

در سالهای اخیر استفاده از مولکولها در الکترونیک، حوزهٔ جدیدی را در نانوفناوری گشوده است که به آن الکترونیک مولکولی می گویند. این فناوری که در آن از مولکولها به عنوان اجزاء فعال دستگاههای الکترونیکی استفاده می شود، در سالهای کنونی رشد سریعی به خود گرفته است و امید می رود که در آیندهٔ نزدیک بتوان به طور گسترده از مولکولها به عنوان عناصر اصلی دستگاههای الکترونیکی استفاده کرد [1].

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 [۲و۳]. پلهای مولکولی کاندیداهای بسیار

مهمی برای دستگاههای نانوالکترونیکی محسوب می شوند. از میان بسیاری از انواع مولکول ها، فولرین ... و ۲ به عنوان پل مولکولی مناسب تر است، چون پایین ترین اوربیت ال مولک ولی اشغال نشده آن (LUMO) در مقایسه با سایر مولکول های آلی در انرژی های نسبتاً پایین تری واقع است [۴]. بیست وجهی بریده شدهٔ ... و مقایسه با سایر مولکول های آلی بریده شدهٔ ... و مقایسه با سایر مولکول های آلی نیو مای نسبتاً پایین تری واقع است از ۲ بریده شدهٔ ... و معی بریده مندهٔ ... و معی بریده منده معی مان دوازده پنج ماعی مای منفرد منفرد، یعنی پیونده ای روی پنج ماعی ها و ۴ ۱/۴۰ برای پیونده ای دو گانه یا پیونده ای واقع بر شش ماعی هایی که با پنج ماعی ها اشتراک ندارند [۵].

از سوی دیگر نانولولههای کربنی نیز به دلیل ساختار و



خصوصیات منحصر به فرد خود کاندیداهای بسیار خوبی بـرای کار در مقیاس کوچکاند و خصوصیات منحصر به فرد آنها نیـز

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، نحوهٔ چینش اتمها در ساختار نانولوله، تعداد دیواره ها و نقصهای ساختاری از جمله خواصی هستند که در تعیین خواص الکتریکی آنها نقش بسزایی دارند [۶]. از آنجا که مقولهٔ ماختارهای کربنی مانند نانولولهها و فولرین به عنوان سازهای 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 مولکول های 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 می شود و ترابرد در رژیم انسداد کولنی <sup>(</sup> رخ می دهد. اما در حالتی که جفت شدگی بین الکترود و مولکول قوی باشد به رژیم بالستیک نزدیک می شویم.

ترتیب بندی مقاله به این صورت است: ابتدا مسئله مورد نظر را به صورت نظری فرمول بندی میکنیم. سپس نتایج محاسباتی را برای ترابرد الکتریکی همدوس از طریق پل مولکولی ...C با اتصالهای مختلف مولکول – الکترود و طول پیوندهای مختلف در حضور ولتاژ خارجی نشان میدهیم و در پایان یک نتیجه گیری مختصر خواهیم کرد.

سیستم مورد نظر مطابق شکل ۱ است. هامیلتونی کل سیستم در تقریب بستگیقوی را می توان به صورت  $H_{\alpha} = \sum_{n_{\alpha}} \varepsilon_{n_{\alpha}} c_{n_{\alpha}}^{+} c_{n_{\alpha}} + \sum_{\langle n_{\alpha}, n_{\alpha}' \rangle} t_{n_{\alpha}, n_{\alpha}'} \left( c_{n_{\alpha}}^{+} c_{n_{\alpha}'} + h.c. \right),$  (۱) نوشت [۷ و۸]. به طوری که هامیلتونی برای الکترودهای نانولولهٔ کربنی منفرد چپ و راست و سیم مولکولی منفرد به ترتیب با  $\alpha(=L,R,W)$  نشان داده می شود.

در رابطهٔ (۱)، *٤* انرژی پتانسیل جایگاه محلی<sup>۱</sup> است. در جمله آخر، (...) جمع روی اتمهای نزدیکترین همسایه را  $\pi$  نشان میدهد و  $t_{n_{\alpha},n_{\alpha}'}$  انتگرال همپوشانی بین اوربیتال های اتمهای کربن در الکترود چپ و راست و سیم مولکولی را نشان میدهد. همچنین اگر سیم مولکولی را C<sub>۶۰</sub> در نظر بگیریم، انتگرال همپوشانی در آن <sub>۲۵ م</sub>م به طول پیوند کربن- کربن (پیوندهای منفرد و دوتایی در فولرین طول های مختلف دارند) بستگی دارد: بنابراین، در این مورد عناصر ماتریسی همپوشانی مختلف را در نظر می گیریم: t<sub>n</sub> برای پیوندهای منفرد و t برای پیوندهای دوگانه. همچنین،  $c_{n_{\alpha}}^{+}(c_{n_{\alpha}})$  عملگر خلق  $n_{\alpha}$  (نابودی) برای یک الکترون در حالت شبه وانیر (وی اتـم  $n_{\alpha}$ است. جملهٔ  $\varepsilon_{n_{\alpha}}$  (انرژی جایگاه محلی روی اتم  $n_{\alpha}$ )، در بردارندهٔ اثر انرژی در محل اتم به تنهایی (E. na)، ولتاژ درگاه V<sub>g</sub> (که سطوح انرژی ناحیه مولکولی را جابهجا میکند) و پتانسيل خارجي U<sup>ext</sup> است. اين پتانـسيل الكتروسـتاتيك بـه علت یک میدان الکتریکی اعمال شده است و در ساختار مورد نظر به صورت زیر داده می شود:

$$\begin{split} U_{n_{\alpha}}^{ext} = \begin{cases} -eV_a \, / \, \mathrm{Y} & n \in \mathrm{I} \, \mathrm{V}_{\alpha} \\ V_g & n \in \mathrm{I} \, \mathrm{V}_{\alpha} \\ +eV_a \, / \, \mathrm{Y} & n \in \mathrm{I} \, \mathrm{I}$$

. در اینجا، فـرض مـیشـود کـه بـرهمکـنش مـستقیم بـین الکترودهای چپ و راست نادیده گرفته شده است و الکترودهـا

Y. On - site energy

۳. Pseudo- Wannier state

<sup>1.</sup> Coulomb blockade

فقط توسط سیم مولکولی از طریق H<sub>contacts</sub> برهم کنش میکنند. از این رو، جفت شدگی بین اتمهای لایهٔ انتهایی (سطحی) در الکترود و اتمهای در سیم مولکولی توسط هامیلتونی اتصال توصیف می شود:

$$\begin{split} H_{contacts} &= \sum_{\left\langle m_L, m_w \right\rangle} t_{m_L, m_w} \left( c_{m_L}^+ c_{m_w} + h.c. \right) \\ &+ \sum_{\left\langle m_R, m_w \right\rangle} t_{m_R, m_w} \left( c_{m_R}^+ c_{m_w} + h.c. \right), \end{split} \tag{(Y)}$$

به طوری که  $m_{L(R)}, m_w$  انرژی جفتشدگی بین الکترود چپ (راست) و سیم مولکولی است که آن را مساوی 't در نظر می گیریم. جمعها در معادلهٔ (۳) روی اتمهای لایهٔ انتهایی سطحی الکترود چپ (راست) و اتمهای مربوطه در سیم مولکولی بسته می شوند.

ضریب عبوردهی T با دانستن سطوح انرژی مولکولی، طبیعت و هندسه اتصالات می تواند محاسبه شود. این مسئله را می توان با بیان کردن ماتریس تابع گرین کل مسئله به صورت زیر مشاهده کرد [۷–۹]:  $G_w^{-1} = G_{*,w}^{-1} - \Sigma_L - \Sigma_R$ , (۴) به طوری که:

$$T(E) = \operatorname{*}\operatorname{Tr}\left\{\Delta_{L}(E)\operatorname{G}_{w}(E)\Delta_{R}(E)\operatorname{G}_{w}^{+}(E)\right\},\qquad(\Delta)$$
است که در آن

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

جملهٔ خودانرژی، ویژه مقادیر انرژی سیم مولکولی را تغییر میدهد. خودانرژیها، دارای عناصر ماتریسی غیر صفری روی جایگاههایی هستند که به طور مستقیم به الکترودها متصل شدند و بنابراین جایگزیده هستند [۷]. (Δ<sub>L(R</sub> طبق رابطهٔ زیر به تابع گرین الکترود نیم بینهایت ((g<sub>L(R</sub>) مربوط میشود و برابر

منفی قسمت موہومی خودانرژی الکترودہا است [۸]:  

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

که در آن  $\alpha = L, R$  و انرژی جفت شدگی بین الکترود چپ (راست) و سیم مولکولی مساوی 't است. بنابر رابطهٔ (۷) تابع گرین شبکه الکترود برای محاسبهٔ سهم خودانرژی نیاز است. تابع گرین شبکه الکترود با استفاده از عملگر گرین در پایهٔ

حالت محلي الكترود نيمبينهايت مي تواند محاسبه شود [٨]:

$$(g_{\alpha})_{n_{y},n_{y}'} = \left\langle n_{y} \left| \left( (E + i \circ^{+}) I - H \right)^{-1} \left| n_{y}' \right\rangle \right. \right. \\ = \sum_{k_{x},k_{y}} \frac{\chi_{k_{x}} \Phi_{k_{y}}(n_{y}) \chi_{k_{x}}^{*} \Phi_{k_{y}}^{*}(n_{y}')}{E + i \circ^{+} - E_{k_{x},k_{y}}},$$
(A)

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

برای الکترود نانولولهٔ کربنی آرمچیر (*l*,*l*)، تعداد اتـمهـای کربن در سطح مشترک *M* = ۲*l* است. در تقریب بستگیقـوی، انـرژی پاشـندگی الکتـرونهـای *π* مـشتمل بـر یـک نـوار پیوندی (–) و یک نوار غیر پیوندی (+) به صورت [۱۱و۱۲]:

$$E_{\pm}(k_x^j, j) = \varepsilon \pm t \sqrt{1 + \operatorname{fcos}\left(\frac{j\pi}{l}\right) \operatorname{cos}\left(\frac{k_x^j a}{r}\right) + \operatorname{fcos}^r\left(\frac{k_x^j a}{r}\right)},$$
(4)

 $\pi$  است، به طوری که انتگرال همپوشانی بین اوربیتالهای  $\pi$  اتمهای کربن در الکترود چپ و راست را با t نشان دادیم. تکانهٔ طولی به ناحیهٔ بریلوئن ( $\pi < k_x^j a < \pi$ ) محدود شده است و عدد موج عرضی  $1 \ge j \ge 1$  است. تابع موج عرضی به صورت ( $k_y^j n_y^j a$ ) است و کوانتش تکانهٔ عرضی الکترودها ایجاب میکند که  $k_y^j a = \frac{7\pi j}{M}$  باشد [۸].

تابع گرین سطحی شبکهٔ الکترود می تواند بـه صـورت زیـر نوشته شود

$$(g_{\alpha})_{n_{y},n_{y}'} = \frac{\gamma}{M} \sum_{j=\gamma}^{\gamma \ell} \phi_{j}(n_{y}) \tilde{G}^{j}(E) \phi_{j}^{*}(n_{y}'), \qquad (\gamma \circ)$$

$$\tilde{G}^{j}(E) = \frac{a}{\hbar\pi} \sum_{\beta=\pm} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_{x}^{j} \frac{\sin^{\mathsf{r}}(k_{x}^{j}a/\mathsf{r})}{E+i\,\mathfrak{o}^{+} - E_{\beta}(k_{x}^{j},j)}.$$
 (11)

انتگرال رابطهٔ (۱۱) می تواند به طور تحلیلی و به وسیلهٔ گسترش دادن  $k_x^j$  به صفحهٔ مختلط و جمع زدن مسیرهای عرضی حذف شده (موازی با محور موهومی) در طول مستطیل نیمه نامحدود در نیم صفحهٔ  $k_x^j > 1$  آ و در بازهٔ بین  $\pi/a - 1$  –  $\pi/a$  حل شود. برای محاسبهٔ قطبهای انتگرال، با مساوی صفر قرار دادن مخرج، یک معادلهٔ درجهٔ دو به صورت زیر به دست می آید:

$$(\mathbf{g}_{\alpha})_{n_{y},n_{y}'} = \left\langle n_{y} \left| \left( (E+i \circ^{+})\mathbf{I} - \mathbf{H} \right)^{-} \left| n_{y}' \right\rangle \right.$$
$$= \sum_{k_{x},k_{y}} \frac{\chi_{k_{x}} \Phi_{k_{y}}(n_{y})\chi_{k_{x}}^{*} \Phi_{k_{y}}^{*}(n_{y}')}{E+i \circ^{+} - E_{k_{x},k_{y}}},$$

به طوری که ریشههای این معادلیه همان قطبهای انتگرال هستند:

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

که به وضوح به ساختار نواری وابسته هستند، هرچند قطبها به دلیل وجود مقدار موهومی  $i \cdot i$  نباید روی محور حقیقی باشند. به طوری که  $1 \pm \beta$  است و مربوط به نوار پیوندی (-) و غیر پیوندی (+) است. با استفاده از روش حسابماندهها، انتگرال رابطهٔ (۱۱) به صورت تحلیلی محاسبه می شود:

$$\tilde{G}^{j}(E) = \frac{E - \varepsilon}{{}^{\mathbf{r}}t^{\mathbf{Y}}} \left[ \frac{{}^{\mathbf{Y}}}{{}^{\mathbf{r}}} + \frac{i\sin(q_{\beta}^{j}a/\mathbf{Y})}{\sqrt{\left(\frac{E - \varepsilon}{\mathbf{Y}t}\right)^{\mathbf{Y}} - \sin^{\mathbf{Y}}\left(\frac{j\pi}{l}\right)}} \right], \qquad (\mathbf{Y})$$

به طوری که انتخاب قطب شرکت کننده از طریق پارامتر شاخهای  $(E - \varepsilon)$  باید درون محاسبه در نظر گرفته شود. بنابراین با استفاده از تابع گرین طولی نیمه نامحدود (رابطهٔ (۱۲)) و قرار دادن آن در تابع گرین سطحی الکترود (رابطهٔ (۱۰)) و با استفاده از رابطهٔ (۷)، درنهایت خودانرژی می تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$\Sigma = \frac{1}{rl} \sum_{j=1}^{rl} \tilde{G}^{j}(E) \eta_{j/l} [t'], \qquad (17)$$

به طوري که:

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

هنگامی که دو الکترود به مولکول ...*C*و متصل می شوند، تعداد نقاط اتصال مولکول با الکترود به جهت گیری مولکول وابسته خواهد بود. از اینرو ممکن است اتصالات منفرد یا اتصال چندگانه رخ دهد [۵ و ۱۳].

در نهایت بعد از محاسبه ضریب عبوردهی الکتریکی با استفاده از رابطهٔ (۵)، جریان الکتریکی با استفاده از رابطهٔ لاندئور – بوتیکر به صورت زیر قابل محاسبه است [۱۴]:  $I = \frac{\gamma e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dET(E) [f_L(E) - f_R(E)],$  (۱۵) به طوری که عامل ۲ برای اسپین الکترون در نظر گرفته شده است. در اینجا،  $f_{L(R)}$  توابع توزیع فرمی الکترود چپ (راست) با پتانسیل شیمیایی  $\mu_{L(R)} = E_F - (+) eV_a / \tau$ 

در محاسبات عددی از مقددی زیر استفاده می کنیم: در محاسبات عددی از مقدر زیر استفاده می کنیم:  $E_F = \circ eV$ ,  $t_Y = 1/1t_y$ ,  $t_y = 7/0eV$  $F_F = 0$ ,  $V_F = 1$ ,  $v_y = 7$ ,  $v_y = 1$ ,  $v_$ 

در محاسبات عددی، جفت شدگی از طریق یک، پنج و شش اتم کربن از مولکول به الکترودها به عنوان محتمل ترین اتصالات در نظر گرفته شده اند [۱۵]. ولتاژ درگاه، سطوح مولکولی را نسبت به سطح فرمی الکترودها جابه جا می کند و از این رو ضرایب عبوردهی ممکن است به طور مهمی تغییر کنند. همچنین، ظهور قله های 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

www.SID.ir



 $t_{\gamma} = t_{\gamma}$  (b) و  $t_{\gamma} = 1_{\gamma} t_{\gamma}$  (a) در اتصال<br/>های مختلف در  $V_{a} = \gamma_{0} V$ 

جریان – ولت اژ یک مولک ول .<sub>۶</sub>C منفرد در بین الکترودهای نانولول ه کربنی نشان می دهد. کاهش در جریان به علت جایگزیدگی حالتها در دهانههای لولهها با اعمال بایاس به وجود می آید. جایگزیدگی باعث کاهش در همپوشانی چگالی حالتهای محلی الکترودها و سیم کوانتومی و در نتیجه کاهش در ضریب عبوردهی و جریان می شود [۹۲و ۱۷و ۱۸]. در اینجا به علت الکترودهای از جنس نانولوله کربنی، رفتار شبه پلهای جریان از بین می رود [۱۹].

همان طور که در شکل ۴ دیده می شود، در  $V_{0} = V_{G} = v_{0}$  و در هر سه نوع اتصال، پدیده NDR دیده می شود. این هنگامی روی می دهد که رسانش توسط حذف یک کانال رسانشی وارد شونده در ناحیه انتگرال گیری در رابطهٔ لاندئور کاهش می یابد [۲۰]. در هر سه نوع اتصال، ولتاژ آستانه NDR در حالت  $t_{1} = r_{1}$  کمتر از حالت سه نوع اتصال، ولتاژ آستانه NDR در حالت  $t_{1} = r_{1}$  کمتر از حالت کاهش جریان کماکان باقی می ماند تا زمانی که جابه جایی سطح فرمی یک الکترود باعث شود که کانال های دیگر برای رسانش شرکت کنند، بنابراین جریان دوباره شروع به افزایش می کند.



می شوند، بعضی از تشدیدها ممکن است کاملاً ناپدید شوند و جریان تغییر می کند. در واقع علت اختلاف بین جریان ها در اتصالات منفرد و چندگانه همین امر است.

همان طور که از شکلها دیده می شود به ازای بعضی از ولتاژهای درگاهی، مقدار جریان صفر می شود. 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 می گیرد. نتایج نشان می دهند که رسانش الکترون می تواند قویاً وابسته به ولتاژ درگاهی باشد. به ازای مقادیری از ولتاژ درگاهی که جریان صفر می شود، مولکول مانند یک نیم رسانا و برای مقادیر دیگر آن مانند یک فلز رفتار می کند.

برای اینکه درک عمیق تری از ترابرد الکترونی به دست آوریم، در شکل ۴ مشخصه جریان– ولتاژ را با استفاده از رابطهٔ (۱۵) به ازای V<sub>G</sub> = ۰/۰V و V<sub>G</sub> = ۲/۰V نشان می دهیم. شکل ۴ پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR)<sup>۱</sup> را در منحنی های

<sup>1.</sup> Negative differential resistance



0.5 3.00.0 0.5 0.0 1.0 1.5 2.0 2.5 1.0 1.5 2.0 2.5 3.0 Bias voltage (V) Bias voltage (V)  $t_r = 1/1t_1$  (سمت راست) در دو حالت  $V_G = 4/0$  (سمت چیپ) و  $V_G = 1/0^0$  (سمت راست) در دو حالت  $t_r = 1/1t_1$ (منحنی توپر) و t<sub>r</sub> = t<sub>1</sub> (منحنی خطچین) [۲۱].

در ادامه اهمیت ولتاژ درگاهی را در شارش جریان، روی منحنی جریان – ولتاژ بررسی می کنیم. برای  $V_G = 7/^{\circ}V$  و در میان می کنیم. برای  $V_G = 7/^{\circ}V$  و در میان می موارد اتصال تکتایی و ششتایی، جابه جایی در ضریب عبوردهی به اندازهٔ کافی برای شرکت دادن کانال های رسانشی در انتگرال گیری جریان قابل توجه نیست. در نتیجه، جریان بعد از یک ولتاژ آستانه کاهش می یابد [۲۲]. در این جا نیز، ولتاژ آستانه RDR در حالت  $T_1$  می کمتر از حالت  $T_1$  است. میوردهی برای شرکت دادن کانال های رسانشی می می می یابد از کار این می در ضریب آستانه RC در حالت  $T_1$  است. می یابد از کار این بعد محین با اعمال گیت در اتصال پنج تایی، جابه جایی در ضریب میوردهی برای شرکت دادن کانال های رسانشی در انتگرال گیری میوردهی برای شرکت دادن کانال مای رسانشی در انتگرال گیری میورد می برای شرکت دادن کانال مای رسانشی در انتگرال گیری می میورد می برای شرکت دادن کانال مای رسانشی در انتگرال گیری می میورد می برای شرکت دادن کانال مای رسانشی در انتگرال گیری می میورد می برای شرکت دادن کانال مای رسانشی در انتگرال گیری می میورد می برای شرکت دادن کانال مای رسانشی در انتگرال گیری می میورد می برای شرکت دادن کانال مای رسانشی در انتگرال گیری می میورد می برای شرکت دادن کانال مای رسانشی در انتگرال گیری می میورد می برای شرکت دادن کانال مای رسانشی در انتگرال گیری می شود، در مورد پنج اتیمال در مقایسه با حالت متناظر در می شود، در مورد پنج اتیمال در مقایسه با حالت متناظر در می میشود، در مورد پنج اتیمال در ولتاژ های بایاس می دلز می پدیده NDR

0.0

در هر دو حالت  $V_G = \gamma_0 V$  و  $V_G = \gamma_0 V$  عامل اصلی در

اختلاف بین اتصالات منفرد و چندگانه آثار تداخلی است. وقتی مولکول از طریق یک اتم کربن با الکترودها در تماس قرار می گیرد، عبور الکترون از مولکول به اثرات تونلزنی تشدیدی ارتباط پیدا می کند. با افزایش تعداد نقاط اتصال، اثرات تداخلی حول این نقاط مهم می شوند 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 اتصالی مختلف وارد مولکول می شوند، ممکن است یک جابه جایی فاز را تجرب کنند. از این رو، ممکن است یک تداخل سازنده یا ویرانگر در فرآیند انتشار الکترون از طریق مولکول رخ دهد.

همان طور که از شکل دیده می شود، وقتی تعداد اتمهای کربنی که در جفت شدگی بین مولکول و الکترودها شرکت می کنند افزایش یابد، مشخصهٔ جریان – ولتاژ، در ولتاژهای پایین رفتار اهمی از خود نشان می دهد. چنین رفتاری قابل انتظار

www.SID.ir

وجود دارند که به ازای آنها جریان صفر می شود (یعنی در این ولتاژها بار الکتریکی فیلتر می شود). بنابراین از آنچه در این بررسی به دست آمد می توان نتیجه گرفت که این وسیله در کاربردهای الکترونیکی می تواند به عنوان وسیلهٔ کلیدزنی جریان در مقیاس نانو<sup>1</sup> عمل کند. همان طور که نتایج نشان دادند به ازای درگاههایی که جریان صفر می شود، مولکول مانند یک نیم رسانا و به ازای درگاههای دیگر مانند یک فلز رفتار می کند. این نشان داده شده است که مشخصه جریان – ولتاژ در اتصالات تک تایی و چندتایی، به علت اثرات تداخلی کاملاً متفاوت منحنی های جریان – ولتاژ نانوساختار مورد نظر مشاهده کردیم منحنی های جریان – ولتاژ نانوساختار مورد نظر مشاهده کردیم که به علت کاهش یافتن همپوشانی چگالی حالتهای محلی الکترودها و سیم کوانتومی روی می دهد. بنابراین نتایج به دست آمده می تواند به طراحی ادوات الکترونیکی مبتنی بر مولکول

Dresselhaus, Phys. Rev. B 46 (1992) 1804.

- R Gutierrez, G Fagas, G Cuniberti, F Grossmann, R Schmidt, and K Richter, *Phys. Rev.* B 65 (2002) 113410.
- 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.
- A A Shokri, M Mardaani, and K Esfarjani, *Physica* E 27 (2005) 325.
- A A Shokri, and M Mardaani, *Solid State Commun.* 137 (2006) 53.
- 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.

است، زیرا در این وضعیت هیبریدشدگی با الکترودها قـویتـر است و مسیرهای بیشتری بـرای الکتـرونهـا جهـت شـارش از الکترود به مولکول وجود دارد.

.

در این مقاله، ساختار دو الکترود نیم بینهایت نانولوله کربنی دسته صندلی (۵و۵) جدا شده با مولکول .۶۰ را در نظر گرفتیم. به کمک روش تابع گرین، ضرایب عبوردهی الکترون فرودی را محاسبه کرده، سپس جریان الکتریکی را با استفاده از رابطهٔ لاندئور - 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 می توانند رسانش الکترون را در وسایل مولکولی مبتنی بر مولکول .۶۰ تغییر دهند. با توجه به شکلهای ۲ و ۳، هم در ولتاژهای درگاهی مثبت و هم در ولتاژهای درگاهی منفی، ولتاژهای

- 1. C Jaochim, J K Gimzewski, and A Aviram, *Nature* 408 (2000) 541.
- M A Reed, C Zhou, C J Muller, T P Burgin, and J M Tour, *Science* 278 (1997) 252.
- C Kergueris, J P Bourgoin, D Esteve, C Urbina, M Magoga, and C Joachim, *Phys. Rev.* B 59 (1999) 12505.
- S Nakanishi, and M Tsukada, *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001) 126801.
- 5. Y L Lin, and F Nori, Phys. Rev. B 53 (1996) 3.
- R Satio, G Dresselhaus, and M S Dresselhaus, "Physical Properties of Carbon notubes", World Scientific Publishing, London (1998).
- A A Shokri, and M Mardaani, *Chem. Phys.* 330 (2006) 287.
- 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

1. Nanoscale current switch