

بررسی اثرات اتصال به الکترودهای فلزی بر گاف انرژی مولکول C_{60}

عربی دره در، مهوش^۱؛ شاه طهماسبی، ناصر^۱

^۱دانشکده علوم دانشگاه فردوسی، خیابان وکیل آباد، مشهد

چکیده

در این پژوهش ساختار الکترونیکی مولکول C_{60} با استفاده از محاسبه چگالی حالت های الکترونی بر اساس روش تابع گرین را بررسی می کنیم. ما این محاسبات را در حالت قبل و بعد از اتصال مولکول به الکترودهای فلزی انجام دادیم و از این محاسبات ما مشاهده می کنیم که ماده از حالت نارسانا به حالت نیمه رسانا و حتی رسانا در اثر جابجایی و پهن شدگی ترازهای مولکولی تغییر می کند.

Study of effects of connection to the metal electrodes on energy gap of C_{60} molecule

Arabi dare dor ,Mahvash¹;Shahtahmassebi,Nasser¹

¹ Department of Sciences, University of Ferdowsi, Mashhad

Abstract

In this research we study the electronic structure of C_{60} molecule, using calculation of density of states, is based on Green function theory. We do these calculations before and after molecule is connected to the metallic electrodes and through these calculation we observed the material changes from insulator to semiconductor and even to conductor due to shift and broadening of molecular levels.

PACS No 81

الکترونیکی بررسی شده اند و منشا رسانندگی از طریق مولکول ساختار الکترونی ماده است. در این میان فولرین یکی از شناخته شده ترین و پایدارترین ساختارهای مولکولی است. فولرین های کربنی از صفحه ای تشکیل شده اند که در آن حلقه های شش ضلعی به هم متصل شده و با حلقه های پنج ضلعی از هم جدا شده اند و این

مقدمه

قطعات الکترونیکی مولکولی در مقیاس نانو توجه زیادی را در سال های اخیر به خود جلب کرده است [1]. مطالعات تجربی و تئوری با هدف فهمیدن فیزیک قطعات نانوالکترونیکی انجام شده - اند [2 و 3]. رسانندگی مولکول های زیادی برای کاربرد در قطعات

ماتریسی پرش مختلفی را در نظر می‌گیریم: t_1 مربوط به پیوند های یگانه و t_2 مربوط به پیوندهای دوگانه است. در مورد دوپارشی پیوندی استفاده از $t_2 \cong (r_1/r_2)^2 t_1$ [9] منطقی است. تابع گرین مولکول C_{60} که به دو الکتروود فلزی جفت شده است (چشمه و مخزن) در حضور ولتاژ بایاس به این صورت است:

$$\hat{G}_C(\varepsilon) = [\varepsilon \hat{1} - \hat{H}_C - \Sigma_L(\varepsilon) - \Sigma_R(\varepsilon)]^{-1} \quad (2)$$

که \hat{H}_C هامیلتونی مولکول در غیاب الکتروودهاست و Σ_L و Σ_R ماتریس‌های خودانرژی است و می‌توانند این گونه بیان شوند [10]:

$$\Sigma_{L,R} = \frac{-\hat{t}^2}{t_0} \exp\left(i \arccos\left(1 - \frac{E-A}{2t_0}\right)\right)$$

که در آن τ انتگرال بین مولکول و الکتروودها، t_0 انتگرال پرش در طول رشته الکتروود و E انرژی الکترون و A ثابت اختیاری است. چگالی حالت‌های الکترونی از معادله زیر محاسبه می‌شود [11]:

$$\rho_n = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_m(\varepsilon) \quad (4)$$

که در آن برای محاسبه چگالی حالت‌های الکترونی در حالتی که مولکول به الکتروودها متصل می‌شود از تابع گرین معادله (2) استفاده می‌شود و برای محاسبه چگالی حالت‌های الکترونی مولکول در زمانی که مولکول به الکتروودها متصل نیست از همان معادله (2) استفاده می‌شود ولی با این تفاوت که جملات مربوط به خود انرژی‌ها را در نظر نمی‌گیریم.

نتایج و بحث

در محاسبات عددی ما $t_1=2.5\text{eV}$ [12]، $t_2=1.1t_1$ [9] و $E_F=0.0\text{eV}$ و $T=300\text{K}$ قرار می‌دهیم. ابتدا چگالی حالت‌های الکترونی (DOS) فولرین را بدون اتصال به الکتروودها به منظور بررسی گاف نمودارها و در نتیجه بررسی ویژگی‌های ماده را در فاصله محدودی رسم می‌کنیم.

حلقه‌های پنج‌ضلعی کمک می‌کنند که ساختار به قفس توخالی کروی تبدیل شود و این ساختارها از قدیم با کمینستر فولرین نامیده می‌شدند. یکی از مولکول‌های فولرین که بیشتر شناخته شده است مولکول C_{60} است. پیوندها در C_{60} دوزخ مختلف هستند. طول پیوند در پنج‌ضلعی 1.46 \AA و پیوند بین پنج‌ضلعی‌ها 1.4 \AA است. این مولکول به طور تصادفی در دانشگاه رایس در اواخر دهه 1980 کشف شد [4] و تقارن بالای ایکوساهدرن، I_h ، را دارد که در آن اتم‌های C به طور یکسانی در جایگاه‌هایشان با هیبریدشدگی sp^2 قرار گرفته‌اند. الکترون‌ها در حلقه‌های شش‌ضلعی در سراسر مولکول جایگزیده نیستند [5]. بنابراین هنگامی که این مولکول ایزوله است، (یعنی به الکتروودهای فلزی متصل نیست) نارسانا است [6]. با این وجود دیده می‌شود که حتی از این مولکول در ترانزیستورها استفاده می‌شود [7]. از این رو در این مقاله قصد بررسی تغییر ویژگی‌های ساختار الکترونی C_{60} را داریم که به الکتروودها متصل شد است. همچنین در مرجع [8] در مشخصه $I-V$ مربوط به این مولکول دیده شده است که زمانی که مولکول با پنج اتصال به الکتروودهای فلزی متصل شود رفتار آن فلزمانند است که در این پژوهش قصد بررسی علت این تغییر رفتار را داریم و این محاسبات با استفاده از مدل تنگ‌بست و روش تابع گرین غیر تعادلی انجام شده است.

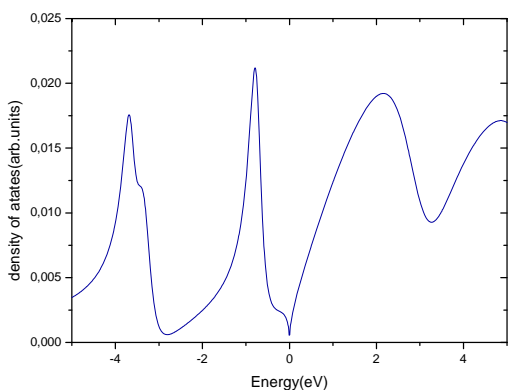
مدل و روش

ما فرض می‌کنیم که سیستمی شامل مولکول C_{60} است که به الکتروودهای فلزی یک‌بعدی چسبانده شده است. هامیلتونی سیستم در تقریب تنگ‌بست با یک اوربیتال در هر اتم شرح داده می‌شود [8]:

$$\hat{H}_M = \sum_i \varepsilon_i \hat{c}_i^+ \hat{c}_i - \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} \hat{c}_i^+ \hat{c}_j \quad (1)$$

ε_i انرژی جایگاهی است و صفر قرار داده می‌شود به جز در ناحیه گیت که برابر با eV_G است. $\hat{c}_{i\sigma}^+$ ($\hat{c}_{i\sigma}$) عملگر خلق (نابودی) برای تک الکترون در مکان i و σ عنصر ماتریس پرش بین مکان‌های i و j نزدیک‌ترین همسایه‌ها است. شدت پرش در مولکول C_{60} به طول پیوند $C-C$ بستگی دارد. بنابراین ما عناصر

از شکل 2 دیده می‌شود که زمانی که مولکول به الکترودهای فلزی از طریق تک اتصال وصل می‌شود گاف هومو-لومو مربوط به مولکول C_{60} که به الکترودها متصل شده است تقریباً 1.5 eV است و با محاسبات مرجع [13] مطابقت دارد. گاف بدست آمده از حالت بدون اتصال به الکترودها کمتر است که این تغییر نشانگر آن است که ترازهای مولکولی جابجا شده‌اند و نشان دهنده این است که مولکول در حالت اتصال به الکترودها به حالت نیمه رسانا در می‌آید و همچنین قله‌ها پهن‌تر شده‌اند که این به علت پهن‌شدگی ترازهای مولکولی در اثر اتصال است.



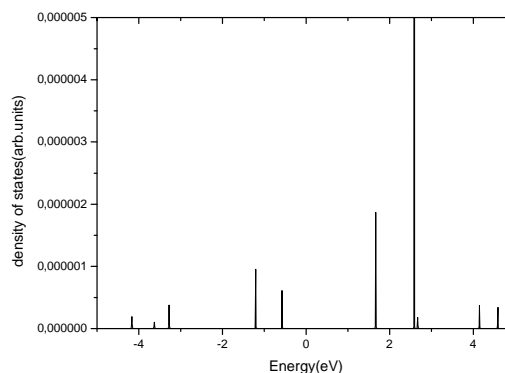
شکل 3 نمودار چگالی حالت‌های الکترونی مولکول C_{60} در حالت پنج اتصالی به الکترودهای فلزی که در آن پنج اتم کربن به هر الکترودهای متصل است.

برای بررسی مورد پنج اتصالی که در آن اتصال به الکترودهای فلزی از طریق پنج اتم کربن است سطح مقطع الکترودها را محدود در نظر می‌گیریم. در شکل 3 دیده می‌شود که گاف هومو-لومو غیر صفر است و در نتیجه مولکول رسانا شده است.

نتیجه گیری

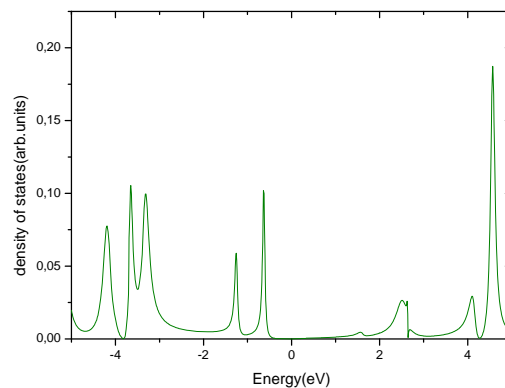
از محاسباتی که در این مقاله انجام شد، نتیجه ای که به وضوح دیده می‌شود این است که نمی‌توان به یک ماده به طور مطلق نسبت رسانا یا نیمه رسانا یا رسانا را داد. زیرا همان‌طور که دیده شد در اثر اتصال به الکترودها ترازهای مولکولی پهن و جابجا می‌شوند و در نتیجه گاف ماده تغییر می‌کند. همچنین در این مقاله قابلیت فوق العاده استفاده از مولکول C_{60} نشان داده شد.

از شکل 1 دیده می‌شود که گاف هومو-لومو مربوطه که منظور از هومو(بالترین اوربیتال مولکولی اشغال شده) و لومو(پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده) است تقریباً 2 eV است و این نتایج با محاسبات مرجع [6] مطابقت دارد. به معنی این است



شکل 1 نمودار چگالی حالت‌های الکترونی مولکول C_{60} در حالت بدون اتصال به الکترودهای فلزی

که مولکول C_{60} قبل از اتصال به الکترودها رسانا است. همچنین در این نمودارها دیده می‌شود که ترازهای مولکولی به علت این که قله‌های چگالی حالت‌های الکترونی هیچ پهنایی ندارند گسسته هستند.



شکل 2 نمودار چگالی حالت‌های الکترونی مولکول C_{60} در حالت تک اتصال به الکترودهای فلزی که در آن تنها یک اتم کربن به هر الکترودهای متصل است.

مراجع

- [1] A. Nitzan .; M. A. Ratner ." *Electron Transport in Molecular Wire Junctions*". *Science*, **300**, 1384 (2003)
- [2] H. He .; R. Pandey .; S. P.Karna, " *Electronic Conduction in a Model Three-Terminal Molecular Transistor. Nanotechnology*" , **19**, 505203.(2008)
- [3] S. Ravindran .; S. Chaudhary .; B. Colburn .; M. Ozkan .; C. S. Ozkan, " *Covalent Coupling of Quantum Dots to Multiwalled Carbon Nanotubes for Electronic Device Applications. Nano Lett*" , **3**, 447 (. 2003)
- [4] H. W. Kroto .; J. R .Heath .; S. C. OBrien .; R. F. Curl .; R. E. Smalley, ." *C60: Buckminster Fullerene*". *Nature*, **318**, 162 (1985)
- [5] Xiaoliang Zhong ;Ravindra Pandey; Alexandre Reily Rocha; Shashi P. Karna," *Can Single-Atom Change Affect Electron Transport Properties of Molecular Nanostructures such as C₆₀ Fullerene?*" *J. Phys. Chem. Lett*, **1**, 1584(. 2010)
- [6]]" *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*", edited by M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and P.C. Eklund (Academic Press, New York, 1996).
- [7] H. Park.; J. Park; A.K.L. Lim; E.H. Anderson; A.P. Alivisatos and P.L. McEuen," *Nano mechanical oscillations in a C₆₀ transistor*" *Nature (London)* **407**, 57(2000).
- [8] Alireza Saffarzadeh," *Electronic transport through a C₆₀ molecular bridge: The role of single and multiple contacts*" , *J. Appl. Phys.* **103**, 083705 (2008) .
- [9] E. Manousakis, " *Electronic structure of C₆₀ within the tight-binding approximation*" *Phys. Rev. B* **44**, 10991 (1991); " *Erratum: Morphological instability of a terrace edge during step-flow growth*"; *Phys. Rev. B*, **48**, 2024 (1993).
- [10] S. Datta, " *Quantum Transport: Atom to Transistor*" (Cambridge University Press, Camberige, 2005).
- [11] مجتبی اشهدی، "بررسی اثر عوامل خارجی (آلاینده‌ها) بر خواص ترابرد الکترونی ساختار فلز-PA-tran-فلز (مطالعات عددی)"، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، تیر 1389 .
- [12] M. Paulsson, and S. Stafström, " *Conductance manipulation at the molecular level*" *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 3555 (1999)
- [13] A .Oshiyama .; S. Saito .; N. Hamada .; Y. Miyamoto ." *Electronic Structures of C60 Fullerenes and Related Materials*". *J. Phys. Chem. Solids*, **53**, 1457 (1992)