

## بررسی ترابرد الکترونی در نانوقفس‌های فولرنی و فولرانی

محمد قاسم نژند، فرهاد خوئینی و مهدیه بدخشان

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه زنجان، زنجان

پست الکترونیکی: khoeini@znu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۹/۸/۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۰/۱/۶)

### چکیده

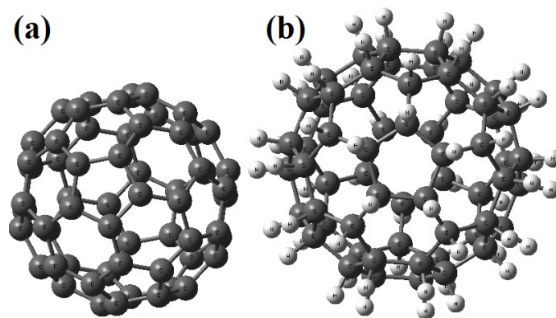
در این پژوهش ترابرد الکترونی در نانوقفس‌های فولرن و فولرانی را مورد بررسی قرار می‌دهیم. ترابرد الکترونی این سامانه‌ها را براساس مدل تنگابست با تقریب نزدیک‌ترین همسایه‌ها و فرمول‌بندی تابع گرین مطالعه می‌کنیم. در این پژوهش نوع الکترودهای متصل شده به مولکول‌ها را زنجیرهای کربنی کومولنی در نظر می‌گیریم و تأثیر موقعیت الکترودها را بر رسانش الکتریکی نانوقفس‌های یاد شده بررسی می‌کنیم. مشخصات ساختاری مولکول‌های مورد نظر را با کمک نظریه تابعی چگالی و به کارگیری تابعی هیبریدی B3LYP به دست می‌آوریم. رسانش الکتریکی سامانه‌های یاد شده را با تشکیل پل‌های مولکولی بین دو الکتروود کومولنی بررسی می‌کنیم. برای این کار نخست با استفاده از نظریه تابعی چگالی، حالت‌های پایدار اتصال الکترودها به سامانه‌های مورد نظر را به دست می‌آوریم. نتایج ما نشان می‌دهد که با تغییر موقعیت اتصال الکترودها به قفس فولرنی، می‌توان ویژگی‌های الکتریکی این سامانه‌ها را طوری کنترل کرد که گذار فاز بین رفتار نیم‌رسانایی و فلزی مشاهده شود. همچنین به دلیل پدیده جایگزیدگی، فولران‌ها همواره عایق هستند.

واژه‌های کلیدی: مدل تنگابست، نظریه تابعی چگالی، فولرن، فولران، کومولن.

### ۱. مقدمه

الکترونیک به سمت نانوالکترونیک و یا حتی الکترونیک مولکولی بیش از پیش احساس می‌شود. در نانوالکترونیک مولکولی از ویژگی‌های ذاتی مولکول‌ها برای افزایش سرعت و کوچک سازی ابعاد قطعات الکترونیکی استفاده می‌شود [۱-۳]. ساختارهای کربنی نقشی غیرقابل انکار در نانوالکترونیک دارند. از نانوساختارهای شناخته شده می‌توان به نانوقفس‌ها اشاره کرد که کربن می‌تواند در ساختار نانوقفس‌های مختلفی واقع شود. معروف‌ترین نانوقفس‌ها خانواده فولرن‌ها هستند. فولرن‌ها از ساختارهای پنج و شش گوش تشکیل شده‌اند. یک فولرن در ساختار خود ۱۲ پنج گوش را شامل می‌شود ولی تعداد شش گوش‌ها می‌تواند تغییر کند. با توجه به توضیحات

امروزه با گسترش صنعت الکترونیک، ابعاد و اجزا مدارها به طور مداوم در حال کوچک شدن هستند. کاهش اندازه دستگاه‌های الکترونیکی علاوه بر افزایش سرعت و راندمان قطعات، موجب کاهش مصرف مواد اولیه، انرژی و در نتیجه کاهش قیمت تمام شده قطعات، نیز می‌شود. عبارتی در دنیای صنعت الکترونیک مطرح است که بیان می‌کند تعداد ترانزیستورهای موجود در واحد سطح یک تراشه در هر دو سال، به طور تقریبی دو برابر می‌شود. اگر چه این عبارت از دقت کافی برخوردار نیست ولی به طور کلی به حقیقتی اشاره دارد که با ملاحظه این مهم، ضرورت حرکت صنعت



شکل ۱. ساختار فولرن (a) با فرمول شیمیایی  $C_{60}$  و فولران (b) با فرمول شیمیایی  $C_{70}H_8$ ، برای مقایسه اندازه آنها در کنار هم آمده است.

و مدل تنگابست بررسی کنیم. فولرن گرچه نام دسته‌ای از نانوقفس‌های کربنی است که مشخصات آن قبلاً گفته شد ولی چون فولرن باکمینستر اولین ساختار شناخته شده و پرچمدار این خانواده محسوب می‌شود، به طور معمول در گفته‌ها و نوشته‌ها منظور از فولرن همان فولرن باکمینستر است. در این کوشش ما نیز برای اختصار به جای فولرن باکمینستر فقط از کلمه فولرن استفاده می‌کنیم [۸].

## ۲. روش محاسبات

در این مقاله، برای به دست آوردن ساختارهای مولکولی بهینه، از محاسبات نظریه تابعی چگالی<sup>۴</sup> استفاده کرده ایم [۹]. محاسبات انرژی و بررسی پایداری پل‌های مولکولی مورد بررسی با تابعی<sup>۵</sup> B3LYP به همراه توابع پایه<sup>۶</sup> 6-31+G(d,p) انجام شده است و اجرای محاسبات با استفاده از نرم افزار گوسین<sup>۷</sup> صورت گرفته است [۱۰]. در شکل ۱ مدل گلوله و میله دو مولکول فولرن و فولران مورد بررسی در این تحقیق با استفاده از نرم افزار گوس ویو<sup>۸</sup> به صورت گرافیکی تنظیم شده است.

برای بررسی رسانش نانوقفس‌های مورد نظر، آنها را به صورت متصل به الکترودهای کومولنی در نظر می‌گیریم، به این ساختارها پل مولکولی می‌گویند [۱۱]. به طور کلی وضعیت تشکیل پل مولکولی برای فولرن و فولران مورد بررسی در سه حالت متصور است. حالت اول این که

داده شده می‌توان پس به طور ضمنی نتیجه گرفت که کوچک‌ترین فولرن فقط از ۱۲ پنج‌گوش تشکیل شده است و در ساختار خود هیچ شش‌گوشی ندارد. این فولرن از بیست کربن تشکیل می‌شود [۴]. معروف‌ترین عضو خانواده فولرن‌ها، فولرن باکمینستر<sup>۱</sup> نام دارد که به آن باکی بال هم گفته می‌شود. این مولکول یک خوشه کربنی از شصت اتم کربن است که ساختار قفس آن متشکل از ۱۲ پنج‌گوش و ۲۰ شش‌گوش است. فولرن باکمینستر اولین بار در سال ۱۹۸۵ توسط هارولد کروتو و همکارانش در دانشگاه رایس ایالت تگزاس تهیه شد [۵-۶]. بعدها ساختارهای فرعی دیگری از فولرن‌ها معرفی شد از جمله فولران<sup>۲</sup>، که به فولرن‌هایی که با هیدروژن اشباع شده باشند گفته می‌شود.

ما در این مقاله ترابرد الکترونی را برای فولرن باکمینستر با فرمول شیمیایی  $C_{60}$  و فولران متناظر آن یعنی  $C_{70}H_8$  مورد بررسی قرار می‌دهیم. برای به دست آوردن ویژگی‌های ترابردی سامانه‌های یادشده، آنها را به صورت پل‌های مولکولی متصل به الکترودهای فلزی کربنی در نظر می‌گیریم. ساخت قطعات الکترونیکی از قبیل ترانزیستور بر پایه نانو ساختارها، اهمیت بررسی ویژگی‌های ترابردی آنها را نمایان می‌کند [۷]. نوع الکترودها را از نوع سیم‌های اتمی کربنی فرض کرده ایم. لازم به ذکر است که به آن دسته از سیم‌های اتمی کربنی که از نظر الکتریکی ویژگی‌های فلزی داشته باشد کومولن<sup>۳</sup> گفته می‌شود. ما در این کوشش در نظر داریم تاثیر تغییر موقعیت الکتروود کومولنی بر روی رسانش الکترونی فولرن و فولران را با استفاده از نظریه تابعی چگالی

۴. DFT: Density functional theory

۵. Functional

۶. Basis set

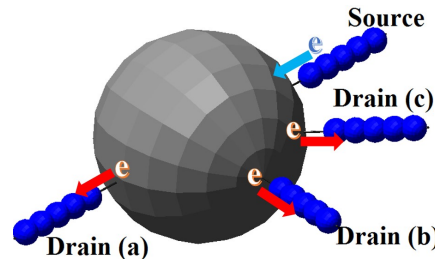
۷. Gaussian

۸. GaussView

۱. Buckminster fullerene

۲. Fullerane

۳. Cumulene



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) سه حالت برای تشکیل پل مولکولی با فولرن متصور است (a) الکترودها نسبت به هم در دورترین حالت ممکن باشند، (b) الکترودها نسبت به هم عمود باشند و (c) الکترودها در نزدیک‌ترین حالت ممکن نسبت به یکدیگر قرار داشته‌باشند.

اوربیتال‌های  $s$  و  $p$  باشند، سپس طول بهینه پیوند مورد نظر را به دست می‌آوریم. حال با داشتن طول بهینه پیوند مورد نظر، با استفاده از قانون هریسون با مینا قرار دادن پیوندی که طول و انرژی جهش آن مشخص است انرژی جهش را بین دو اتم مورد نظر به دست می‌آوریم. حال برای توصیف وضعیت پل‌های مولکولی مورد نظر از رابطه (۳) استفاده می‌کنیم [۱۵]:

$$H = H_S + H_{SC} + H_C + H_{CD} + H_D \quad (3)$$

نانوقفس مورد بررسی را به صورت نانو قطعه‌ای در نظر می‌گیریم که در میان دو الکتروده قرار گرفته‌است. رابطه (۳) از چپ به راست به ترتیب نشانگر هامیلتونی‌های مربوط به الکتروده چشمه، اتصال<sup>۵</sup> الکتروده چشمه به نانو قطعه مرکزی، نانو قطعه مرکزی، اتصال الکتروده چاه به نانو قطعه مرکزی و در پایان الکتروده چاه است. حال برای محاسبه تابع گرین از رابطه (۴) استفاده می‌کنیم:

$$G(E) = ((E + i\eta)I - H - Q_S - Q_D)^{-1} \quad (4)$$

که در این رابطه  $I$  ماتریس واحد و  $\eta$  یک عدد دلخواه بسیار کوچک است که برای همگرایی و وارون‌پذیری ماتریس گرین لازم است و  $Q_{S/D}$  خود انرژی الکترودهای چشمه و چاه است و ناشی از برهم‌کنش الکترودها با مولکول است. برای به دست آوردن تابع گرین سامانه‌ها باید این خود انرژی‌ها را به دست آوریم. در سامانه‌هایی که پل‌های مولکولی به الکترودهای زنجیری نیم‌نامتناهی کومولنی متصل شده‌اند خود انرژی الکترودها بر اساس مدل نیونز-آندرسون به صورت رابطه تحلیلی ۵ بیان می‌شود [۱۶]:

$$Q_{S/D} = \frac{\beta^2}{\gamma} \left[ \frac{E \pm eV}{2\gamma} - i \sqrt{1 - \left( \frac{E \pm eV}{2\gamma} \right)^2} \right] \quad (5)$$

۵. Junction

۶. Center region

الکترودهای کومولنی چشمه<sup>۱</sup> و چاه<sup>۲</sup> در دورترین وضعیت با زاویه ۱۸۰ درجه نسبت به هم قرار گیرند. حالت دوم این که الکترودهای متصل نسبت به هم عمود باشند و در پایان، حالت سوم که الکترودها در حالت نزدیک به هم قرار می‌گیرند و زاویه‌ای در حدود ۴۵ درجه باهم می‌سازند. برای تصور بهتر طرحی از سه حالت ممکن در شکل ۲ آمده‌است.

حال با مدل تنگابست نانوقفس‌های مورد بررسی را توصیف می‌کنیم. با استفاده از رابطه (۱) هامیلتونی سامانه را به دست می‌آوریم [۱۲-۱۳]:

$$H = \sum (\epsilon_n |n\rangle \langle n| + t_{n,n+1} |n\rangle \langle n+1| + t_{n+1,n} |n+1\rangle \langle n|), \quad (1)$$

در رابطه بالا،  $\epsilon_n$  مربوط به انرژی جایگاهی<sup>۳</sup> هر یک از اتم‌های نانوقفس‌های مورد بررسی است و  $t_{n,n+1}$  پارامتر انرژی جهش<sup>۴</sup> الکترون در بین اتم‌های شماره  $n$  و  $n+1$  ساختارهای مورد بررسی را نشان می‌دهد. در مدل تنگابست معمولاً با افزایش طول پیوند بین اتم‌ها، انرژی جهش متناظر با آن کاهش می‌یابد. قانون هریسون این کاهش را به صورت رابطه (۲) بیان می‌کند [۱۳]:

$$t' = \left( \frac{a}{a'} \right)^2 t \quad (2)$$

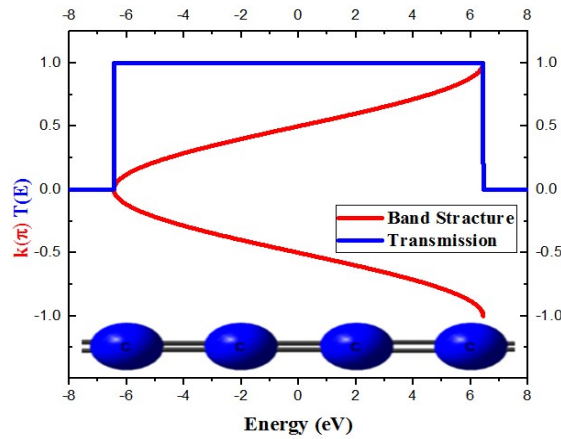
که در آن  $a$  و  $a'$  به ترتیب طول پیوندهای وابسته به انرژی‌های جهش  $t$  و  $t'$  است [۱۴]. البته قانون هریسون برای پیوندهایی قابل استفاده است که هیبریداسون آن فقط از اوربیتال‌های  $s$  و  $p$  باشند. ما در این مقاله برای تقریب زدن انرژی جهش نامعلوم پیوندها، نخست هیبریداسیون اوربیتالی آنها را بررسی می‌کنیم تا مطمئن شویم که فقط شامل

۱. Source

۲. Drain

۳. On-site energy

۴. Hopping parameter



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) اتم‌های کربن به طور متوالی با یکدیگر پیوند دوگانه تشکیل داده‌اند و سیم اتمی کومولن را تشکیل داده‌اند. ساختار نواری و ضریب عبور دهی به دست آمده به کمک مدل تنگابست نشان می‌دهد که کومولن رفتار فلزی دارد.

هریسون انرژی جهش را در بین اتم‌های الکترودهای کومولنی به دست آوریم. ما در محاسبات خود انرژی جهش در ساختار گرافین را مبنا قرار می‌دهیم؛ چرا که هیبریداسیون اوربیتالی در بین اتم‌های گرافین از نوع  $sp^2$  است و با آگاهی از این که انرژی جهش الکترون در پیوندهای آن با طول  $1/42$  آنگستروم، به اندازه  $2/7$  الکترون ولت است [۱۷].

انرژی جهش در میان کربن‌های کومولن با استفاده از قانون هریسون بر اساس انرژی جهش گرافین، حدود  $3/3$  الکترون ولت خواهد بود. مدل گلوله و میله ساختار کومولن به همراه نمودارهای مربوط به ویژگی‌های ترابردی، الکترونی و وضعیت ساختار نواری حاصل از مدل تنگابست، در شکل ۳ نمایش داده شده است.

با توجه به شکل ۳ می‌توان نتیجه گرفت که مدل تنگابست برای زنجیره کومولنی بر اساس نظریه نواری گافی به دست نمی‌دهد و از نظر الکتریکی آن را فلز معرفی می‌کند. نکته قابل توجه دیگری که از محاسبات تنگابست، می‌توان نتیجه گرفت این است که چون هریک از اتم‌های کربن سازنده سیم کومولن با دو همسایه برهم‌کنش می‌کنند، الکترونی قابلیت عبور از این سیم را خواهد داشت که حداکثر به اندازه دو برابر انرژی جهش بین اتم‌های این سیم انرژی داشته باشد [۱۳-۱۲].

با قرار گیری اتم یا مولکولی در مسیر سیم کومولن، می‌تواند انواعی دیگر از پل‌های مولکولی تشکیل یابد. در ادامه فولرن و فولران را در بین سیم کومولنی قرار می‌دهیم

که در رابطه بالا  $\gamma$  انرژی جهش بین اتم‌های الکترودها،  $\beta$  انرژی جفت شدگی نانوقطعه با الکترودها و  $V$  ولتاژ اعمالی به سامانه را نشان می‌دهد. براساس نظریه لاندور، احتمال عبور بین الکترودها چپ و راست طبق رابطه (۶) محاسبه می‌شود:

$$T_{\sigma} = \text{tr}[\Gamma_S G(E) \Gamma_D G^*(E)] \quad (6)$$

در رابطه بالا،  $G(E)$  تابع گرین سامانه در زیر فضای قطعه و  $\Gamma_{S/D}$  ماتریس‌های متناظر با الکترودهای چشمه و چاه، وابسته به خود انرژی الکترودها است و تمام اطلاعات جفت‌شدگی بین پل مولکولی و الکترودها را شامل می‌شود و از رابطه (۷) محاسبه می‌شود:

$$\Gamma_{S/D} = i[Q_{S/D} - Q_{S/D}^{\dagger}] \quad (7)$$

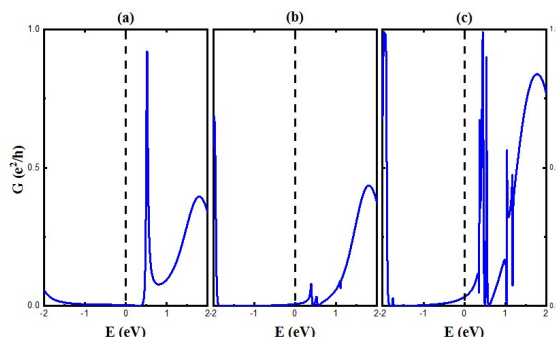
و رسانش با ضریب عبور به صورت معادله (۸) رابطه دارد:

$$G_{\sigma} = \frac{2e^2}{h} T_{\sigma} \quad (8)$$

در رابطه بالا  $e$  بار الکترون و  $h$  ثابت پلانک است. همان طور که در مقدمه اشاره شد الکترودهای مورد استفاده در این مقاله، زنجیره‌های کربنی تشکیل شده از پیوندهای دوگانه متوالی است که به آنها زنجیره‌های کومولنی می‌گویند، به عبارت دقیق‌تر زنجیر کومولن از ساختارهای آلنی<sup>۱</sup> پی‌درپی تشکیل شده است. به علت وجود ساختار آلنی متوالی در کومولن، فاصله دو اتم کربن در رشته، طول پیوند کربن در ساختار آلن، حدود  $1/30$  آنگستروم است و چون هیبریداسیون اوربیتالی سیم‌های کومولنی از نوع  $sp$  است پس می‌توانیم از رابطه

جدول ۱. مشخصات ساختاری و ترازهای مهم الکترونی برای فولرن و فولران‌های مورد بررسی.

Bond length		H-L Gap	LUMO	HOMO	Fullerene Fullerane
C-H	C-C				
-	۱/۴۰ ۱/۴۵	۲/۷۲	-۳/۶۸	-۶/۴۰	C <sub>60</sub>
۱/۰۹	۱/۵۶ ۱/۵۷	۵/۷۸	-۰/۶۶	-۶/۴۳	C <sub>60</sub> H <sub>60</sub>



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودارهای رسانش الکترونیکی برای پل مولکولی فولرنی در سه وضعیت مختلف (a) حالتی که الکترودها در دورترین فاصله از هم قرار دارند، (b) برای حالتی است که الکترودها نسبت به هم عمود هستند. و (c) برای حالتی است که الکترودها در حالتی نزدیک به یکدیگر قرار دارند.

همان طور که نمودار شکل ۳ نشان می‌دهد تقریباً تنگابست، احتمال عبور الکترون را از سیم کومولنی برابر یک نتیجه می‌دهد. بنابراین تغییرات نمودار ترابرد پل‌های مولکولی که الکترودهای آن از نوع کومولنی است فقط به مولکول مرکزی در پل مربوط می‌شود. در ادامه نمودارهای مربوط به ترابرد الکترون از هریک از فولرن و فولران‌های مورد بررسی آمده است. شکل ۴ نمودارهای رسانش الکترون در پل مولکولی فولرنی را در سه وضعیت قرارگیری الکترودهای کومولنی متصل به قطعه فولرنی نشان می‌دهد. لازم به یادآوری است که نمودار (a) برای زمانی است که الکترودها در دورترین فاصله از هم قرار دارند و نمودار (b) برای حالتی است که الکترودها نسبت به هم عمود هستند و در نهایت نمودار (c) برای حالتی است که الکترودها در حالتی نزدیک به یکدیگر قرار دارند.

بین الکترودهای کومولنی و ساختار فولرن یک جفت شدگی قوی رخ می‌دهد؛ چرا که فاصله بین کربن کومولن با کربن فولرن در حدود پیوندهای کربنی در آلکن‌ها<sup>۴</sup> است به طوری که انرژی لازم برای جهش الکترون بین الکترودها و قطعه فولرنی در حدود ۱/۳ الکترون ولت است. چون در

و بررسی می‌کنیم که هریک از این دو نانوقفس کربنی چگونه الگوی کامل رسانش کومولن را تغییر می‌دهد.

### ۳. نتایج

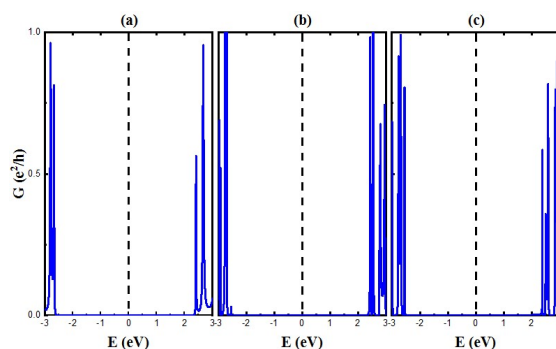
تحلیل اوربیتال پیوند طبیعی<sup>۱</sup> برای فولرن و فولران نشان می‌دهد که پیوندهای تشکیل دهنده فولرن نزدیک به هیبریداسیون اوربیتالی sp<sup>2</sup> و فولران نزدیک به هیبریداسیون sp<sup>3</sup> است. پس شرط استفاده از قانون هریسون برای ساختارهای فولرن و فولران برقرار است. حال برای برآورد انرژی جهش الکترون بین دو اتم با استفاده از این قانون لازم است که طول پیوندهای بین آن دو اتم را داشته باشیم. طول پیوند بین مشخصات الکترونی و ساختاری حاصل شده از محاسبات نظریه تابعی چگالی را برای سامانه‌های مورد بررسی در جدول ۱ تنظیم کرده‌ایم. در این جدول افزون بر اطلاعات مربوط به طول پیوند بین اتم‌های ساختارهای مورد بررسی، سطح بالاترین تراز اشغال شده<sup>۲</sup> (هومو)، پایین‌ترین تراز خالی<sup>۳</sup> (لومو) و فاصله این دو تراز که به گاف هومو-لومو معروف است، نیز آمده است.

۱. Natural bond orbital (NBO)

۲. Homo: Highest occupied molecular orbital

۳. Lumo: Lowest unoccupied molecular orbital

۴. Alkene



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودارهای رسانش الکتریکی برای پل مولکولی فولرنی در سه وضعیت مختلف (a) حالتی که الکترودها در دورترین فاصله از هم قرار دارند، (b) برای حالتی است که الکترودها نسبت به هم عمود هستند و (c) برای حالتی است که الکترودها در حالتی نزدیک به یکدیگر قرار دارند.

فولرن به خاطر تشدید الکترون، دو نوع پیوند کربنی مشاهده می‌شود پس دو نوع برهم‌کنش در بین کربن‌های فولرن وجود دارد. پس با بیان تنگابست دو نوع انرژی جهش بین اتم‌های کربن فولرن خواهیم داشت. انرژی جهش بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها با توجه به رابطه (۸) با تقریب خوبی برابر است با  $t_{\pi}^{(2)} = (1/1)t_{\pi}^{(1)}$  که  $t_{\pi}^{(1)}$  انرژی جهش مربوط به پیوندهای یگانه و  $t_{\pi}^{(2)}$  انرژی جهش مربوط به پیوندهای دوگانه است [۱۸]. از طرف دیگر انرژی جایگاهی را برای اتم‌های پل‌های مولکولی مورد بررسی، به خاطر این که همگی کربن هستند صفر در نظر می‌گیریم. در ادامه، شکل ۵ نمودارهای رسانش الکترون در پل مولکولی فولرنی در سه وضعیت قرارگیری الکترودهای کومولنی متصل به قطعه، که در این مرحله فولران لحاظ می‌کنیم، آمده‌است.

$$EA = -E_{LUMO} \quad (9)$$

رابطه بالا نشان می‌دهد که هر چقدر اوربیتال لومو عمیق‌تر باشد الکترون‌خواهی یک مولکول بیشتر خواهد بود. با ملاحظه اندازه ترازهای لومو برای ساختار فولرن و فولران مشخص می‌شود که الکترون‌خواهی فولرن در حدود ۴ الکترون ولت است در حالی که مشخصه الکترون‌خواهی را برای فولران می‌توان صفر در نظر گرفت.

افزون بر مقایسه مشخصه الکترون‌خواهی، جایگزیده بودن اوربیتال‌های هومو و لومو نیز نشان از عایق بودن یک سامانه را دارد [۲۰]. در شکل ۶ اوربیتال‌های هومو و لومو برای دو قفس فولرنی و فولرنی رسم شده است که این مسئله در شکل زیر مشاهده می‌شود.

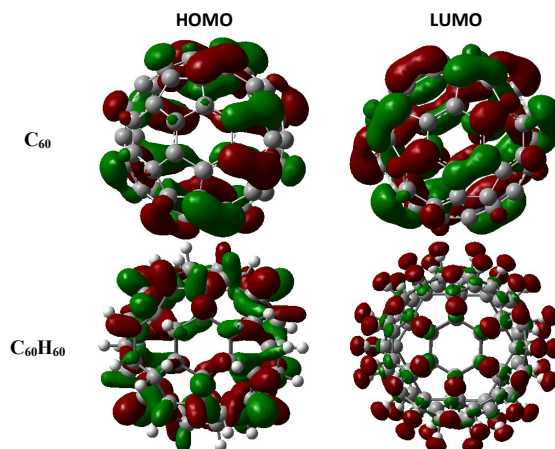
با توجه به شکل ۶ متوجه می‌شویم که اوربیتال‌های هومو و لومو در قفس فولران جایگزیده است، برای همین الکترون

فولرن به خاطر تشدید الکترون، دو نوع پیوند کربنی مشاهده می‌شود پس دو نوع برهم‌کنش در بین کربن‌های فولرن وجود دارد. پس با بیان تنگابست دو نوع انرژی جهش بین اتم‌های کربن فولرن خواهیم داشت. انرژی جهش بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها با توجه به رابطه (۸) با تقریب خوبی برابر است با  $t_{\pi}^{(2)} = (1/1)t_{\pi}^{(1)}$  که  $t_{\pi}^{(1)}$  انرژی جهش مربوط به پیوندهای یگانه و  $t_{\pi}^{(2)}$  انرژی جهش مربوط به پیوندهای دوگانه است [۱۸]. از طرف دیگر انرژی جایگاهی را برای اتم‌های پل‌های مولکولی مورد بررسی، به خاطر این که همگی کربن هستند صفر در نظر می‌گیریم. در ادامه، شکل ۵ نمودارهای رسانش الکترون در پل مولکولی فولرنی در سه وضعیت قرارگیری الکترودهای کومولنی متصل به قطعه، که در این مرحله فولران لحاظ می‌کنیم، آمده‌است.

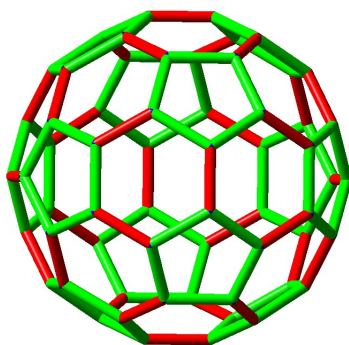
بین الکترودهای کومولنی و فولران جفت شدگی به اندازه پل مولکولی فولرنی ایجاد نمی‌شود به طوری که طول پیوند بین کربن الکترودهای کومولنی و کربن ساختار فولران حدود ۵/۱ آنگستروم است که با استفاده از قانون هریسون، انرژی لازم برای جهش الکترون در این پیوند حدود ۴۷/۲ الکترون ولت نتیجه می‌شود. در ادامه به تحلیل نمودارهای رسانش مربوط به هر یک از پل‌های مولکولی فولرنی و فولرنی می‌پردازیم.

#### ۴. بحث و بررسی در نتایج

نکته مهمی که از نمودارهای شکل‌های ۴ و ۵ مشخص می‌شود این مسئله است که با تغییر موقعیت الکترودها می‌توان



شکل ۶. (رنگی در نسخه الکترونیکی) اوربیتال‌های هومو و لومو در فولران‌ها جایگزیده هستند. جایگزیدگی فولران‌ها باعث عایق بودن این قفس‌ها در برابر عبور الکترون می‌شود، در حالی که اوربیتال‌های هومو و لومو در فولرن‌ها جایگزیده نیستند.



شکل ۷. (رنگی در نسخه الکترونیکی) قفس فولرن از پیوندهای یگانه و دوگانه کربن-کربن با طول‌های متفاوت تشکیل شده است. پیوندهای یگانه و دوگانه به ترتیب به طول ۴۵/۱ و ۴۰/۱ آنگستروم است. در شکل بالا پیوندهای رزونانسی با رنگ قرمز مشخص شده است.

نکته دوم این که، وجود قله‌های نمودارهای بالا نشان از ویژه مقادیر اجزای سامانه‌های متناظر است پس زمانی که تعداد قله‌های تشدید نمودار به تعداد اتم‌های سامانه نباشد نتیجه می‌شود که در سامانه تبهگنی وجود دارد. بنابراین با مشاهده کلی نمودارهای ۴ و ۵ می‌توان نتیجه‌گیری کلی کرد که تبهگنی در هر دو قفس فولرن و فولران وجود دارد ولی شدت آن در فولرن بیشتر است. علت شدت تبهگنی در فولرن در مقایسه با فولران این مسئله است، همان طور که در نتایج جدول ۱ مشاهده می‌شود، در فولران‌ها تفاوت چندانی بین طول پیوندها وجود ندارد؛ چرا که در فولران اتم‌ها دارای هیبریداسیون  $sp^3$  هستند که برای همین از میان چند وجهی‌های  $(CH)_n$  کمترین انرژی کرنشی را دارد، اما قفس فولرن از پیوندهای یگانه و دوگانه کربن-کربن با طول‌های متفاوت تشکیل شده است [۲۱-۲۳]. شکل ۷ چگونگی

راهی برای عبور از قفس فولرانی ندارد. در حالی که در قفس فولرن، الکترون‌ها تشدید می‌کنند و این باعث می‌شود که اوربیتال‌های هومو و لومو در اسکلت فولرنی پخش شوند و تشدید الکترون‌ها عاملی برای ترابرد الکترون از قفس فولرنی باشد. لازم به ذکر است که به نظر می‌رسد که گاف هومو-لوموی بزرگ دلیلی مطلق برای عایق بودن قفس فولرانی باشد ولی مسئله اینجاست که گاف قفس فولرنی در مقایسه با گاف قفس فولرانی کوچک است ولی خود به قدری است که بتواند مانع ترابرد الکترون‌ها از قفس فولرنی شود.

اگر نمودارهای مربوط به شکل‌های ۴ و ۵ را ملاحظه کنیم نکاتی دیگر را نیز می‌توانیم متوجه شویم. اول این که، هر کدام از پل‌های مورد بررسی بر روی یک کانال عبورالکترونی قرار دارند بنابراین ضریب عبور در نمودارهای بالا، همان طور که مشاهده می‌شود، حداکثر مقدار یک را می‌تواند داشته باشد.



بودن قله‌های تشدید، جفت شدگی ضعیف دستگانه را می‌رساند. پس در این صورت با توجه به نمودارهای ۴ و ۵ مشخص می‌شود که جفت شدگی در پل‌های فولرنی قوی‌تر از پل‌های فولرانی اتفاق می‌افتد. این مطلب با مقایسه انرژی جهش بین الکتروود و قطعه در پل فولرن و فولران نیز قابل فهم بود؛ چرا که انرژی جهش الکترون بین الکتروود و فولرن در حدود ۹۰٪، و در بین الکتروود و فولران در حدود ۸۰٪ انرژی جهش در زنجیر کومولنی است.

پراکندگی پیوندهای دوگانه که با رنگ قرمز مشخص شده است را در قفس فولرنی نشان می‌دهد.

تفاوت در طول پیوندهای قفس فولرنی باعث شکستن تبهگنی یکی از ترازهای مولکولی می‌شود که این منجر به تغییرات عمده‌ای در رفتار الکتریکی فولرن می‌شود [۲۳].

نکته سوم در مورد به هم پیوستگی قله‌های نمودار است. به هم پیوستگی قله‌های تشدید در نمودار نشان از جفت شدگی قوی در پل مولکولی است و همین طور تیز و تکین

## مراجع

1. G Joachim, J K Gimzewski, and A Aviram. "Electronics using hybrid-molecular and mono-molecular devices." *Nature* 408.6812 (2000): 541.
2. N D Lang, and Ph Avouris. *Physical Review Letters* 81.16 (1998): 3515.
3. D Vasileska, et al. *Nano-Electronic Devices*. Springer New York (2011) 97.
4. M Qasemnazhand, and F Marsusi, *Journal of research on many body systems* 7 (2017) 77.
5. H W Kroto, et al. "C 60: buckminsterfullerene." *Nature* 318. 6042 (1985) 162.
6. M Qasemnazhand, F Khoeini, and F Marsusi, "Photoluminescence in a Glucose-coated Sila-fullerene and Its Nanomedicine Applications." Submitted (2021).
7. Y Wada, et al. *Japanese Journal of Applied Physics* 39. 7 R (2000) 3835.
8. M Qasemnazhand, F Khoeini, and F Marsusi, *Scientific Reports* 11. 1 (2021): 1-14.
9. F Marsusi, and J Sabbaghzadeh. *Physical Review B* 85. 11 (2012) 115302.
10. F Marsusi, and M Qasemnazhand. *Nanotechnology* 27. 27 (2016) 275704.
11. S. Nakanishi, and M. Tsukada. *Physical Review Letters* 87. 12 (2001) 126801.
12. F Khoeini, A A Shokri, and H Farman, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 41. 8 (2009) 1533.
13. M Qasemnazhand, F Khoeini, and S Shekarforoush. *New Journal of Chemistry* 43. 42 (2019) 16515.
14. W A Harrison, *Electronic structure and the properties of solids: the physics of the chemical bond*, Courier Corporation (2012).
15. F Khoeini, M Nazari, S Shekarforoush, and M Mahdaviyar, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* (2020) 114200.
16. K Walczak, *Central European Journal of Chemistry* 2. 3 (2004): 524.
17. F Khoeini, Analytical study of electronic quantum transport in carbon-based nanomaterials, *Diamond and Related Materials* 47 (2014) 7.
18. E Manousakis, *Physical Review B* 44. 19 (1991) 10991.
19. M Qasemnazhand, F Khoeini, F Marsusi, Fulleryne, a new member of the carbon cages family, arXiv preprint arXiv: 200309835, (2020).
20. M Qasemnazhand, F Khoeini, and F Marsusi, *Frontiers in Physics* 9 (2021) 69103.
21. H P Schultz. *The Journal of Organic Chemistry* 30. 5 (1965) 1361.
22. Y L Lin, and F Nori. *Physical Review B* 53. 3 (1996) 1641.
23. A Saffarzadeh, and G Kirczenow. *Applied Physics Letters* 102. 17 (2013) 173101.



