این مقاله طبق مجوز شماره ۹۳/۱۷/۸۰۵ مرکز منطقه ای اطلاع رسانی علوم و فناوری RICeST زیر نظر وزارت علوم، تحقیقات و فناوری در آن مرکز نمایه و منتشر شده است.

بررسی رسانش سیم کوانتومی و حلقه کوانتومی فولرین C60 و بورون نیترایدB24N24

اسدی، رضوان[1*]؛

[1]ارشد فیزیک ، دانشگاه علم و صنعت ایران ، تهران

چکیده

در این مقاله ویژگی های ترابردی سیم کوانتومی و حلقه کوانتومی C60 و B24N24 به عنوان اتصال مولکولی بین دوالکترود سیم کوانتومی نیمه بی نهایت کربنی ، با استفاده از تقریب بستگی قوی و نظریه لاندایر-بوتیکر بر اساس فرمول بندی تابع گرین مورد بررسی قرار گرفته است. در این بررسی، اگرچه رفتار پله ایی جریان نشان دهنده ترابرد بالستیک در هر دو سیستم است اما ویژگی های ترابردی آن ها کاملا با هم متفاوت می باشد. سیم کوانتومی C60 ولتاژ آستانه‌ای در حدود ۱ ولت دارد، در حالی که ولتاژ آستانه سیم کوانتومی B24N24 حدود ۳ ولت است و این یعنی امکان خاموش نگه داشتن این سیستم تا ولتاژ ۳ ولت وجود دارد.با این وجود جریان عبوری از این سیستم تقریبا ۵ برابر سیم کوانتومی C60 است. با اعمال ولتاژ درگاهی به سیستم‌ها، ولتاژ آستانه سیم کوانتومی C60 تغییری نمی کند در حالی که نه تنها ولتاژ آستانه سیم کوانتومی B24N24 صفر می شود، بلکه جریان آن نیز رفتار اهمی خواهد داشت و این امر منجر به عبور جریان های بسیار قابل توجه می شود. حلقه کوانتومی C60 ولتاژ آستانه ای در حدود ۲ ولت دارد و ولتاژ آستانه حلقه کوانتومی B24N24 تنها به مقدار جزیی از آن بیشتر است..با این وجود جریان عبوری از این سیستم تقریبا ۴ برابر حلقه کوانتومی C60 است. با اعمال ولتاژ درگاهی به این سیستم ها، ولتاژ آستانه حلقه کوانتومی C60 حدود ۱ ولت می شود، در حالی که نه تنها ولتاژ آستانه حلقه کوانتومی B24N24 صفر می شود، بلکه جریان آن نیز رفتار اهمی خواهد داشت و منجر به عبور جریان های بسیار قابل توجه می شود. بدین ترتیب با بهره گیری از سیستم های بورون تیترایدبه جای فولرین می توان در شرایط مشابه جریان های قابل توجه تری داشت اما به طور کلی ویژگی های ترابردی متفاوت این سیستم ها امکان استفاده ازهر دو سیستم را در ابزارهای مختلف الکترونیک مولکولی فراهم می آورد.

واژه های کلیدی: سیم و حلقه کوانتومی فولرینC60 ، سیم و حلقه کوانتومی بورون نیترایدB24N24 ، نظریه تابعی چگالی ، تقریب بستگی قوی، رهیافت لاندایر_بوتیکر، فرمولبندی تابع گرین

مقدمه

الکترونیک مولکولی و کاربرد آن در صنعت از مهمترین جنبه های فناوری نانو به شمار می رود[۱]. الکترونیک مولکولی امکان بررسی و تحقیق در مورد ویژگی‌های رسانش الکتریکی و گرمایی در ابعاد مولکول‌ها و به تبع آن بررسی مکانیسم‌های اساسی ترابرد الکترون را فراهم می آورد، از این رو مورد توجه ویژه قرار گرفته است[۲]. در سال های اخیر فولرین ها به عنوان کانال هدایت جران در ابزارهای الکترونیک مولکولی بسیار شایان توجه بوده اند، چرا که به دلیل داشتن هندسه خاص مولکول فولرین ، عبور جریان در این مولکول ها به مقدار قابل توجهی به جهت گیری مولکول وابسته است، همچنین به دلیل تقارن بالای این مولکول ها تبهگنی ترازهای مولکولی در آن ها زیاد است و این امر منجر به ایجاد جریان های قابل توجه می شود. علاوه بر این مولکول فولرین از مولکول هایی است که نقش مهمی در کوچک سازی قطعات الکترونیکی و بالا بردن حجم اطلاعات دارد[۳]. از طرفی بورون نیترایدها هم به دلیل پایداری قابل توجه در دماهای بالا، ثابت دی الکتریک کوچک، رسانایی گرمایی بالا و ویژگی‌های الکتریکی خاص در زمینه الکترونیک مولکولی مورد توجه قرار گرفته اند. لازم به ذکر است که بورون نیترایدها پایداری گرمایی و شیمیایی بیشتری نسبت به فولرین‌ها دارند[۴]. در این مقاله ویژگی های ترابردی سیم کوانتومی و حلقه کوانتومی فولرین C60 ،متشکل از ۲۰ شش ضلعی و ۱۲ پنج ضلعی، و نیز سیم کوانتومی و حلقه کوانتومی بورون نیتراید B24N24 با تقارن S8، متشکل از ۲ هشتضلعی و ۸ چهارضلعی و ۱۶ شش ضلعی، مورد بررسی و مقایسه قرار گرفته است. علت انتخاب این مولکول ها پایداری بیشتر آن ها در مقایسه با انواع فولرین ها و بورون نیترایدهاست [1, 5].

در این بررسی ها ترابرد و جریان سیم و حلقه کوانتومی C60 متشکل از ۴ C60 مورد توجه قرار گرفته است، بدین ترتیب که هر C60 حکم یک نقطه شبکه از سیم یا حلقه کوانتومی را دارد. اتصال بین نقاط شبکه همانگونه که شکل (a-۱) آمده است، به این صورت است که در هر یک از C60 ها یکی از کربن ها پیوند دوگانه خود را شکسته و با کربن مشابه C60 کناری پیوند یگانه برقرار می کند، این اتصال پایدارترین اتصال بین C60 هاست و در سیم و حلقه کوانتومی متشکل از نقاط شبکه C60 در این مقاله در نظر گرفته شده است. در ادامه ترابرد و جریان سیم و حلقه کوانتومی B24N24 متشکل ا ز ۴