

## طراحی ادوات الکترونیکی مبتنی بر اتصالات نامتجانس نانولوله‌های

### کربنی با لایه‌های حلقوی Zn

علی اصغر شکری و الهه یزدی

گروه فیزیک، دانشگاه پیام‌نور، تهران

پست الکترونیکی: aashokri@pnu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۵/۰۴/۲۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۵/۱۰/۲۰)

#### 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، دسته صندلی و کاپرال (نامتقارن) وجود دارند. از آنجایی که نوع دسته صندلی رسانا هستند از ترکیب آن با یک فلز مانند فلز روی می‌توان وسایل متنوعی به دست آورد که کاربردهای متمایزی دارند. از این جهت ما اتصالات مختلف لایه‌های حلقوی روی با تعداد اتم‌های ۱۰، ۲۰ و ۳۰ به ترتیب در دستگاه‌های  $A-Zn_{10}-A$ ،  $A-Zn_{20}-A$  و  $A-Zn_{30}-A$  که در آن دسته صندلی 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 یک سوکنندگی طراحی کنیم. این نتایج ممکن است در طراحی ادوات الکترونیکی در مقیاس نانومتری مفید باشد.

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

#### ۱. مقدمه

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

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.

لایه‌های حلقوی روی با تعداد اتم‌های  $10^1$ ،  $10^2$  و  $10^3$  به ترتیب در دستگانه‌های  $A-Zn_{10}-A$ ،  $A-Zn_{100}-A$  و  $A-Zn_{1000}-A$  که در آن  $A$ : دسته صندلی، 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 یک سوکننده 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 مورد نظر متفاوت‌تر از رفتار با پیوندهایی که تماماً از جنس مواد آلی هستند باشند.

ترتیب‌بندی مقاله به این صورت است: ابتدا یک دستگانه مزوسکوپیکی مانند سیم‌های کوانتومی متصل به دو الکتروود نیم‌بی‌نهایت ایده‌آل 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 دستگانه 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 مسئله

در این بخش ما روش مفیدی را برای محاسبات واقعی ویژگی‌های عبوردهی الکتریکی در دستگانه‌های 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 الکتروود-رسانا-الکتروود) در نظر بگیریم، در حالی که تنها کمیت‌هایی که به فرمول وارد می‌شوند، اجزای ماتریس عملگر هامیلتونی است.

فولرین‌ها دارد و به همین دلیل آن را نانولوله کربنی نامید. اولین نانولوله‌های کشف شده از چندین پوسته استوانه‌ای هم‌مرکز 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 دیواره‌اش 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 روان کننده 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 است [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 الکتروود نیم‌بی‌نهایت فلزی (نوع صندلی) عبور می‌کند. در اینجا، چگالی حالت به واسطه این که بسیاری از کمیات فیزیکی نظیر ظرفیت گرمایی و رسانندگی الکتریکی از آن تأثیر می‌پذیرند، مهم است. نانولوله‌های کربنی در سه نوع زیگزاک، دسته صندلی و پیچشی<sup>۱</sup> (نامتقارن) وجود دارند. از آنجایی که نوع دسته صندلی رسانا هستند از ترکیب آن با یک فلز مانند فلز روی می‌توان وسایل متنوعی به دست آورد که کاربردهای متمایزی دارند. از این جهت ما اتصالات مختلف



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

و الکترونها به ترتیب غیرصفر هستند. از این معادله می‌توان عبارتی برای  $G_C$  به دست آورد:

$$G_C = (\varepsilon - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R)^{-1} \quad (5)$$

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

$$\Gamma_{\{L,R\}} = i \left[ \Sigma_{\{L,R\}}^r - \Sigma_{\{L,R\}}^a \right], \quad (6)$$

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

هر دستگاه نیم بی‌نهایت 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 معادلات توابع گرین تبدیل می‌شوند:

$$\begin{aligned} (\varepsilon - H_{00})G_{00} &= I + H_{01}G_{01}, \\ (\varepsilon - H_{00})G_{01} &= H_{01}^+G_{00} + H_{01}G_{02}, \\ &\dots \\ (\varepsilon - H_{00})G_{n0} &= H_{01}^+G_{n-1,0} + H_{01}G_{n+1,0}, \end{aligned} \quad (7)$$

که در آن  $H_{nm}$  و  $G_{nm}$  عناصر ماتریس هامیلتونی و تابع گرین هستند. در یک دستگاه حجیم  $H_{00} = H_{11} = \dots$  و  $H_{01} = H_{12} = \dots$  همین طور تا آخر این دنباله لویز-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

$$G_{00} = \bar{T}G_{00}, \quad (8)$$

$$G_{00} = TG_{00}.$$

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

اکنون روابط بین رسانش و تابع گرین معرفی می‌شود. برای این کار دستگاه ترکیبی از یک رسانای کربنی که به دو الکترون نیم بی‌نهایت چپ و راست متصل است در نظر می‌گیریم، (شکل ۱، ترابرد الکترونیکی در دستگاه‌های گسترده). نتیجه اساسی در نظریه ترابرد الکترونیکی، رسانش از محل برهم‌کنش الکترون‌ها (منطقه C در شکل ۱) که با ویژگی‌های پراکندگی منطقه طبق رابطه در ارتباط است [۱۲].

$$C = \frac{\gamma e^2}{h} T, \quad (1)$$

که در آن  $T$  تابع احتمال عبوردهی الکترون و  $C$  رسانش الکترونیکی 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:

$$T = \text{Tr}(\Gamma_L G_C^r \Gamma_R G_C^a) \quad (2)$$

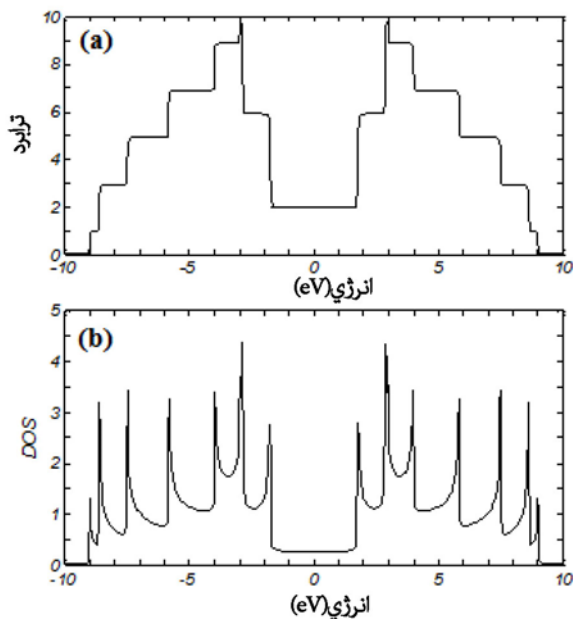
توابع گرین پیشرو و پسرو در رسانا است و  $G_C^{(r,a)}$  توابع اتصال رسانا به الکترون را بیان می‌کند. برای محاسبه تابع گرین رسانا از معادله تابع گرین کل دستگاه شروع می‌کنیم:

$$(\varepsilon - H)G = I, \quad (3)$$

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

$$\begin{pmatrix} G_L & G_{LC} & G_{LCR} \\ G_{CL} & G_C & G_{CR} \\ G_{LRC} & G_{RC} & G_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\varepsilon - H_L) & h_{LC} & 0 \\ h_{LC}^+ & (\varepsilon - H_C) & h_{CR} \\ 0 & h_{CR}^+ & (\varepsilon - H_R) \end{pmatrix}^{-1} \quad (4)$$

ماتریس  $(\varepsilon - H_C)$  بیان کننده رسانای عایق بندی شده متناهی، ماتریس  $(\varepsilon - H_{\{R,L\}})$  بیان کننده الکترونها نامتناهی و  $h_{CR}$  و  $h_{LC}$  ماتریس‌های اتصال هستند که فقط برای نقاط مجاور رسانا



شکل ۲. احتمال عبوردهی الکترون و چگالی حالت یک نانولوله دسته صندلی (۵، ۵).

### ۳. نتایج محاسبات عددی

در ابتدا خواص ترابرد الکتریکی یک نانولوله کربنی ایده آل (اتصالات متجانس) از نوع دسته صندلی (۵، ۵) بررسی می شود. در ادامه، این نوع ساختار (اتصالات نامتجانس) به عنوان الکترودهای نیم بی نهایت در نظر گرفته می شود. با صرف نظر از انحای 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 می شوند [۱۶-۱۸]. در اینجا، دما به اندازه کافی پایین در نظر گرفته می شوند به طوری که کمترین نوارها یا کانالهای رسانشی اشغال شده باشند.

در شکل ۲، رفتارهای پله گونه ضریب عبوردهی الکترون به کوانتیده بودن ترابرد الکتریکی یا رسانش الکتریکی در ساختار متجانس مورد نظر می باشد. تعداد این پله ها معادل تعداد کانالهای رسانشی و یا مدهای رسانشی عرضی در این ساختار است که وابسته به عرض سیم کوانتومی ساخته شده از نانولوله کربنی می باشد. در انرژی فرمی (انرژی صفر) رسانش الکتریکی غیر صفر است، یعنی وسیله رفتار فلزی دارد. همچنین

$$T = t_0 + \tilde{t}_0 t_1 + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 t_2 + \dots + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 \tilde{t}_2 \dots t_n, \\ \bar{T} = \tilde{t}_0 + t_0 t_1 + t_0 t_1 t_2 + \dots + t_0 t_1 t_2 \dots t_n,$$

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

$$t_i = (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} t_{i-1}, \quad (9) \\ \tilde{t}_i = (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} \tilde{t}_{i-1},$$

محاسبه می شوند. در این رابطه داریم  $H_{01}^+ = (\epsilon - H_{00})^{-1} H_{01}$  و

$$\delta) t_n, \tilde{t}_n \leq \delta. \quad \tilde{t}_0 = (\epsilon - H_{00})^{-1} H_{01}$$

خیلی کوچک) باشد تکرار می شود. با این روش، تابع گرین دستگاه به صورت

$$G(E) = (\epsilon - H_{00} - H_{01} T - H_{01}^+ \bar{T})^{-1}, \quad (10)$$

نوشته می شود. اگر این معادله با معادله (۴) مقایسه شود در این صورت عبارتهای زیر به دست می آید:

$$H_{00} \equiv H_C, H_{01} \equiv h_{CR}, H_{01}^+ \equiv h_{LC}^+, \quad (11)$$

به ویژه با مقایسه معادله (۵) خود انرژی دستگاه الکترون-رسانا به صورت

$$\Sigma_L = H_{01}^+ \bar{T}, \quad (12) \\ \Sigma_R = H_{01} T,$$

بیان می شود. توابع اتصال از عناصر ماتریس انتقال و ماتریس هامیلتونی به دست می آید:

$$\Gamma_L = -\text{Im}(H_{01}^+ \bar{T}), \quad (13) \\ \Gamma_R = -\text{Im}(H_{01} T).$$

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

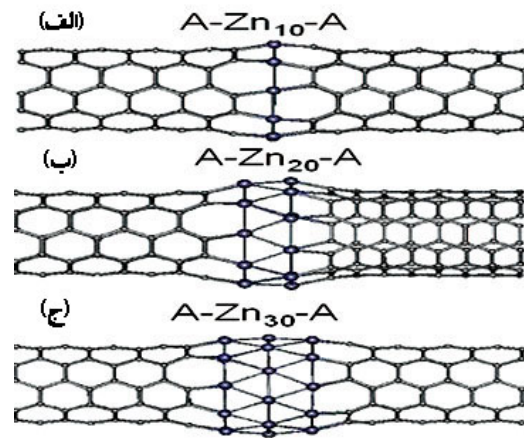
$$N(E) = -(1/\pi) \text{Im}[\text{Tr}G(E)] \quad (15)$$

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

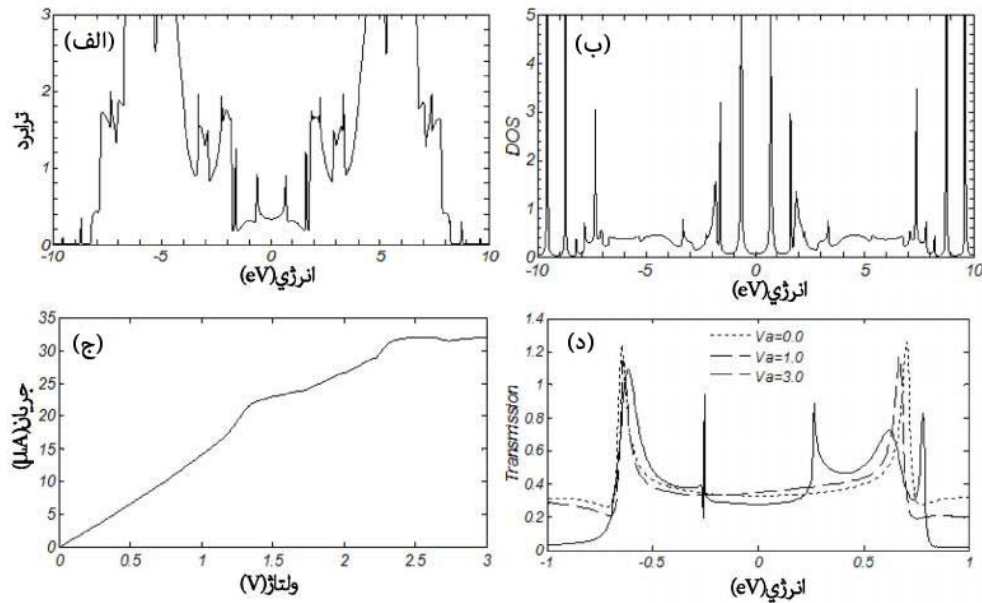
$$I(v) = \frac{2e}{h} \int T(E) (f_L(E) - f_R(E)) dE, \quad (16)$$

به دست می آید که در آن تابع توزیع فرمی-دیراک به

$$\text{صورت } f_{L(R)} = \left(1 + e^{\beta(E - \mu_{L(R)})}\right)^{-1} \text{ داده می شود.}$$



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 است.

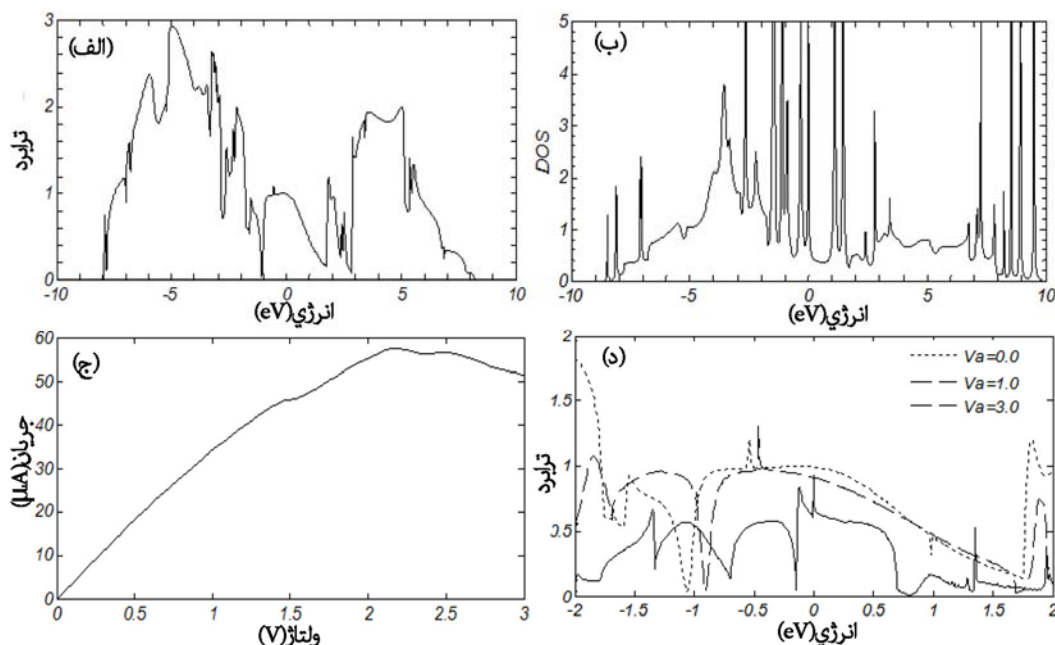


شکل ۴. ترابرد الکترونیکی (ضریب عبوردهی، چگالی حالت و مشخصه جریان-ولتاژ) در نانوساختار A-Zn<sub>10</sub>-A.

به منظور بررسی لایه‌های حلقوی روی متصل به الکترودهای نانولوله کربنی دسته‌سندلی (۵، ۵) 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  $t_{Zn-Zn} = 1/5 t$  و  $t_{Zn-C} = (t_{Zn-Zn} + t_{C-C})/2$  فرض می‌شوند.

در شکل ۴ (الف) و ۴ (ب)، نمودار ضریب عبوردهی الکترون

در هر دو نمودار رفتار متقارن نسبت به انرژی فرمی دیده می‌شود به طوری که با اعمال یک ولتاژ درگاهی، نمودارها کمی جابه‌جا خواهند شد. در شکل پایینی نمودار چگالی حالت دستگاه مورد نظر نشان داده است. از شکل دیده می‌شود که قله‌ها به معنی ویژه انرژی دستگاه است، که رفتار چگالی حالت به تکنیکی‌های وان-هوف برمی‌گردد. تعداد آنها به تعداد مدهای رسانشی دستگاه بستگی دارد.



شکل ۵. ترابرد الکتریکی (ضریب عبوردهی، چگالی حالت و مشخصه جریان-ولتاژ) در نانو ساختار  $A-Zn_{20}-A$ .

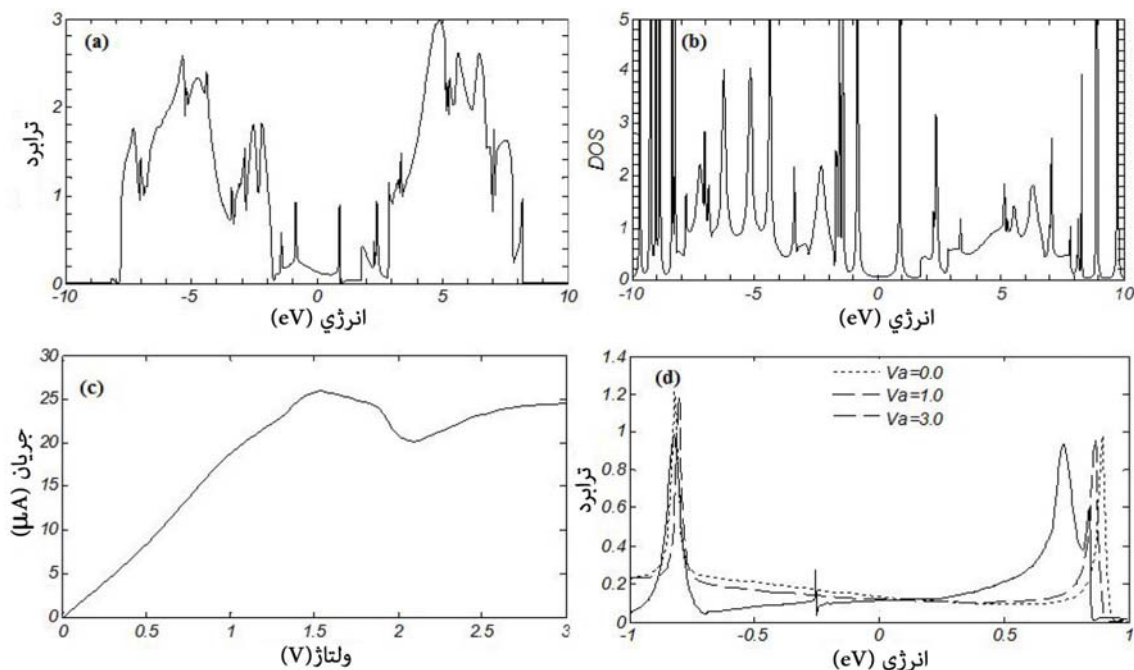
است، بنابراین حداکثر احتمال عبوردهی در نمودارهای عبوردهی الکترون برابر با ۵ می شود. زمانی که عدد احتمال عبوردهی الکترون بیشتر باشد بدین معنی است که تعداد کانال های رسانش بیشتری در انتقال الکترون نقش دارند در نتیجه در آن انرژی، وسیله رساناتر خواهد بود. بنابراین با توجه به مقدار احتمال عبوردهی الکترون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

در شکل ۵ مشاهده می کنیم که با افزایش ولتاژ، قله عبوردهی الکترون در نزدیکی انرژی فرمی به سمت انرژی های کمتر جابه جا می شود. 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 قله ها کاهش می یابد در حالی که به سمت انرژی کمتر می روند، پس جریان کاهش می یابد. در نتیجه ویژگی NDR (مقاومت دیفرانسیلی منفی) در  $A-Zn_{20}-A$  به خوبی مشهود است [۱۹].

و چگالی حالت نانو ساختار  $A-Zn_{10}-A$  نشان داده شده است. از این شکل ها دیده می شود که نمودارها نسبت به انرژی فرمی تقارن دارند. از طرفی دیگر شبه گاف انرژی نیز در نمودار چگالی حالات دیده می شود. همچنین برای بررسی بیشتر خواص ترابرد الکتریکی، نمودار منحنی جریان الکتریکی-ولتاژ اعمالی و ضریب عبوردهی در چند ولتاژ اعمالی به ترتیب در شکل های ۴ (ج) و ۴ (د) رسم شده است.

از نمودار جریان الکتریکی بر حسب ولتاژ خارجی در ساختار  $A-Zn_{10}-A$  دیده می شود که جریان در ولتاژهای پایین به صورت خطی رفتار می کند یعنی رفتار اهمی از خود نشان می دهد. اما در ولتاژهای بالاتر غیرخطی است و به صورت دیودی رفتار می کند. از طرفی دیگر ویژگی مقاومت دیفرانسیلی منفی NDR نیز مشاهده می شود یعنی افزایش ولتاژ منجر به کاهش جریان الکتریکی شده است. علت آن به هم پوشانی پنجره انرژی مربوط به الکترودها و لایه روی میانی است [۱۶]. در نتیجه می توان از این وسیله به عنوان سیم کوانتومی استفاده نمود.

در این برنامه نویسی  $n$ ، تعداد کانال های رسانش برابر پنج



شکل ۶. ترابرد الکترونیکی (ضریب عبوردهی، چگالی حالت و مشخصه جریان-ولتاژ) در نانوساختار A-Zn<sub>30</sub>-A.

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 نشان دهنده فلزی بودن این نوع نانولوله است. افزایش احتمال عبوردهی الکترون نشان دهنده افزایش کانال‌های رسانش و رسانایی دستگاه می‌باشد. با مشاهده منحنی جریان-ولتاژ در ساختار A-Zn<sub>10</sub>-A دیده می‌شود که با افزایش ولتاژ، جریان نیز همواره روند صعودی دارد و می‌تواند به عنوان سیم کوانتومی با مقاومت اهمی به کار گرفته شود. از طرفی دیگر، از منحنی جریان-ولتاژ در ساختار A-Zn<sub>20</sub>-A دیده می‌شود که بعد از افزایش ولتاژ در ۲٫۵ ولت کاهش جریان وجود دارد که معرف مقاومت منفی NDR است. این نوع ساختارها خاصیت یک‌سوکنندگی را نشان می‌دهد.

با توجه به منحنی احتمال عبوردهی بر حسب جریان با اعمال ولتاژهای مختلف، منحنی جریان-ولتاژ در شکل ۶ در ساختار A-Zn<sub>30</sub>-A رفتار متغیری (با مقاومتی با ویژگی ولتاژ جریان غیراهمی) نشان می‌دهد. از آنجایی که دامنه و کانال‌های هدایت کنندگی برای محدوده وسیعی از ولتاژهای اعمالی (۱ تا ۳ ولت) تقریباً ثابت هستند، افزایش کمی از جریان را در بیش از ۱٫۵ ولت مشاهده می‌کنیم. بنابر این می‌توان از این وسیله به عنوان متغیرساز یا یک‌سو کننده در کاربردهای مختلف بهره برد [۱۰-۱۲].

#### ۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله ترابرد الکترونیکی حلقه‌های روی با پهنای 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

## مراجع

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, and J Maultzsch, “*Carbon Nanotubes*”, Wiley-VCH, Weinheim (2004).
16. R Saito, M Fujita, G Dresselhaus, and M S Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **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 Physics Research* **13**, 2 (2013) 169.
۱۸. ع اشکری و ز کریمی، مجله پژوهش فیزیک ایران ۱۳، ۲ (۱۳۹۲) ۱۶۹.
19. A A Shokri, M Mardaani, and K Esfarjani, *Physica E* **27** (2005) 325.
1. J C Charlier and X Blasé and S Roche, *Rev. Mode. Phys.* **79** (2007) 677.
2. S Iijima, *Nature* **354** (1991) 56.
3. P Harrison, “*Quantum Wells, Wires and Dots*”, Wiley, 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, and M S Dresselhaus, “*Carbon Nanotubes, Advanced Topics in the Synthesis, Structure, Properties and Applications*”, Springer-Verlag (2008).
10. M Khazaei, S U Lee, F Pichierri, and Y Kavazaoe, *American Chemical Society Nano.* **2** (2008) 939.