\begin{aligned}(\varepsilon - H_{oo})G_{oo} &= I + H_{o1}G_{o1} \\ (\varepsilon - H_{oo})G_{1o} &= H_{o1}^+G_{oo} + H_{o1}G_{o2}\end{aligned}\quad (7)$$

...

$(\varepsilon - H_{oo})G_{no} = H_{o1}^+G_{n-1,o} + H_{o1}G_{n+1,o}$   
که در آن  $G_{nm}$  و  $H_{nm}$  عناصر ماتریس هامیلتونی و تابع گرین هستند. در یک سیستم حجیم  $H_{oo} = H_{11} = \dots$  و  $H_{o1} = H_{12} = \dots$  و همینطور تا آخر این دنباله لوپز - سانچو را می‌توان در نظر گرفت. این زنجیره می‌تواند به منظور بیان تابع گرین یک لایه مشخص بر حسب تابع گرین بعد از خودش بیان شود. این کار از طریق ماتریس‌های انتقال  $T$  و  $\bar{T}$  انجام می‌شود که

$$G_{oo} = \bar{T}G_{1o} \quad (8)$$

$$G_{1o} = TG_{oo}$$

عناصر ماتریس انتقال به آسانی می‌تواند از عناصر ماتریس هامیلتونی از طریق روش بازگشتی به صورت

$$\begin{aligned}T &= t_o + \tilde{t}_o t_1 + \tilde{t}_o \tilde{t}_1 t_2 + \dots + \tilde{t}_o \tilde{t}_1 \tilde{t}_2 \dots t_n \\ \bar{T} &= \tilde{t}_o + t_o \tilde{t}_1 + t_o t_1 \tilde{t}_2 + \dots + t_o t_1 t_2 \dots \tilde{t}_n\end{aligned}$$

تعیین شود که در آن  $t_i$  و  $\tilde{t}_i$  از طریق فرمول بازگشتی

$$\begin{aligned}t_i &= (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} t_{i-1}^2 \\ \tilde{t}_i &= (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} \tilde{t}_i\end{aligned}\quad (9)$$

محاسبه می‌شوند. در این رابطه  $t_o = (\varepsilon - H_{oo})^{-1} H_{o1}^+$  و  $\tilde{t}_o = (\varepsilon - H_{oo})^{-1} H_{o1}$ . این فرایند تا زمانی که  $t_n, \tilde{t}_n \leq \delta$  (خیلی کوچک) باشد تکرار می‌شود. با این روش، تابع گرین سیستم به صورت

$$G(E) = (\varepsilon - H_{oo} - H_{o1}T - H_{o1}^+\bar{T})^{-1} \quad (10)$$

نوشته می‌شود. اگر این معادله با معادله (۴) مقایسه شود در این صورت عبارت‌های زیر به ست می‌آید:

$$H_{oo} \equiv H_C, H_{o1} \equiv h_{CR}, H_{o1}^+ \equiv h_{LC}^+ \quad (11)$$

به‌ویژه با مقایسه معادله (۵) خودانرژی سیستم الکترون-رسانا به صورت

$$\Sigma_L = H_{o1}^+\bar{T} \quad (12)$$

$$\Sigma_R = H_{o1}T$$

بیان می‌شود. توابع اتصال از عناصر ماتریس انتقال و ماتریس هامیلتونی به دست می‌آید:

$$\Gamma_L = -\text{Im}(H_{o1}^+\bar{T}) \quad (13)$$

$$\Gamma_R = -\text{Im}(H_{o1}T)$$

در سیستم‌های مورد نظر در این مقاله برای محاسبه چگالی حالات، قسمت موهومی  $G$  که در بخش قبل ذکر شد را بر  $\pi$  تقسیم می‌کنیم در این صورت خواهیم داشت [۱۳-۱۵]:

$$N(E) = -(1/\pi) \text{Im}[TrG(E)] \quad (15)$$

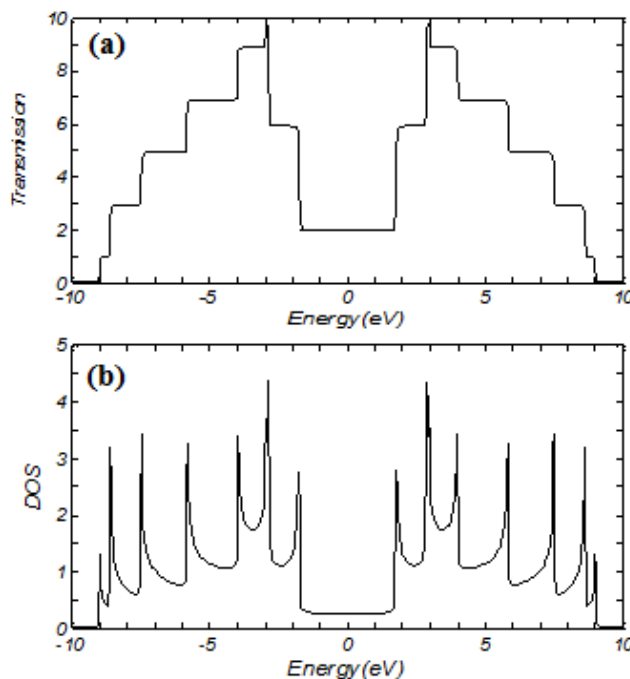
برای بررسی انتقال الکترون در یک سیستم خاص، منحنی جریان-ولتاژ مورد بررسی قرار می‌گیرد. تغییرات جریان بر حسب ولتاژ به عوامل مختلفی مانند نوع الکترودها، وسیله به کار گرفته و تعداد لایه‌های روی و نوع اتصالات بین الکترودها و وسیله بستگی دارد. برای محاسبه تغییرات جریان بر حسب ولتاژ از رابطه

$$I(v) = \frac{2e}{h} \int T(E)(f_L(E) - f_R(E))dE \quad (16)$$

بدست می‌آید که در آن تابع توزیع فرمی-دیراک به صورت  $f_{L(R)} = \left(1 + e^{\beta(E - \mu_{L(R)})}\right)^{-1}$  با  $\beta = 1/k_B T$  داده می‌شود.

### ۳. نتایج محاسبات عددی

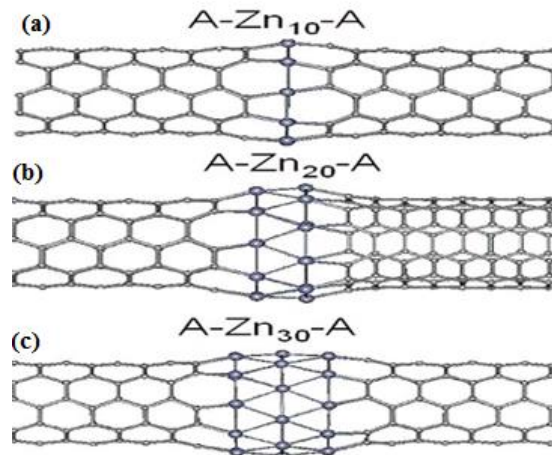
در ابتدا خواص ترابرد الکتریکی یک نانولوله کربنی ایده‌ال (اتصالات متجانس) از نوع دسته‌سندلی (۵، ۵) بررسی می‌شود. در ادامه، این نوع ساختار (اتصالات نامتجانس) به عنوان الکترودهای نیم‌بی‌نهایت در نظر گرفته می‌شود. با صرف نظر از انحنا، سطح نانولوله، انرژی انتقالی الکترون  $\pi$  هر اتم کربن با نزدیک‌ترین همسایه را برابر با  $t = -3 \text{ eV}$  و انرژی جایگاهی هر اتم کربن صفر فرض می‌شوند [۱۶-۱۸]. در اینجا، دما به اندازه کافی پایین در نظر گرفته می‌شوند به طوری که کمترین نوارها یا کانال‌های رسانشی اشغال شده باشند.



شکل ۲: احتمال عبوردهی الکترون و چگالی حالت یک نانولوله دسته‌سندلی (۵، ۵)

در شکل ۲، رفتارهای پله‌گونه ضریب عبوردهی الکترون به کوانتیده بودن ترابرد الکتریکی یا رسانش الکتریکی در ساختار متجانس مورد نظر می‌باشد. تعداد این پله‌ها معادل تعداد کانال‌های رسانشی و یا مدهای رسانشی عرضی در این ساختار است که وابسته به عرض سیم کوانتومی ساخته شده از نانولوله کربنی می‌باشد. در انرژی فرمی (انرژی صفر) رسانش الکتریکی غیرصفر است یعنی وسیله رفتار فلزی دارد. همچنین در هر دو نمودار رفتار متقارن نسبت به انرژی فرمی دیده می‌شود به طوری که با اعمال یک ولتاژ درگاهی، نمودارها کمی جابجا خواهند شد. در شکل پایینی نمودار چگالی حالات

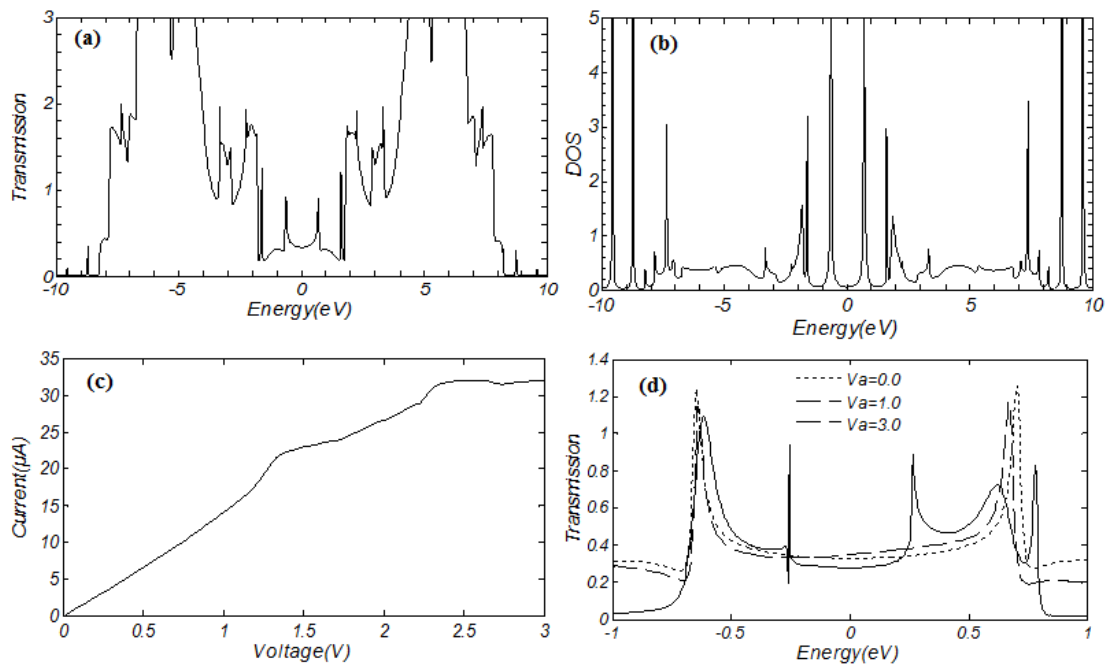
سیستم مورد نظر نشان داده است. از شکل دیده می‌شود که قله‌ها به معنی ویژه انرژی سیستم می‌باشد که رفتار چگالی حالت به تکنیکی‌های وان-هوف برمی‌گردد. تعداد آنها به تعداد مدهای رسانشی سیستم بستگی دارد.



شکل ۳: مدل‌های مختلف اتصالات نامتجانس ساخته شده از دو نانولوله کربنی از نوع دسته‌سندلی (۵،۵) که به وسیله تعداد مختلف لایه‌های روی متصل شده‌اند. هر حلقه روی شامل ۱۰ اتم می‌باشد.

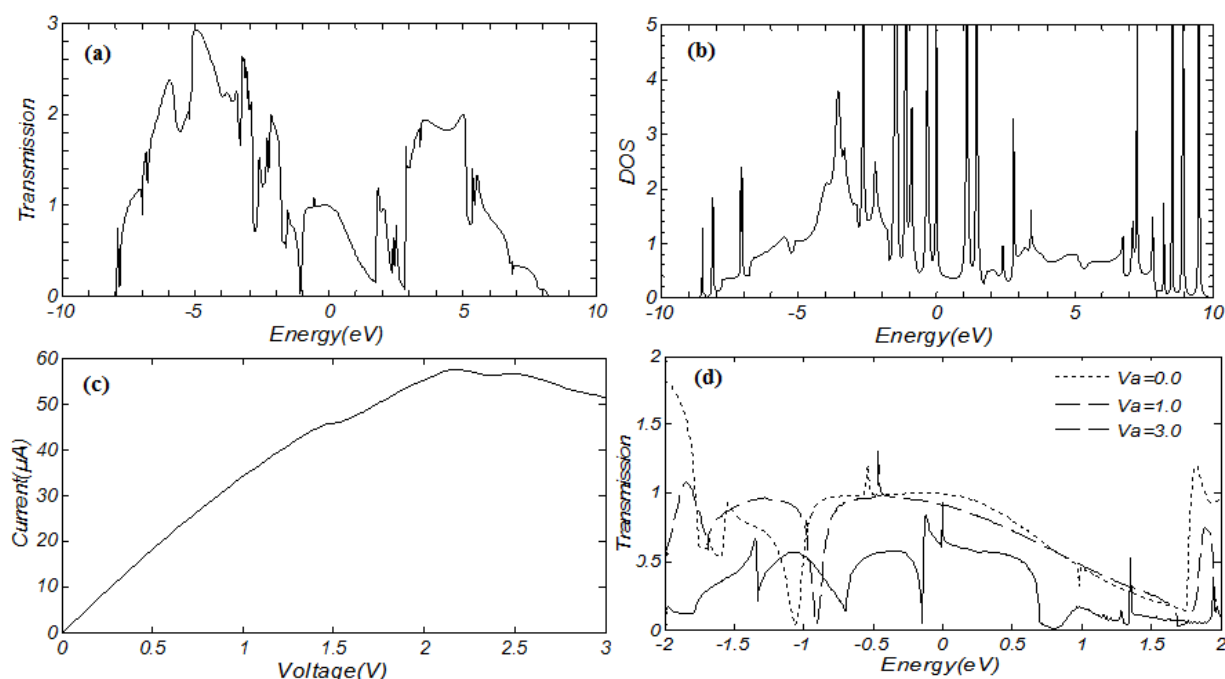
به منظور بررسی لایه‌های حلقوی روی متصل به الکترودهای نانولوله کربنی دسته‌سندلی (۵، ۵) شکل ۳ را که به ترتیب از بالا به پایین شامل ۱۰، ۲۰ و ۳۰ اتم می‌باشد در نظر می‌گیریم. برای این کار در محاسبات انرژی جفت‌شدگی روی-روی و روی-کربن به ترتیب  $t_{Zn-Zn}=1.5t$  و  $t_{Zn-C} = (t_{Zn-Zn} + t_{C-C}) / 2$  فرض می‌شوند.

در شکل (a) و (b)، نمودار ضریب عبوردهی الکترون و چگالی حالت نانو ساختار  $A-Zn_{10}-A$  نشان داده شده است. از این شکل‌ها دیده می‌شود که نمودارها نسبت به انرژی فرمی تقارن دارند. از طرفی دیگر شبه گاف انرژی نیز در نمودار چگالی حالت دیده می‌شود. همچنین برای بررسی بیشتر خواص ترابرد الکتریکی، نمودار منحنی جریان الکتریکی-ولتاژ اعمالی و ضریب عبوردهی در چند ولتاژ اعمالی به ترتیب در شکل‌های (c) و (d) رسم شده است.



شکل ۴: ترابرد الکتریکی (ضریب عبوردهی، چگالی حالت و مشخصه جریان-ولتاژ) در نانو ساختار  $A-Zn_{10}-A$

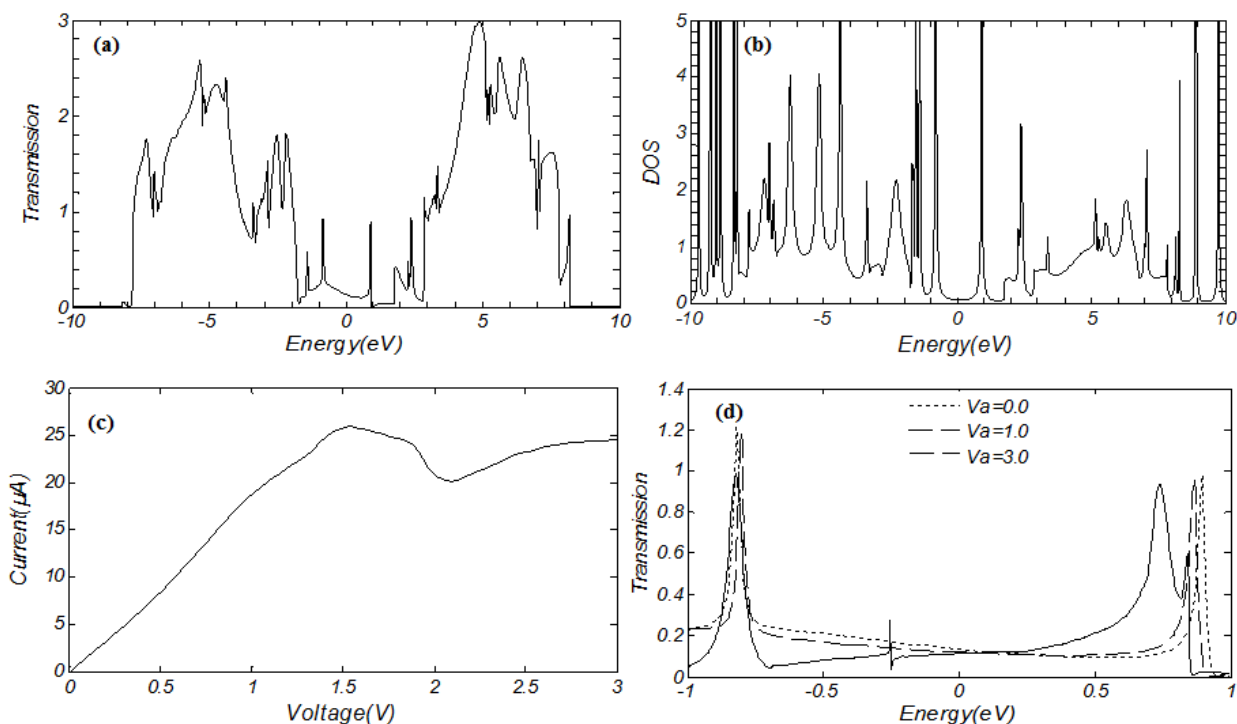
از نمودار جریان الکتریکی برحسب ولتاژ خارجی در ساختار  $A-Zn_{1-x}-A$  دیده می‌شود که جریان در ولتاژهای پایین به صورت خطی رفتار می‌کند یعنی رفتار اهمیک از خود نشان می‌دهد. اما در ولتاژهای بالاتر غیرخطی است و به صورت دیودی رفتار می‌کند. از طرفی دیگر ویژگی مقاومت دیفرانسیلی منفی NDR نیز مشاهده می‌شود یعنی افزایش ولتاژ منجر به کاهش جریان الکتریکی شده است. علت آن به هم‌پوشانی پنجره انرژی مربوط به الکترودها و لایه روی میانی می‌باشد [۱۶]. در نتیجه می‌توان از این وسیله به عنوان سیم کوانتومی استفاده نمود.



شکل ۵: تراپرد الکتریکی (ضریب عبوردهی، چگالی حالت و مشخصه جریان-ولتاژ) در نانوساختار  $A-Zn_{1-x}-A$

در این برنامه نویسی  $N$ ، تعداد کانال‌های رسانش برابر پنج است، بنابراین حداکثر احتمال عبوردهی در نمودارهای عبوردهی الکترون برابر با ۵ می‌شود. زمانی که عدد احتمال عبوردهی الکترون بیشتر باشد بدین معنی است که تعداد کانال-های رسانش بیشتری در انتقال الکترون نقش دارند در نتیجه در آن انرژی، وسیله رساناتر خواهد بود. بنابراین با توجه به مقدار احتمال عبوردهی الکترون می‌توان در مورد رسانا، عایق یا نیمه رسانا بودن وسیله صحبت کرد. با انتخاب مناسب  $\eta$  در روابط بخش قبل می‌توان از تغییرات شدید در نمودارها یا به تعبیری ناهنجاری‌ها جلوگیری کنیم. بر این اساس در برنامه نویسی سعی شده تا بهترین مقدار  $\eta$  در نظر گرفته شود.

در شکل ۵ مشاهده می‌کنیم که با افزایش ولتاژ، پیک عبوردهی الکترون در نزدیکی انرژی فرمی به سمت انرژی‌های کمتر جا به جا می‌شود. اما با افزایش ولتاژ همواره جریان صعودی نیست، از آنجایی که بعد از ۲ ولت (با توجه به منحنی احتمال عبوردهی بر حسب جریان) دامنه پیک‌ها کاهش می‌یابد در حالی که به سمت انرژی کمتر می‌روند، پس جریان کاهش می‌یابد. در نتیجه ویژگی NDR (مقاومت دیفرانسیلی منفی) در  $A-Zn_{1-x}-A$  به خوبی مشهود است [۱۹].



شکل ۶: تراپرد الکتریکی (ضریب عبوردهی، چگالی حالت و مشخصه جریان-ولتاژ) در نانو ساختار  $A-Zn_3-A$

با توجه به منحنی احتمال عبوردهی بر حسب جریان با اعمال ولتاژهای مختلف، منحنی جریان-ولتاژ در شکل ۶ در ساختار  $A-Zn_3-A$  رفتار متغیری (با مقاومتی با ویژگی ولتاژ جریان غیراهمی) نشان می‌دهد. از آنجایی که دامنه و کانال‌های هدایت‌کنندگی برای محدوده وسیعی از ولتاژهای اعمالی (۱ تا ۳ ولت) تقریباً ثابت هستند، افزایش کمی از جریان را در بیش از  $1/5$  ولت مشاهده می‌کنیم. بنابر این می‌توان از این وسیله به عنوان متغیرساز یا یکسوکننده در کاربردهای مختلف بهره برد [۱۰-۱۲].

#### ۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله تراپرد الکتریکی حلقه‌های روی با پهناهای مختلف متصل به نانولوله‌های فلزی با به کارگیری مدل هامیلتونی بستگی قوی و تقریب نزدیک‌ترین همسایه بررسی شده است. کمیت‌های مختلفی نظیر احتمال عبوردهی الکترون، چگالی حالات و منحنی جریان-ولتاژ به دست آمده است. نتایج عددی محاسباتمان نشان می‌دهد که نانولوله‌های کربنی نوع صندلی، در حالت خالص در انرژی فرمی دارای گاف صفر و چگالی حالات الکترونی غیرصفر و رسانندگی الکترونی برابر با ۲ دارند که نشان‌دهنده فلزی بودن این نوع نانولوله است. افزایش احتمال عبوردهی الکترون نشان‌دهنده افزایش کانال‌های رسانش و رسانایی سیستم می‌باشد. با مشاهده منحنی جریان-ولتاژ در ساختار  $A-Zn_3-A$  دیده می‌شود که با افزایش ولتاژ، جریان نیز همواره روند صعودی دارد و می‌تواند به عنوان سیم کوانتومی با مقاومت اهمی بکار گرفته شود. از طرفی دیگر، از منحنی جریان-ولتاژ در ساختار  $A-Zn_2-A$  دیده می‌شود که بعد از افزایش ولتاژ در  $2/5$  ولت کاهش جریان وجود دارد که معرف مقاومت منفی NDR است. این نوع ساختارها خاصیت یکسوکنندگی را نشان می‌دهد.



- [1] J C Charlier, X Blasé and S Roche, "*Electronic and Transport Properties of Nanotubes*", (2007) vol. 79
- [2] S Iijima, *Nature* **354** (1991) 56.
- [3] P Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots*, (New York, 2000).
- [4] S Datta, *Quantum Transport Atom to Transistor*, (Cambridge University Press, 2005).
- [5] L Dai, *Pure Appl. Chem.* **74** (2002) 1753.
- [6] M S Ferreira, T G Dargam, R B Muniz and A latge, *Phys. Rev. B* **62**(2000) 16040.
- [7] N N Greenwood and A Earnshaw, *Chemistry of the Elements*, (Butterworth-Heinemann, 1997).
- [8] A D Christopher and J M Tour, *Phys. Chem. A*, **108** (2004) 11151.
- [9] A Jorio, G Dresselhaus, M S Dresselhaus, *Carbon Nanotubes, Advanced Topics in the Synthesis, Structure, Properties and Applications*, (2008).
- [10] M Khazaei, S U Lee, F Pichierri and Y Kavazaoe, *ACS Nano* **2** (2008) 939.
- [11] M Khazaei and S U Lee, F Pichierri and Y Kavazaoe, *J. Phys. Chem. C* **111** (2007) 12175
- [12] S U Lee, M Khasaei, F Pichierri and Y Kavazaoe, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **10** (2008) 5225.
- [13] T C Li and S-P Lu, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 085408 .
- [14] M B Nardelli, *Phys. Rev. B* **60** (1999) 7828.
- [15] S Reich, C Thomsen, J Maultzsch, *Carbon Nanotubes*, (Wiley–VCH, Weinheim, 2004).
- [16] R Saito, M Fujita, G Dresselhaus and M S Dresselhaus, **46** (1992) 1804.
- [17] R Saito, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*" (Imperial College Press, 1998).
- [18] A A Shokri and Z. Karimi, *Iranian Journal of Physic Research* **13** (2013) 69.
- [19] A A Shokri, M Mardaani and K Esfarjani, *Physica E* **27** (2005) 325.

# Design of electronic devices based on carbon nanotubes heterojunction contacts to Zn ring layers

Aliasghar Shokri<sup>1</sup>, Elahe Yazdi<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Physics, Tehran Payame-Noor University (PNU), 19395-4697., Tehran, Iran*

## Abstract:

In recent years, due to electron transport properties of nanostructures based on carbon nanotubes, a lot of attention to design electronic devices in the field of nanotechnology has attracted. There are three types of carbon nanotubes in zigzag, armchair and chiral (asymmetrical) forms. Since the types of armchair are electrically conductive, by a combination with a metal such as zinc can be achieved by various means distinct applications. In this respect, we select different layers of circular connectors on the number of atoms of 10, 20 and 30, respectively, in the systems A-Zn10-A, A-Zn20-A and A-Zn30-A, where (A: armchair). Our calculations are based on the Green's function method within tight-binding approximation in the nearest neighbors in the framework of Landauer. The results are able to predict that devices with different functions such as quantum conductor wire, negative differential resistance and rectifier design. The results may be useful in the design of electronic devices at the nanometer scale.

**Keywords:** Electrical transport, Tight-binding, Green's function, Carbon nanotube, Zn ring layers.