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 ویژگی های ترابردی فولرین C60 و بورون نیترایدB24N24 در حضور الکترود نانولوله کربنی آرمیچر(۵و۵) نیمه بی نهایت

اسدی، رضوان[1*]؛

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

چکیده

در این مقاله ویژگی های ترابردی C60 و B24N24 به عنوان اتصال مولکولی بین دوالکترود نالوله آرمیچر(۵و۵) 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. از آنجایی که حرکت الکترون ها در نانولوله های کربنی در دو راستای عمود بر هم صورت می گیرد، رفتار ترابردی متفاوتی نسبت به سیم های کوانتومی خواهیم داشت، که در این مقاله مورد توجه 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. فولرین C60 ولتاژ آستانه‌ای در حدود ۱ ولت دارد، در حالی که ولتاژ آستانه بورون نیتراید B24N24 بیشتر از 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 با فولرین C60 برابر است. . با اعمال ولتاژ درگاهی، ولتاژ آستانه B24N24 صفر می شود، بدین ترتیب این سیستم به حالت رسانایی می رسد و به ازای ولتاژ بایاس ۵ ولت جریانی در حدود ۲۰ میکروآمپر از خود عبور می دهد. اعمال ولتاژ درگاهی ولتاژ آستانه سیستم C60 را تغییر نمی دهد و سیستم با حفظ خاصیت نیمرسانایی، تا ولتاژ آستانه ۱ آمپر خاموش است. اما باز با این حال جریان این سیستم، به ازای ولتاژ بایاس ۵ ولت، بیشتر از ۴۰ میکروآمپر است. با توجه به نتایج می‌توان گفت که اگرچه با بهره گیری از سیستم فولرین C60 جریان بیشتری خواهیم داشت، اما با توجه به ویژگی های ترابردی متفاوت این سیستم ها امکان استفاده از هر دو سیستم ، در ابزارهای مختلف الکترونیک مولکولی وجود دارد.

واژه های کلیدی: فولرینC60 ، بورون نیترایـد B24N24 ، نالولـه آرمیچـر، نظریـه تـابعی چگـالی ، تقریـب بسـتگی قـوی، رهیافـت لانداير_بوتيكر، 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 هشت ضلعی 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[۱, ۴]

نانولوله کربنی ، یکی از ساختارهای تشکیل شده از گرافین میباشد که از لوله کردن یک لایه گرافین بدست می آید. در این فرآیند باید به بردار کایرال که از روی هم قرار دادن ابتدا و انتهای آن در هنگام لوله