

وابستگی رسانش الکترونی یک نانوحلقه کربنی به محل اتصال هادی‌ها و میدان مغناطیسی اعمالی

محمد مردانی^۱، حسن ربانی^۱ و فاطمه مقدسی^۱

۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

۲. مرکز پژوهشی فناوری نانو، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

پست الکترونیکی: mohammad-m@sci.sku.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۳/۳/۲۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۴/۵/۲۵)

چکیده

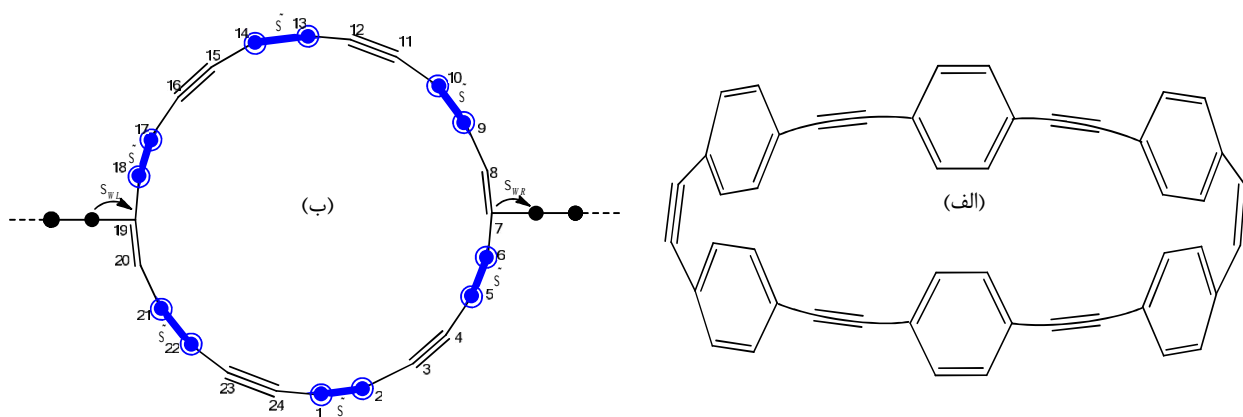
در این مقاله در رهیافت تنگابست و به روش تابع گرین رسانش الکترونی یک نانوحلقه کربنی را برای موقعیت‌های مختلف اتصال هادی‌ها به آن در حضور و غیاب میدان مغناطیسی بررسی کردیم. نتایج نشان می‌دهد که با نزدیک شدن هادی‌ها در نانوحلقه، رسانش تونل‌زنی در ناحیه گاف بهتر می‌شود. همچنین اعمال میدان مغناطیسی تأثیر زیادی بر طیف رسانش این نانوحلقه دارد، به گونه‌ای که وجود میدان باعث می‌شود مواردی که طیف رسانش آنها در غیاب میدان کاملاً بر هم منطبق هستند، از هم جدا گردند. بررسی نانوحلقه‌های شامل مولکول بنزن دوتایی نشان می‌دهد که تغییر مکان این حلقه‌های بنزنی در نانوحلقه، باعث جابه‌جایی ضدتشدیدها در نمودار رسانش می‌شود.

واژه‌های کلیدی: رسانش الکترونی، تنگابست، شار مغناطیسی، نانوحلقه کربنی

۱. مقدمه

نانوحلقه‌ها هستند که از مولکول‌های کربنی پنج‌گوشه و شش‌گوشه تشکیل شده است. حلال‌پذیری پایین فولرن‌ها در سیالات، کاربرد آنها را به عنوان مواد مؤثر در ساخت داروها محدود می‌کند. ولی در عوض خواصی چون آب‌گریزی، سه بعدی بودن و خواص الکترونی آن باعث استفاده از آنها در انتقال بعضی داروها در بدن می‌شود. از آنجا که برخی از داروها روی بافت‌های دیگر بدن اثرهای ناخواسته‌ای از خود نشان

اولین مطالعات نظری در مورد خصوصیات ترابرد الکترونی از یک سامانه هادی-حلقه-هادی به سه دهه پیش بر می‌گردد [۱]. یک نانوحلقه مثال خوبی از سامانه‌های کوانتومی کم بعد است که تداخل کوانتومی و پدیده آهارانف - بوهم را در آن می‌توان مشاهده کرد [۲]. مولکول‌هایی مانند فولرن که از به هم پیوستن حلقه‌های کربنی به وجود می‌آیند، نمونه‌های واقعی از



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) (الف) ساختار شیمیایی یک نانوحلقه کربنی. (ب) همان نانوحلقه که بنزن‌های آن به مولکول‌های دو اتمی مؤثر تقلیل یافته‌اند. جایگاه‌های مؤثر در این ساختار را با اعداد یک تا ۲۴ شماره‌گذاری شده است. هادی ورودی به جایگاه ۱۹ متصل و هادی خروجی می‌تواند از جایگاه شماره J (در اینجا ۷) به حلقه وصل شود.

۲. فرمول‌بندی

در شکل ۱ (الف) ساختار شیمیایی یک نانوحلقه کربنی نشان داده شده است. هامیلتونی این نانوحلقه که از طریق دو اتم کربن خود به دو هادی فلزی متصل شده، به صورت زیر است [۵]

$$H = H_L + H_{WL} + H_W + H_{WR} + H_R, \quad (1)$$

که در آن H_W ، $H_{WR(L)}$ ، $H_{R(L)}$ به ترتیب هامیلتونی‌های نانوحلقه منزوی، اتصال حلقه با هادی سمت راست (چپ) و هادی سمت راست (چپ) هستند. می‌توان با توجه به شکل ۱ (ب) هامیلتونی نانوحلقه منزوی را به صورت ماتریس زیر به شکل زیر نوشت

$$H_W = \begin{pmatrix} H_1 & 1 & \dots & 0 & 1 \\ \dagger & H_1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & H_1 & 1 \\ 1 & 0 & \dots & \dagger & H_1 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

که در آن ۰ نشان دهنده ماتریس صفر مرتبه چهار است و

$$1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & S_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ و } H_1 = \begin{pmatrix} \tilde{V} & \tilde{S} & 0 & 0 \\ \tilde{S} & \tilde{V} & S_1 & 0 \\ 0 & S_1 & V_0 & S_3 \\ 0 & 0 & S_3 & V_0 \end{pmatrix},$$

در اینجا S_1 S_2 S_3 به ترتیب انرژی پرش پیوندهای یگانه و دوگانه و سه‌گانه کربن-کربن و V_0 انرژی جایگاهی الکترون در اتم کربن است. همچنین با باز بهنجارش حلقه‌های بنزن در تقریب تنگابست به مولکول‌های دو اتمی مؤثر داریم [۷]

می‌دهند، محققان به دنبال کشف و ابداع مولکول‌هایی هستند که بتوانند تا رسیدن دارو به بافت هدف، دارو را محافظت کنند. آنها سعی دارند شرایطی را بیابند که با رسیدن مولکول به بافت هدف، دارو را از دام خود برهاند. بنابراین فولرن به خاطر ساختار ویژه خود در این مورد توجه محققان را به خود جلب کرده است. ساختار فولرن به گونه‌ای است که نوعی قفس فراهم می‌کند تا مولکول‌هایی را که اندازه آنها با اندازه این قفس سازگار است، به دام اندازد [۳ و ۴]. از این رو بررسی خواص فیزیکی و بخصوص الکترونی این ساختارها بسیار مورد توجه است. همچنین مطالعات تجربی و نظری بسیاری درباره رسانش الکترونیکی نانوحلقه‌ها در شرایط مختلف انجام شده است. از جمله بوتیکر و همکارانش رابطه‌ای برای جریان گذرنده از یک حلقه فلزی مزوسکوپی ارائه داده‌اند [۵]. بعد از آن نشان داده شده که می‌توان ترابرد الکترون از طریق یک حلقه مزوسکوپی را با تغییر نحوه ارتباط حلقه با الکترودها و شار مغناطیسی که از آن می‌گذرد، تنظیم کرد [۶]. در یک تحقیق نیز تأثیر میدان مغناطیسی بر روی رسانش الکترونیکی یک نانوحلقه به صورت کاملاً تحلیلی مورد بررسی قرار گرفته و نشان داده شده که ترابرد الکترونی نانوحلقه در حضور میدان مغناطیسی شدیداً به انرژی الکترون ورودی و شار مغناطیسی حساس است [۸]. در این مقاله به بررسی رسانندگی یک نانوحلقه کربنی می‌پردازیم. برای این منظور از روش تابع گرین در رهیافت تنگابست در تقریب نزدیک‌ترین همسایه و همچنین رهیافت لانداور در رژیم پاسخ خطی بهره می‌گیریم.

هادی‌های چپ و راست، توسط رابطه زیر داده می‌شود

$$G_W^{-1} = VI - H_W - \Sigma_L - \Sigma_R, \quad (9)$$

که در آن V انرژی الکترون ورودی، I ماتریس واحد و $\Sigma_{L(R)}$ ماتریس خودانرژی نانوحلقه ناشی از هادی‌های سمت راست (چپ) است و با رابطه زیر داده می‌شود:

$$\Sigma_{L(R)} = H_{WL(R)} G_{L(R)} H_{WL(R)} \quad (10)$$

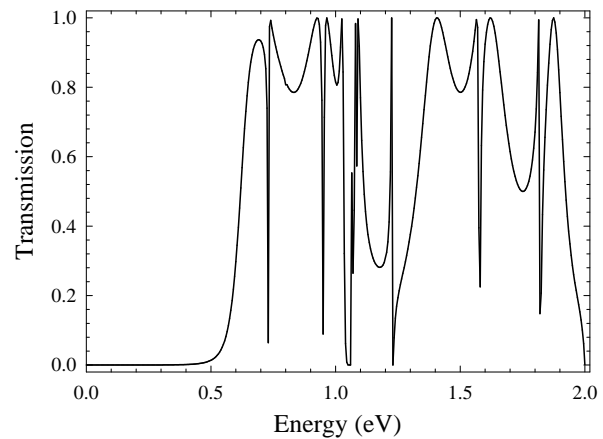
که در آن $G_{L(R)}$ ماتریس تابع گرین هادی راست (چپ) به تنهایی است. سرانجام ضریب عبور برای نانوحلقه متصل به دو هادی فلزی با استفاده از رابطه زیر به دست می‌آید [۹]

$$T(V) = 4 \text{Im} \Sigma_R \text{Im} \Sigma_L |(G_W)_{I,J}|^2, \quad (11)$$

که در آن منظور از $(G_W)_{I,J}$ درایه سطر I ام و ستون J ام تابع گرین نانوحلقه در حضور هادی‌ها است که با کمک رابطه (۹) قابل محاسبه است [۱۰]. حال با استفاده از فرمول‌بندی ارائه شده به محاسبه ترابرد نانوحلقه نشان داده در شکل ۱ می‌پردازیم.

۳. نتایج محاسبات عددی

در این بخش ضریب عبور الکترونی سامانه مورد بررسی را به صورت تابعی از انرژی ورودی در حالت‌های مختلف اتصال هادی‌ها به نانوحلقه، مورد بررسی قرار می‌دهیم. ابتدا پارامترهای مورد نیاز برای انرژی جایگاهی و پرش را به صورتی که در مقالات نظری رایج است، در نظر می‌گیریم [۱۱]. بنابراین انرژی جایگاهی تمام اتم‌های سامانه را برابر صفر اختیار کرده، انرژی پرش بین پیوندهای یگانه، دوگانه و سه‌گانه کربن - کربن را به ترتیب 0.8 ، 1.2 و 1.5 الکترون‌ولت انتخاب کرده و انرژی پرش اتصال‌ها را نیز 0.9 الکترون‌ولت در نظر می‌گیریم. همچنین انرژی پرش بین اربیتال‌های اتمی در هادی‌ها را برابر یک الکترون‌ولت فرض کرده و برای همه حالت‌ها هادی‌ها را به اتم‌های کربنی که پیوند سه‌گانه دارند، متصل می‌کنیم. در هنگام اتصال پیوند سه‌گانه شکسته شده، به صورت یک پیوند دوگانه بین اتم‌های کربن - کربن و یک پیوند یگانه بین هادی و حلقه در می‌آید. نمودار شکل ۲ رفتار ضریب عبور الکترونی نانوحلقه را برای حالتی که هادی سمت چپ به اتم شماره ۱۹ و هادی



شکل ۲. ضریب عبور الکترونی نانوحلقه بر حسب انرژی برای موردی که هادی ورودی به اتم شماره ۱۹ و هادی خروجی به اتم ۷ متصل است.

$$\tilde{V} = V_0 + \frac{S_1^\dagger}{(V - V_0)^2 - S_1^2} (V - V_0) + \frac{S_2^\dagger}{(V - V_0)^2 - S_2^2} (V - V_0), \quad (3)$$

$$\tilde{S} = \frac{S_1^\dagger S_1}{(V - V_0)^2 - S_1^2} + \frac{S_2^\dagger S_2}{(V - V_0)^2 - S_2^2}. \quad (4)$$

توجه شود در موردی که شار مغناطیسی Φ_B از نانوحلقه عبور می‌کند، انرژی پرش نسبت به مورد بدون شار در یک عامل $\exp(\pm iW)$ ضرب می‌شود. که $W = \Phi_B / \Phi_0$ و $\Phi_0 = h/2e$ کوانتای شار مغناطیسی است و علامت‌های مثبت و منفی به ترتیب برای پرش الکترون در جهت‌های ساعت‌گرد و پادساعت‌گرد است [۸]. در رهیافت تنگابست، هامیلتونی‌های هادی‌ها و اتصال‌های حلقه به هادی‌ها هنگامی که هادی سمت چپ به اتم I ام و هادی سمت راست به اتم J ام وصل هستند، به ترتیب زیر نوشته می‌شوند:

$$H_L = V_L \sum_{i=-\infty}^0 (|i\rangle\langle i|) + S_L \sum_{i=-\infty}^{-1} (|i\rangle\langle i+1| + \text{h.c.}), \quad (5)$$

$$H_R = V_R \sum_{i=N+1}^{\infty} (|i\rangle\langle i|) + S_R \sum_{i=N+1}^{\infty} (|i\rangle\langle i+1| + \text{h.c.}), \quad (6)$$

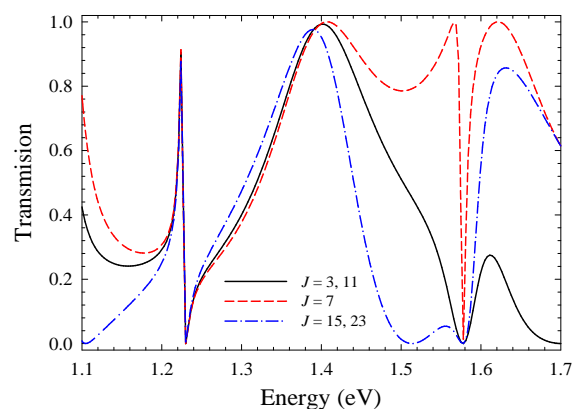
$$H_{WL} = S_{WL} (|0\rangle\langle I| + \text{h.c.}), \quad (7)$$

$$H_{WR} = S_{WR} (|J\rangle\langle N+1| + \text{h.c.}), \quad (8)$$

که در آن $N = 24$ تعداد جایگاه‌های بهنجارش شده در سامانه حلقوی، $S_{L(R)}$ انرژی پرش الکترون بین جایگاه‌های متوالی، $V_{L(R)}$ انرژی جایگاهی اتم‌ها در هادی سمت چپ (راست) و $S_{WL(R)}$ انرژی پرش الکترون بین نانوحلقه و هادی سمت چپ (راست) است. وارون تابع گرین این نانوحلقه در حضور

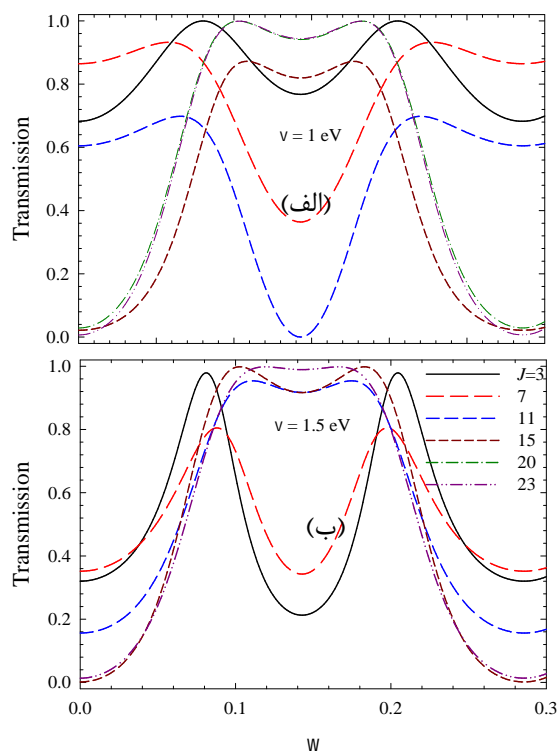
گفت که گاف به ساختار (تعداد، چینش و نوع پیوندها در یکا یاخته) سامانه مرکزی و قدرت اتصالها بستگی دارد، بدین معنا که اگر یک عامل خارجی به سامانه مرکزی متصل شود، باعث تقویت رسانش در گاف سامانه می‌شود. این عامل ممکن است تک‌ناخالصی یا تغییر محل اتصال هادی‌ها یا حلقه‌های بنزن باشد. در شکل ۳ ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی در بازه ۱٫۱ تا ۱٫۷ الکترون ولت برای مواردی که هادی ورودی به اتم شماره ۱۹ و هادی خروجی به اتم شماره ۳، ۷، ۱۱، ۱۵، ۲۳ متصلند، رسم شده است. دیده می‌شود که در نمودار ضریب عبور یک کاهش و افزایش ناگهانی حول انرژی ۱٫۲۳ eV وجود دارد که به آن تشدید فانو گفته می‌شود و منشأ آن وجود مولکول‌های شش اتمی بنزن در نانوحلقه است [۱۲]. تشدید فانو که ظهور یک زوج قله و دره متوالی با فاصله بسیار کوچک در طیف رسانش است، از تداخل‌های سازنده و ویرانگر توابع موج الکترونی در عبور الکترون از دو مسیر بالا و پایین مولکول بنزن شامل انرژی‌های پرش متفاوت ایجاد می‌شود. همچنین در انرژی ۱٫۵۸ eV، مستقل از مکان اتصال هادی خروجی، رسانش الکترونی سامانه به خاطر تداخل ویرانگر توابع موج الکترونی صفر است.

برای بررسی قدرت تونل زنی و وابستگی آن به محل اتصال هادی‌ها لگاریتم ضریب عبور را به صورت تابعی از انرژی برای مواردی که هادی ورودی به اتم ۱۹ و هادی خروجی به اتم ۳، ۷، ۱۱، ۱۵، ۲۰، ۲۳ متصل است، در غیاب میدان مغناطیسی و برای وقتی که شار مغناطیسی $f/3$ از حلقه اصلی نانوحلقه می‌گذرد، به ترتیب در شکل ۴ (الف) و (ب) آورده‌ایم. همان طور که در شکل ۴ (الف) دیده می‌شود، بیشترین و کمترین مقدار رسانش به ترتیب مربوط به مواردی است که هادی خروجی به اتم‌های ۲۰ و ۷ متصل هستند. به طور کلی می‌توان نتیجه گرفت که هر چه فاصله اتصال هادی‌ها به نانوحلقه از هم دیگر کمتر باشد رسانش تونل‌زنی بهتری را در ناحیه گاف انرژی سامانه مشاهده خواهیم کرد. در شکل ۴ (ب) دیده می‌شود که وجود میدان مغناطیسی باعث تغییر مکان ترازهای انرژی سامانه در طیف آن و در نتیجه تغییرات مشهود در نمودارهای ضریب عبور الکترونی شده است. همچنین وجود



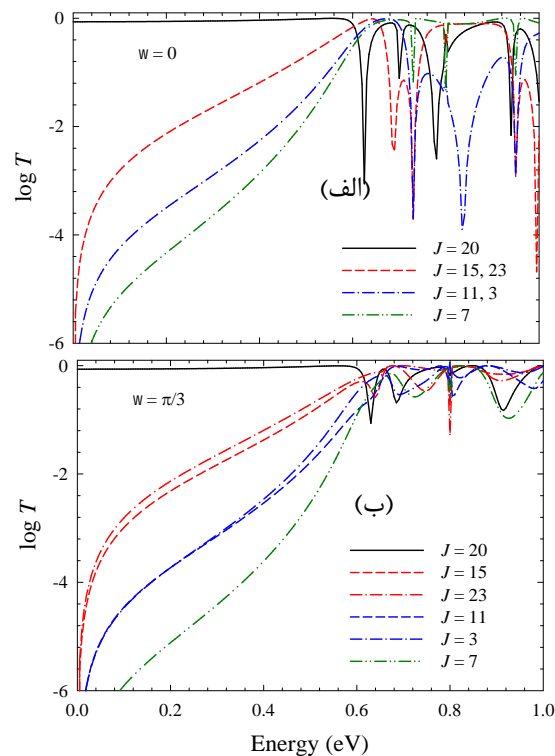
شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) ضریب عبور الکترونی نانوحلقه بر حسب انرژی الکترون ورودی برای مواردی که هادی ورودی به جایگاه ۱۹ متصل و هادی خروجی از جایگاه ۳، ۷، ۱۱، ۱۵، ۲۳ به مولکول وصل شده است.

سمت راست به اتم شماره ۷ شکل ۱ (ب) متصل شده است، نشان می‌دهد. به دلیل مقارن بودن ضریب عبور نسبت به انرژی صفر نمودار را فقط در قسمت مثبت محور انرژی رسم کرده‌ایم. اگر یک حلقه منزوی داشته باشیم، می‌توانیم ویژه انرژی‌های سامانه را با استفاده از هامیلتونی سامانه به دست آوریم، اما زمانی که این حلقه به هادی‌ها متصل باشد، ویژه انرژی‌های سامانه خوش تعریف نیست، به طوری که انرژی سامانه یک قسمت حقیقی و یک قسمت موهومی دارد. قسمت حقیقی مکان قله‌ها و قسمت موهومی پهنای قله‌ها را نشان می‌دهد [۷]. همان طور که دیده می‌شود حول انرژی صفر یک گاف انرژی وجود دارد که رفتار رسانش در آن تونل‌زنی است. می‌دانیم که نوار انرژی الکترونها پیوسته است. اما در مورد سامانه مرکزی در صورتی که به الکترونها متصل نباشد به دلیل محدودیت اندازه و تعداد اتم‌های سامانه، طیف انرژی آن گسسته بوده و شامل تعدادی تراز انرژی است. این ترازها به سادگی می‌تواند توسط قطری کردن هامیلتونی سامانه منزوی محاسبه شود. آنچه که باعث گاف می‌شود فاصله بین این ترازهای انرژی است که الکترون برای عبور از آن مجبور است تونل بزند. البته این ترازها هنگام اتصال الکترونها به شبه‌تراز مشهورند و کمی پهن شد و جابه‌جا می‌شوند. برای وقتی که فاصله بین ترازها زیاد باشد این جابه‌جایی و پهن‌شدگی نیز نمی‌تواند اثرات وجود گاف را خنثی کند. با توضیحات داده شده می‌توان



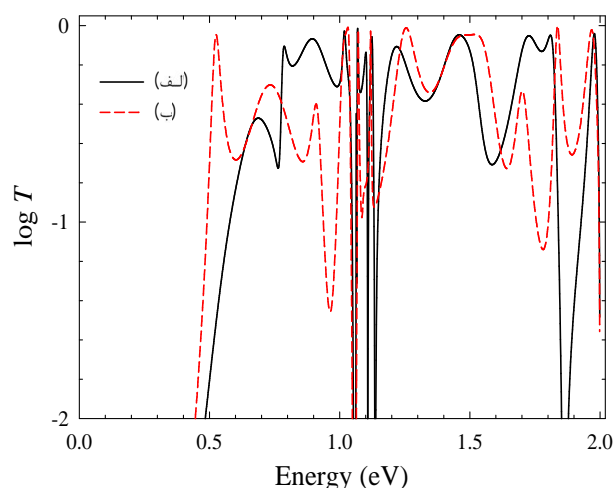
شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) ضریب عبور الکترونی به صورت تابعی از شار مغناطیسی گذرنده از نانوحلقه برای موارد مختلف اتصال هادی‌ها به آن در انرژی (الف) $v = 1 \text{ eV}$ و (ب) $v = 1.5 \text{ eV}$.

استفاده قرار می‌گیرد، زیرا میدان می‌تواند قله‌ها و دره‌های رسانش را نسبت به انرژی جابه‌جا کند. در ادامه با تغییرات شار مغناطیسی گذرنده از نانوحلقه در یک انرژی ثابت برای عبور الکترونی در این سامانه می‌پردازیم [۱۳ و ۱۴]. در شکل ۵ (الف) و (ب) ضریب عبور الکترونی به صورت تابعی از شار مغناطیسی در دو انرژی متفاوت و برای موارد متفاوت از اتصال هادی خروجی رسم شده است. تغییرات ضریب عبور الکترونی بر حسب w دارای دوره تناوب $f/11$ است و به همین دلیل نمودارها را برای یک دوره تناوب رسم کرده‌ایم. دیده می‌شود که تغییر شار مغناطیسی گذرنده از نانوحلقه بر مقدار ضریب عبور الکترونی بسیار مؤثر است. این شکل‌ها نشان می‌دهد که در یک شار میدان مغناطیسی مشخص، تغییرات ضریب عبور الکترونی نسبت به مکان هادی خروجی کاملاً به انرژی الکترون ورودی وابسته است و همان‌طور که دیده می‌شود برای $v = 1 \text{ eV}$ این تغییرات نسبت به $v = 1.5 \text{ eV}$ بیشتر است.



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) لگاریتم ضریب عبور بر حسب انرژی الکترون ورودی برای مواردی که هادی ورودی به جایگاه ۱۹ متصل و هادی خروجی می‌تواند از جایگاه $J = 3, 7, 11, 15, 20, 23$ به نانوحلقه وصل شود. (الف) $w = 0$ (ب) $w = f/3$.

میدان، نمودارهای مربوط به موارد $J = 3, 11$ و $J = 15, 23$ را که در غیاب میدان کاملاً بر هم منطبق بوده‌اند، از یکدیگر جدا کرده است. دلیل این امر به فیزیک متفاوت مسیرهای مختلف بعد از اعمال میدان مغناطیسی برای حرکت الکترون است. همچنین از قیاس نمودارهای شکل‌های ۴ (الف) و (ب) می‌توان نتیجه گرفت که اعمال میدان مغناطیسی باعث شده است برای همه موارد، رسانش تونل‌زنی در ناحیه گاف کمتر و رسانش تشدید در ناحیه تشدید بیشتر می‌گردد. شار مغناطیسی باعث تغییر فاز انرژی پرش و در نتیجه تغییر محل شبه‌ترازهای سامانه مرکزی می‌گردد. بنابراین ممکن است باعث تقویت یا تضعیف رسانش در یک بازه نوار انرژی الکترونها شود. بدین معنا که ممکن است شار مغناطیسی حتی بعضی از ترازهای سامانه مرکزی را از بازه مجاز انرژی الکترونها خارج یا وارد سازد. این خاصیت معمولاً برای کنترل رسانش در یک انرژی معین (یا پتانسیل خاص) توسط اعمال میدان مغناطیسی مورد

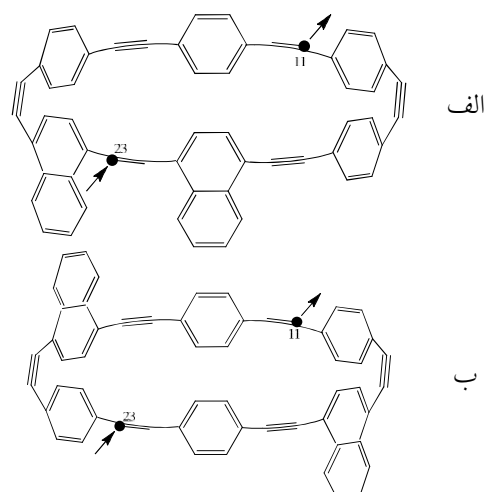


شکل ۷. (رنگی در نسخه الکترونیکی) $\log T$ بر حسب انرژی الکترون ورودی برای نانوحلقه‌های نشان داده شده در شکل‌های ۶ (الف) و (ب).

بعضی انرژی‌ها نیز ضریب عبور هر دو سامانه بر هم منطبق است. محاسبات نشان می‌دهد که سطح زیر منحنی مربوط به مورد (الف) نسبت به مورد (ب) بیشتر است. این سطح شاخصی از جریان عبوری سامانه است [۱ و ۱۵].

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله در رهیافت تنگابست و به روش تابع گرین رسانندگی الکترونی نانوحلقه‌های کربنی که بین دو هادی فلزی ساده محدود شده است، مورد بررسی قرار گرفت. رسانش این مولکول را برای موقعیت‌های مختلف اتصال هادی‌ها به آن در حضور و غیاب میدان مغناطیسی عمود بر صفحه اصلی بررسی کردیم. نتایج نشان می‌دهد که با نزدیک شدن هادی‌های ورودی و خروجی به هم رسانش بیشتری در ناحیه گاف انرژی داریم. همچنین وجود حلقه‌های بنزن در نانوحلقه باعث ایجاد تشدیدهای فانو در نمودار رسانش می‌شود. رسانش الکتریکی به وجود میدان مغناطیسی بسیار حساس است به طوری که نتایج نشان می‌دهد رسانش مواردی که طیف آنها در غیاب میدان کاملاً بر هم منطبق است، در حضور میدان از هم جدا شوند. ضریب عبور الکترونی در سامانه شامل نانوحلقه متصل به دو هادی ساده، نسبت به تغییر شار مغناطیسی با یک دوره تناوب مشخصی تغییر می‌کند که دانستن جزئیات آن می‌تواند به طراحی یک کلید مغناطیسی کمک کند. در نوع دیگر نانوحلقه



شکل ۶. دو نوع مولکول فولرنی شامل دو حلقه بنزن دوتایی.

بخصوص در شارهای $w = 0, f / 22$ این تغییرات شدیدتر است. همچنین تغییرات رسانش نسبت به تغییرات شار مغناطیسی بسیار مورد توجه و تأمل است به گونه‌ای که این تغییرات این سامانه را از نظر کاربردی بسیار مورد توجه قرار می‌دهد. مثلاً برای مقاصد کاربردی از جمله کلید مغناطیسی و یا آشکارسازهای میدان و یا تشخیص مکان اتصال به نانوحلقه می‌توان از این نکته کمک گرفت.

حال به بررسی رسانش دو نوع دیگر از نانوحلقه‌های کربنی [۴] که در شکل‌های ۶ (الف) و (ب) نشان داده شده‌اند، می‌پردازیم. در این نانوحلقه‌ها بعضی از حلقه‌های بنزنی دوتایی هستند. این نانوحلقه‌ها از اتم‌های شماره ۱۱ و ۲۳ به دو هادی ساده یک بعدی متصل شده‌اند. در اینجا نیز برای سهولت در محاسبه ضریب عبور الکترونی از روش باز بهنجارش استفاده می‌کنیم. همانند آنچه در قسمت قبل انجام شد، می‌توان هامیلتونی تمام اتم‌های حلقه‌ی بنزن را در رهیافت همسایگان اول نوشت و ضرایب توابع موج را به نفع تابع موج اتم کربنی که با نانوحلقه مرتبط است، حذف کرد. در شکل ۷ لگاریتم ضریب عبور به صورت تابعی از انرژی الکترون ورودی برای پیکر بندی‌های شکل ۶ در غیاب میدان مغناطیسی رسم شده است. دیده می‌شود که سامانه (الف) نسبت به سامانه (ب) در روی مرز گاف انرژی دارای رسانش بسیار ضعیف‌تری است. ولی در بقیه نوار انرژی‌ها این رفتار می‌تواند برعکس نیز شود. حتی در

می‌گردد. این رفتار سامانه مشابه یک رئوستای مولکولی است. نتایج این تحقیق نانوحلقه‌های کربنی را به عنوان یک کلید یا آشکار ساز مغناطیسی و حتی یک قطعه الکترونیکی در مقیاس مولکولی پیشنهاد می‌کند.

که دو حلقه بنزن در آن دوتایی هستند، تغییر محل این گونه بنزن‌ها در نانوحلقه باعث جابه‌جایی ضد تشدیدها در طیف رسانش می‌شود. نزدیک کردن بنزن‌های دوتایی به هادی‌های متصل باعث افزایش رسانش الکتریکی در ناحیه گاف انرژی

مراجع

- Cambridge (1995).
10. M Mardaani and K Esfarjani, *Physica E* **25** (2004) 119.
 11. D Nozaki, H M Pastawski, and G Cuniberti, *New J. Phys.* **12** (2010) 063004.
 12. T A Papadopoulos, I M Grace, and C J Lambert, *Phys. Rev. B* **74** (2006) 193306.
 13. M Mardaani and H Rabani, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **331** (2013) 28.
 - م. مردانی، ح ربانی و م برزوئی، «بررسی اثر آهارانوف-بوهم بر رسانش الکترونی یک سیم پلی استیلنی در حضور حلقه بنزی»، کنفرانس فیزیک ایران (۱۳۹۲).
 14. S Maiti, *Solid State Communications* **150** (2010) 1743.
 1. P Dutta, S Maiti, and S Karmakar, *Solid State Communications* **150** (2010) 1056.
 2. S Maiti, *Physics Letters A* **373** (2009) 4470.
 - م. سالارکیا، «کربن و ترکیب‌های بیشمار آن». محراب قلم (۱۳۸۳).
 4. T Kawase, K Tanaka, Y Seirai, N Shiono, and M Oda, *Angewandte Chemie International Edition* **115** (2003) 5755.
 5. F Khoeini and F Khoeini, *Physica E* **47** (2013) 298.
 6. S Maiti *Solid State Communications* **150** (2010) 1741.
 7. H Rabani and M Mardaani, *Solid State Communications* **152** (2012) 237.
 8. H Rabani and M Mardaani, *Solid State Sciences* **14** (2012) 1100.
 9. S Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", Cambridge University Press,