

# نانوسویچ مبتنی بر نانولوله‌های کربنی دو دیواره تلسکوپی و اثر نقص تهی جا بر عملکرد الکتریکی آن

ابراهیم آقابراریان<sup>۱</sup>، علی شاه‌حسینی<sup>۲</sup>

دانشجوی کارشناسی ارشد برق الکترونیک، دانشگاه آزاد اسلامی قزوین

استادیار دانشکده برق، دانشگاه آزاد اسلامی قزوین، Shahhoseini@qiau.ac.ir

تاریخ دریافت: ۹۳/۱۲/۱۸ تاریخ پذیرش: ۹۴/۵/۱۷

## چکیده

در این مقاله، هدایت الکتریکی و ترابرد الکترون نانولوله‌های کربنی دو دیواره تلسکوپی (TDWCNTs) در حالت بدون نقص و همچنین در حضور نقص ساختاری تهی جا با استفاده از مدل تنگ‌بست (TB) و تابع گرین غیرتعدادی (NEGF) شبیه‌سازی شده و مورد تحلیل و بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی نشان می‌دهد که حرکت تلسکوپی دیواره‌ها نسبت به یکدیگر باعث ایجاد دره‌ها و قله‌های متناوب در هدایت الکتریکی افزاره می‌شود. هریک از این دره‌ها و قله‌ها را می‌توان به ترتیب به عنوان هدایت حالت پایین (حالت خاموش) و هدایت حالت بالا (حالت روشن) در نظر گرفت. بنابراین می‌توان افزاره‌ی TDWCNTs را به عنوان یک نانوسویچ تلسکوپی در سیستم‌های نانوالکترومکانیکی (NEMS) مورد استفاده قرار داد. همچنین نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که اعمال یک نقص تهی جا در ساختار افزاره می‌تواند تا میزان ۵۰٪ باعث کاهش هدایت الکتریکی افزاره شود. میزان کاهش هدایت به چگالی و مکان نقص وابسته است. در صورتیکه چگالی نقص در ساختار کم باشد، هر چند هدایت و در نتیجه جریان افزاره تا حدی کاهش می‌یابد اما به دلیل ثابت ماندن تقریبی نسبت جریان حالت روشن به جریان حالت خاموش، عملکرد افزاره به عنوان یک نانوسویچ چندان تحت تاثیر قرار نمی‌گیرد؛ اما اگر چگالی نقص در ساختار زیاد شود هدایت حالت روشن به شدت کاهش یافته، در نتیجه با افزایش امیدانس افزاره، عمل وصل نانوسویچ به درستی انجام نمی‌شود.

## کلیدواژه

نانولوله‌های کربنی دو دیواره تلسکوپی، نانوسویچ، تابع گرین غیرتعدادی، هدایت الکتریکی، نقص تهی جا.

## مقدمه

[۱۳ و ۱۲]، نانوترمومتر [۱۴]، نانورله [۱۵ و ۱۴] پیشنهاد یا ساخته شده است. در نانولوله‌های کربنی چند دیواره تلسکوپی، برهمکنش بین لایه‌های نقش کلیدی در پایداری ساختار و خواص ترابرد الکترون آن دارد [۱۶]. این نانوساختارها، به دلیل برهمکنش بین دیواره‌ها دارای ترابرد الکترون بسیار پیچیده‌تری در مقایسه با نانولوله‌های کربنی تک دیواره می‌باشند. وجود برهمکنش و ترابرد الکترون بین لایه‌ای از عوامل مهم در کاربردهای بالقوه این پیوندهای نانوالکترونیک می‌باشند. نانولوله‌های کربنی که به عنوان ساختارهای لانه‌زنبوری یک بعدی توصیف می‌شوند، به دلیل وجود نقص‌های ساختاری کامل نیستند. تولید و تهیه نانولوله‌های کربنی و یا هر گونه دستکاری این ساختارها برای یک کاربرد خاص شامل مجموعه‌ای از فرآیندهای شیمیایی و مکانیکی می‌باشد که می‌تواند باعث ایجاد نقص در

نانولوله‌های کربنی (CNTs) به دلیل لغزش و چرخش آزادانه دیواره‌ها نسبت به یکدیگر [۱]، خواص مکانیکی و الکتریکی عالی و منحصر به فرد [۲] کاندیدای بسیار مناسبی برای سیستم‌های نانوالکترومکانیکی (NEMS) هستند. با ساخت نانولوله‌های کربنی چند دیواره تلسکوپی (TMWCNTs)<sup>۳</sup>، نوع جدیدی از پیوندهای نانولوله‌های کربنی با حرکت و لغزش تلسکوپی دیواره‌ها نسبت به یکدیگر، انواع مختلفی از ادوات برای کاربرد در سیستم‌های نانوالکترومکانیکی به صورت ثوری یا مدل آزمایشگاهی از قبیل نانوموتور [۳ و ۴]، نانودریل [۵ و ۶]، نانوحافظه غیرفرار [۷ و ۸]، نانوسنسور کششی [۹]، نانوسویچ [۱۰ و ۱۱]، اسیلاتور گیگاهرتز

۱ - Carbon nanotubes

۲ - Nanoelectromechanical system

۳ - Telescoping multi-walled carbon nanotubes

ایجاد می‌شود که سه پیوند کوالانسی یک اتم کربن شکسته شده و اتم از مکان اولیه خود خارج می‌شود. برای مدلسازی افزاره، آنرا به سه ناحیه تقسیم می‌کنیم. الکتروُد چپ، الکتروُد راست و ناحیه مرکزی افزاره. هر یک از الکتروُد‌های چپ و راست با تکرار سه سلول واحد کربنی و هریک از نانولوله‌های داخلی و بیرونی در ناحیه مرکزی افزاره با ۱۶ سلول واحد که هر یک از این سلول‌های واحد در واقع خود یک ابرسلول می‌باشد، مدل شده‌اند. سلول واحدی که برای هر یک از الکتروُد‌ها و نانولوله‌های داخلی و بیرونی افزاره در نظر گرفته شده، در شکل (۲) نشان داده شده است. در افزاره TDWCNT، نانولوله‌ی بیرونی (۸، ۸) را بدون حرکت در نظر گرفته، درحالی‌که نانولوله‌ی داخلی (۴، ۴) می‌تواند در طول محور نانولوله‌ها دارای حرکت تلسکوپی باشد. بنابراین میزان همپوشانی دیواره‌ها بستگی به میزان لغزش نانولوله‌ی داخلی دارد. طول ناحیه مرکزی افزاره زمانیکه همپوشانی نانولوله‌ی داخلی و بیرونی صفر باشد، ۸ nm می‌باشد. برای جابجایی نانولوله‌ها و کنترل حرکت نسبی آنها از روش‌های مختلفی استفاده می‌شود از قبیل:

- ۱- استفاده از میدان مغناطیسی زمانیکه دیواره‌ی متحرک، فلز و دیگر دیواره‌ها نیمه‌هادی باشند.
  - ۲- قرار دادن یون‌های فلزی در داخل دیواره‌ی متحرک و کنترل حرکت توسط میدان الکتریکی.
  - ۳- استفاده از فشار گاز گرم بین دیواره‌ی متحرک و دیواره‌ی ثابت.
  - ۴- تبدیل دیواره‌ی متحرک به یک دوقطبی الکتریکی با استفاده از دهنده‌ها<sup>۹</sup> و گیرنده‌های<sup>۱۰</sup> الکترون در دو انتهای نانولوله و سپس کنترل حرکت نانولوله با استفاده از یک میدان الکتریکی غیر یکنواخت.
- برای اطلاعات بیشتر به مرجع [۲۱] رجوع شود.
- محاسبات ترابرد کوانتومی الکترون با استفاده از بسته نرم‌افزاری ATK<sup>۱۱</sup> [۲۲] انجام شده است. در این محاسبات از ترکیب مدل تنگ‌بست اسلاتر-کاستر<sup>۱۲</sup> [۲۳] و روش تابع گرین غیرتعدالی [۲۴] استفاده شده است. در مدل اسلاتر-کاستر، از تابع پایه هنکاک<sup>۱۳</sup> برای محاسبه‌ی همپوشانی افزاره استفاده شده است.

ساختار شود [۱۷]. هرچند در زمان تولید نانولوله‌ها، فرآیندهای مختلفی مانند فرآیند حرارتی انیلینگ<sup>۴</sup> برای حفظ حالت کریستالی نانولوله‌ها و از بین بردن نقص‌ها وجود دارد، اما احتمال نقص با چگالی پایین در ساختار وجود دارد. همچنین در نتایج تجربی نشان داده شده است که دستگاه‌هایی مانند میکروسکوپ تونلی روبشی (STM)<sup>۵</sup> و میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM)<sup>۶</sup> می‌توانند در زمان بررسی نانولوله‌ها سبب نقص‌های ساختاری یا حتی آسیب به نانولوله‌ها شوند [۱۸]. به دلیل اثر مهمی که نقص‌های ساختاری بر هدایت الکتریکی و ترابرد الکترون نانولوله‌ها و کاربردهای بالقوه آنها در سیستم‌های الکترونیکی و الکترو-مکانیکی دارند، بررسی رفتار الکتریکی و عملکرد TMWCNTs در حضور این نوع نقص‌ها می‌تواند مورد توجه باشد.

در مقاله‌های قبلی [۱۹ و ۲۰] هدایت الکتریکی و اثر چرخش نسبی دیواره‌های نانولوله‌های کربنی دو دیواره‌ی تلسکوپی (TMWCNTs)<sup>۷</sup>، ساده‌ترین ساختار از TMWCNTs را شبیه‌سازی کرده و مورد بررسی قرار داده‌ایم. در این مقاله، ابتدا طرز کار و نحوه عملکرد نانوسوییچ مبتنی بر TDWCNTs را شبیه‌سازی و تحلیل کرده، سپس اثر نقص ساختاری تهی‌جا<sup>۸</sup> را بر هدایت الکتریکی و عملکرد نانوسوییچ تلسکوپی مورد بررسی قرار می‌دهیم.

این مقاله در ادامه از بخش‌های زیر تشکیل شده است: در بخش دوم، ساختار افزاره و روش شبیه‌سازی بیان می‌شود. در بخش سوم، نتایج شبیه‌سازی که شامل هدایت الکتریکی و ترابرد الکترون TDWCNTs به عنوان یک نانوسوییچ الکترومکانیکی در حالت بدون نقص و همچنین در حضور نقص تهی‌جا می‌باشد، ارائه و بررسی می‌شود. در نهایت و در بخش چهارم، جمع بندی و نتیجه‌گیری این بحث ارائه می‌گردد.

### ساختار افزاره و روش شبیه‌سازی

ساختار نمونه‌ای که برای نانولوله کربنی دو دیواره تلسکوپی در نظر گرفتیم، از دو نانولوله کربنی تک دیواره آرمچیر با کایرالیته‌ی -های (۴، ۴) و (۸، ۸) که به صورت هم‌محور قرار گرفته و در ناحیه محدودی از انتهای نانولوله‌ها دارای همپوشانی هستند، تشکیل شده است. در این نانو‌ساختار، نانولوله‌های کربنی داخلی و بیرونی از یک سمت باز و از سمت دیگر به الکتروُد‌ها متصل می‌باشند. فاصله بین دو دیواره در حدود  $2/8 \text{ \AA}$  می‌باشد. افزاره‌ی (۸، ۸) @ (۴، ۴) در حالت بدون نقص و همچنین در حضور نقص تهی‌جا در شکل (۱) نشان داده شده است. نقص تهی‌جا زمانی

۹-Donors

۱۰-Acceptors

۱۱-Atomistix tool kit

۱۲-Slater-Koster tight-binding

۱۳-Hancock

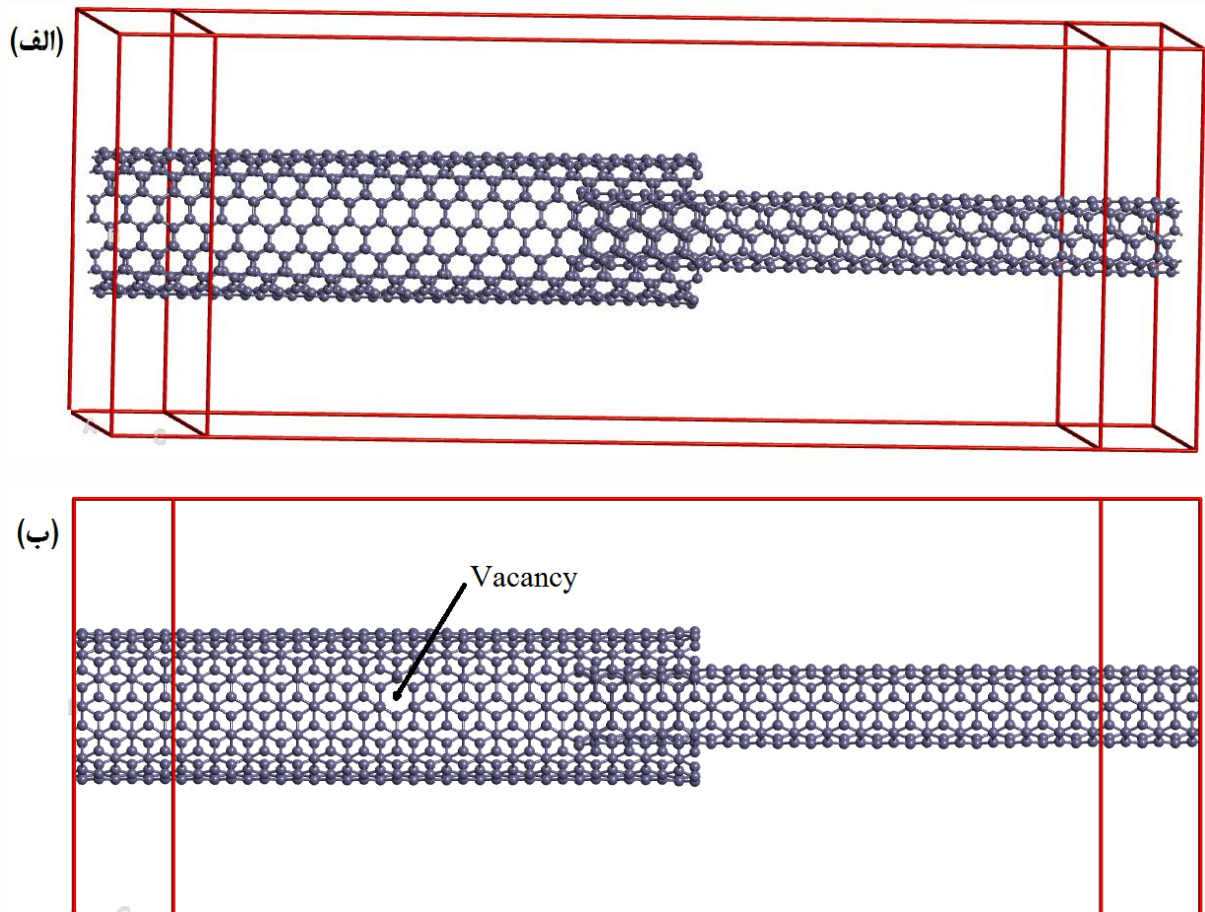
۴-Annealing

۵-Scanning tunneling microscope

۶-Transmission electron microscope

۷-Telescoping double-walled CNTs

۸-Vacancy



شکل ۱. ساختار افزاره TDWCNT (الف) بدون نقص. (ب) با نقص تهی جا. هریک از الکترودها از سه سلول واحد کربنی و هر یک از نانولوله‌ها از ۱۶ سلول واحد تشکیل شده‌اند.

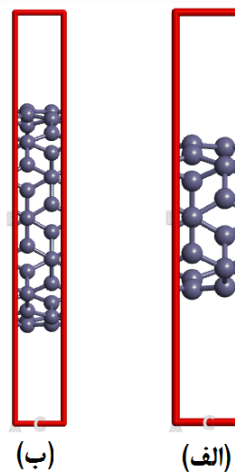
این مدل با تابع پایه ذکر شده، یک مدل تنگ‌بست با اربیتال تکی  $\pi$  می‌باشد که برهمکنش بین آنها در یک لایه، تا نزدیکترین همسایه‌های سوم را در برمی‌گیرد. انرژی قطع و تعداد نقاط  $K$  به ترتیب ۱۵۰ ریدبرگ<sup>۱۳</sup> و  $1 \times 1 \times 10^3$  در نظر گرفته شده و از روش حل خودسازگار (SCF)<sup>۱۴</sup> با تیرانس  $10^{-5}$  هارتری<sup>۱۵</sup> برای محاسبات استفاده شده است.

قبل از انجام شبیه‌سازی و محاسبه هدایت الکتریکی، تمام ساختارها بهینه شده و در حالت آرامش می‌باشند به طوری که حداکثر نیرو بر هر اتم کمتر از  $0.05 \text{ eV/\AA}$  می‌باشد.

هدایت افزاره TDWCNT از رابطه زیر قابل محاسبه می‌باشد.

$$G = G_0 T(E, V_b) \quad (1)$$

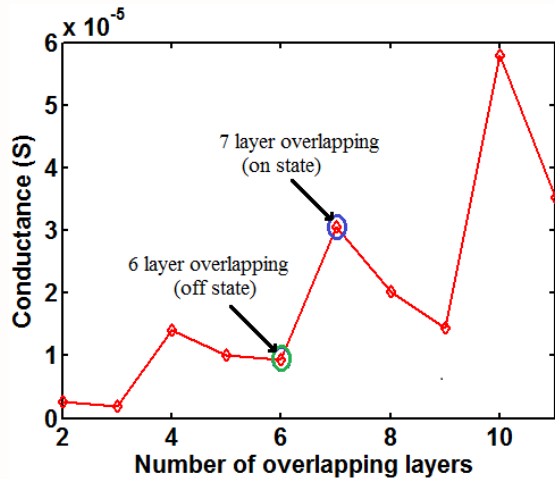
در این رابطه  $G_0 = 77.5 \mu S$  واحد کوانتومی هدایت و  $T(E, V_b)$  ضریب انتقال نام دارد و از رابطه‌ی (۲) محاسبه می‌شود [۲۴].



$$T(E, V_b) = Tr[\Gamma_L G_C \Gamma_R G_C^\dagger] \quad (2)$$

شکل ۲. سلول واحد. (الف) الکتروده راست و نانولوله داخلی. (ب) الکتروده چپ و نانولوله بیرونی.

13-Rydberg  
14-Self-consistent  
15-Hartree



شکل ۳. هدایت افزاره TDWCNT برحسب تعداد لایه‌های همپوشانی دیواره‌های داخلی و بیرونی در بایاس ۲۰ mV.

بنابراین لایه‌های همپوشانی  $3n$  و  $3n+1$  را می‌توان به عنوان حالت‌های هدایت پایین و حالت‌های هدایت بالا در نظر گرفت. تغییر و نوسان هدایت افزاره در اثر حرکت نسبی نانولوله‌ها، به دلیل اثر کوپلینگ مختلف حالت‌های الکترونی  $\pi$  که بعنوان کانال-های هدایت کننده‌ی بین دو نانولوله هستند، می‌باشد. در واقع این حالت‌های الکترونی که مکان‌های مناسبی برای تراپرد الکترون بین لایه‌ای و تونل زنی رزونانس هستند، در همپوشانی با تعداد لایه-های  $3n$  و  $3n+1$  تغییر کرده، در نتیجه هدایت افزاره با افزایش تعداد لایه‌های همپوشانی بصورت نوسانی تغییر می‌کند. هدایت کوانتومی افزاره در حالت‌های هدایت بالا تقریباً چهار تا پنج برابر بزرگتر از هدایت افزاره در حالت‌های هدایت پایین می‌باشد. این مشخصه نشان می‌دهد که افزاره TDWCNT به صورت بالقوه قابلیت استفاده به عنوان یک نانو سوئیچ را دارا می‌باشد. مطابق با اصول عملکرد یک نانو سوئیچ، ما می‌توانیم حالت‌های هدایت بالا و هدایت پایین را به ترتیب به عنوان حالت‌های روشن (ON) و حالت‌های خاموش (OFF) در نظر بگیریم. با توجه به اینکه نسبت هدایت ON/OFF افزاره در بایاس ۲۰ mV در حدود چهار تا پنج می‌باشد، این نسبت با معیار عملکرد یک سوئیچ مولکولی قابل مقایسه است [۱۱].

برای بررسی بیشتر هدایت الکتریکی و تراپرد الکترون نانولوله‌ها [۲۵ و ۲۶] و نحوه عملکرد نانو سوئیچ تلسکوپی در ولتاژ بایاس مختلف، افزاره TDWCNT را در دو حالت همپوشانی شش لایه‌ای (حالت خاموش) و همپوشانی هفت لایه‌ای (حالت روشن) در نظر گرفته‌ایم. این دو حالت OFF و ON به ترتیب با استفاده از دو دایره‌ی سبز و آبی در شکل (۳) نشان داده شده است. با اعمال ولتاژ بایاس مختلف در محدوده‌ی صفر تا یک ولت، منحنی جریان-ولتاژ نانو سوئیچ تلسکوپی را در دو حالت همپوشانی شش

در رابطه  $G_C$  تابع گرین تاخیری ناحیه مرکزی افزاره، و  $\Gamma_{L(R)}$  ماتریس پهن‌شدگی تراز انرژی  $16$  می‌باشد که به میزان قدرت کوپلینگ ناحیه مرکزی به الکتروود چپ (راست) بستگی دارد.  $G_C$  و  $\Gamma_{L(R)}$  از روابط زیر محاسبه می‌شوند.

$$G_C = [ES_C - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1} \quad (3)$$

$$\Gamma_{L(R)} = i[\Sigma_{L(R)} - \Sigma_{L(R)}^\dagger] \quad (4)$$

$H_C$  همیلتونین ناحیه مرکزی و  $S_C$  ماتریس همپوشانی می‌باشد.  $\Sigma_{L(R)}$  ماتریس خود-انرژی  $17$  که اثر کوپلینگ الکتروود چپ (راست) به ناحیه مرکزی افزاره می‌باشد.

جریان گذرنده از افزاره را با داشتن  $T(E, V_b)$  می‌توان با استفاده از فرمول لانداور-بوتیکر  $18$  بدست آورد.

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E, V_b) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] dE \quad (5)$$

در این رابطه،  $f(E - \mu_L)$  و  $f(E - \mu_R)$  به ترتیب توابع توزیع فرمی الکتروود چپ و راست می‌باشند.

## نتایج شبیه‌سازی

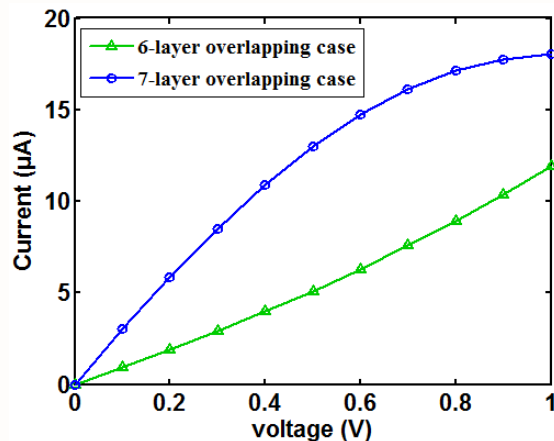
### هدایت الکتریکی و تراپرد الکترون افزاره TDWCNT به عنوان یک نانو سوئیچ الکترومکانیکی

با حرکت تلسکوپی نانولوله داخلی نسبت به نانولوله بیرونی و اعمال یک ولتاژ بایاس ۲۰ mV، هدایت افزاره TDWCNT محاسبه و برحسب تعداد لایه‌های همپوشانی دو دیواره در شکل (۳) رسم شده است. با توجه به این شکل مشاهده می‌شود که لغزش نسبی دیواره‌ها باعث تغییر هدایت افزاره می‌شود. مقدار هدایت افزاره به تعداد لایه‌های همپوشانی دو دیواره یا به عبارت دیگر به طول همپوشانی نانولوله داخلی و بیرونی بستگی دارد. طول هر لایه همپوشانی برابر با  $a/2$  که  $a = \sqrt{3}a_{c-c}$  ثابت شبکه CNT آرمچر در طول محور نانولوله و  $a_{c-c}$  طول پیوند کربن-کربن ( $1/42 \text{ \AA}$ ) می‌باشد [۱۹]. با کمی دقت متوجه می‌شویم که هدایت افزاره بطور متناوب و با دوره تناوب  $3a/2$  نوسان می‌کند. در صورتیکه تعداد لایه‌های همپوشانی برابر با  $3n$  و  $3n+1$  (n یک عدد صحیح است) باشد، هدایت TDWCNT به ترتیب دارای مقدار مینیمم و ماکزیمم نسبی است.

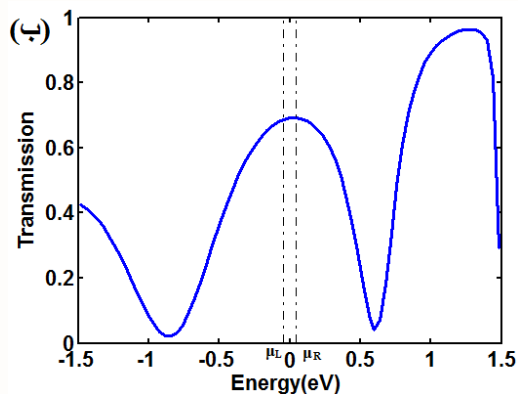
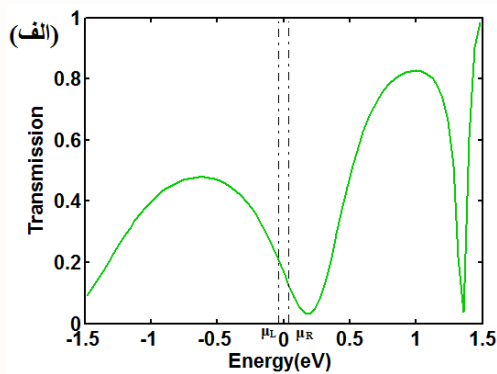
16-Level broadening  
17-Self-energy  
18-Landauer-Büttiker

گسترش پنجره‌ی بایاس، سطح زیر منحنی دیگر به صورت خطی تغییر نکرده، بنابراین رابطه بین جریان و ولتاژ غیرخطی خواهد بود. از طرف دیگر تابع انتقال افزاره در حالت همپوشانی هفت لایه‌ای دارای دو دره<sup>۱۹</sup> در دو طرف پنجره بایاس می‌باشد که با افزایش ولتاژ و گسترش پنجره بایاس، باعث کاهش هدایت می‌شود. درحالی‌که در حالت همپوشانی شش لایه‌ای پنجره بایاس جایی واقع شده است که یک قله<sup>۲۰</sup> پهن در سمت چپ آن و یک دره باریک در سمت راست آن قرار گرفته است. در نتیجه با افزایش ولتاژ، پنجره بایاس به سمت قله و دره گسترش می‌یابد اما به دلیل اثر غالب قله بر دره، شاهد افزایش هدایت افزاره در این حالت هستیم.

لایه‌ای و همپوشانی هفت لایه‌ای بدست آورده و در شکل (۴) نشان داده‌ایم. همانطور که در این شکل مشاهده



شکل ۴. نمودار جریان-ولتاژ نانوسویچ تلسکوپی در دو حالت همپوشانی شش لایه‌ای و همپوشانی هفت لایه‌ای.



شکل ۵. تابع انتقال نانوسویچ در ولتاژ بایاس ۱۰۰ mV. (الف) حالت همپوشانی شش لایه‌ای (OFF). (ب) حالت همپوشانی هفت لایه‌ای (ON).

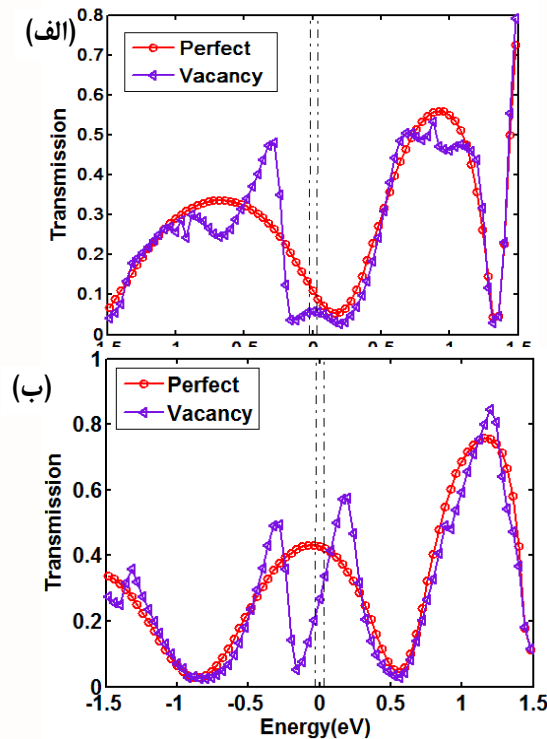
می‌شود نمودارهای جریان-ولتاژ افزاره در ولتاژ بایاس کم (کمتر از ۱۰۰ mV) در هر دو حالت همپوشانی شش لایه‌ای (OFF) و هفت لایه‌ای (ON)، تقریباً به صورت خطی می‌باشد. بنابراین هدایت افزاره در هر دو حالت تقریباً ثابت می‌ماند؛ اما با افزایش تدریجی ولتاژ بایاس، هر دو منحنی بصورت غیرخطی رفتار کرده، در نتیجه هدایت افزاره نیز در هر دو حالت تغییر می‌کند. نکته قابل توجهی که در اینجا وجود دارد این است که با افزایش ولتاژ بایاس، هدایت افزاره در حالت همپوشانی شش لایه‌ای افزایش یافته، در صورتیکه در حالت همپوشانی هفت لایه‌ای کاهش می‌یابد. بنابراین با کوچکتر شدن نسبت هدایت ON/OFF می‌توان گفت که عملکرد افزاره TDWCNT به عنوان یک نانوسویچ با افزایش ولتاژ بایاس، ضعیفتر می‌شود به طوری که در بایاس یک ولت، نسبت جریان ON/OFF کمتر از دو می‌شود. در نتیجه از یک طرف به دلیل افزایش بیش از حد جریان حالت خاموش، تلفات توان در افزاره افزایش یافته و از طرف دیگر به دلیل کاهش نسبت جریان ON/OFF، تفکیک بین جریان ON و OFF مشکل خواهد بود.

با افزایش تدریجی ولتاژ بایاس، علت غیرخطی شدن نمودار جریان-ولتاژ در دو حالت ON و OFF و همچنین افزایش هدایت افزاره در حالت OFF و کاهش هدایت در حالت ON را می‌توان با استفاده از توابع انتقال مربوطه که در شکل (۵) نشان داده شده‌اند، توضیح داد. با اعمال ولتاژ بایاس به افزاره، جریانی از آن می‌گذرد که مقدار این جریان متناسب با سطح زیر منحنی تابع انتقال در محدوده پنجره‌ی بایاس می‌باشد. در ولتاژ کم به دلیل کوچک بودن پنجره بایاس، منحنی تابع انتقال را می‌توان با یک خط صاف تقریب زد؛ در نتیجه رابطه‌ی بین جریان و ولتاژ با تقریب خوبی خطی خواهد بود اما با افزایش تدریجی ولتاژ بایاس و در نتیجه

### اثر نقص ساختاری تهی‌جا بر هدایت الکتریکی و عملکرد نانوسویچ تلسکوپی

با اعمال یک نقص ساختاری تهی‌جا در وسط نانولوله بیرونی (شکل ۱.ب)، هدایت افزاره TDWCNT را بر حسب تعداد لایه‌های همپوشانی دو دیواره بدست آورده سپس با هدایت افزاره بدون نقص در شکل (۶) مقایسه کرده‌ایم. ولتاژ بایاس اعمالی در هر دو حالت ۲۰ mV می‌باشد. همچنانکه در شکل (۶) مشاهده می‌شود،

ON می‌تواند به عنوان یک عیب محسوب شود اما از طرف دیگر کاهش جریان OFF (جریان نشتی) و در نتیجه کاهش تلفات توان یک مزیت محسوب می‌شود. با توجه به ثابت ماندن نسبت جریان ON/OFF، در صورتیکه جریان ON در محدوده قابل قبولی باشد، کماکان می‌توان افزاره‌ی TDWCNT را به عنوان یک نانو سوئیچ الکترومکانیکی مورد استفاده قرار داد.

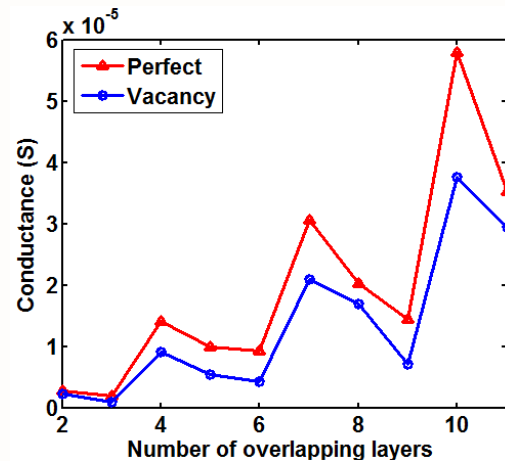


شکل ۷. تابع انتقال افزاره TDWCNT در حالت بدون نقص و دارای نقص در بایاس ۲۰ mV. (الف) همپوشانی شش لایه‌ای. (ب) همپوشانی هفت لایه‌ای.

تاکنون اثر نقص تهی‌جا در نانولوله بیرونی را بر هدایت TDWCNT مورد بررسی قرار داده‌ایم. برای بررسی بیشتر اثر نقص بر هدایت الکتریکی افزاره، نقص تهی‌جا را در نانولوله داخلی ایجاد کرده و هدایت بدست آمده را با حالتی که نقص در نانولوله بیرونی می‌باشد، مقایسه کرده‌ایم. همچنین در ادامه، اثر چگالی نقص بر هدایت الکتریکی افزاره بررسی شده است.

نتایج حاصل از شبیه‌سازی نشان می‌دهد وجود نقص در نانولوله‌ی داخلی در مقایسه با حالتی که نقص در نانولوله‌ی بیرونی می‌باشد، باعث کاهش بیشتر هدایت الکتریکی افزاره در اطراف تراز فرمی می‌شود. برای داشتن یک مقایسه صحیح، مکان نقص در وسط نانولوله‌ی داخلی و بیرونی با فاصله‌ی مساوی نسبت به الکترودها و در رینگ‌های متناظر و زیر شبکه‌های یکسان ایجاد شده است. مقدار هدایت بدست آمده برای افزاره در حالت همپوشانی هفت لایه‌ای در ولتاژ بایاس ۲۰ mV زمانیکه نقص تهی‌جا یکبار در وسط نانولوله داخلی و بار دیگر در وسط نانولوله بیرونی قرار می‌گیرد به ترتیب برابر با ۱۷/۵  $\mu\text{S}$  و ۲۱  $\mu\text{S}$  می‌باشد. علت کاهش بیشتر

وجود نقص در ساختار باعث کاهش هدایت افزاره‌ی TDWCNT می‌شود. این کاهش هدایت در کلیه لایه‌های همپوشانی دیده می‌شود. میزان کاهش هدایت افزاره‌ی دارای نقص تهی‌جا، نسبت به افزاره‌ی بدون نقص حداکثر ۵۰٪ می‌باشد.



شکل ۶. هدایت افزاره‌ی TDWCNT بر حسب تعداد لایه‌های همپوشانی دیواره‌ها در ساختار بدون نقص و ساختار دارای نقص تهی‌جا در ولتاژ ۲۰ mV.

علت کاهش هدایت افزاره در حضور نقص تهی‌جا، کاهش ضریب انتقال در اطراف تراز فرمی در اثر پیوندهای آویزان<sup>۲۱</sup> و افزایش حالت‌های<sup>۲۲</sup> محلی شبه-مقید<sup>۲۳</sup> در اطراف نقص ساختاری تهی‌جا می‌باشد [۲۷]. در واقع پیوندهای آویزان و حالت‌های محلی ایجاد شده در اطراف نقص تهی‌جا بیشتر از اینکه هدایت کننده باشند به عنوان یک مرکز پراکنده کننده‌ی حامل‌های بار عمل می‌کنند. در نتیجه باعث کاهش ضریب انتقال و هدایت الکتریکی افزاره در اطراف تراز فرمی و پنجره‌ی بایاس از مقدار ۸  $\mu\text{S}$  به ۵  $\mu\text{S}$  در حالت همپوشانی شش لایه‌ای و از مقدار ۳۳  $\mu\text{S}$  به ۲۱  $\mu\text{S}$  در حالت همپوشانی هفت لایه‌ای می‌شود. کاهش ضریب انتقال در اثر نقص تهی‌جا در اطراف تراز فرمی برای حالت همپوشانی شش لایه‌ای و هفت لایه‌ای در شکل (۷) نشان داده شده است. با توجه به نمودارها و مطالب بیان شده، اگر چه وجود نقص ساختاری تهی‌جا، باعث کاهش هدایت افزاره‌ی TDWCNT می‌شود اما الگوی تغییر هدایت بر حسب تعداد لایه‌های همپوشانی دو دیواره‌ی داخلی و بیرونی در هر دو ساختار بدون نقص و دارای نقص یکسان می‌باشد (شکل ۶). به عبارت دیگر، هدایت ساختار بدون نقص و ساختار دارای نقص تهی‌جا در لایه‌های همپوشانی  $3n$  و  $3n+1$  به ترتیب دارای مینیمم و ماکزیمم نسبی می‌باشند. با توجه به اینکه هر دو جریان حالت روشن و حالت خاموش تحت تاثیر نقص قرار می‌گیرند، نسبت جریان ON/OFF تقریباً ثابت مانده و در محدوده چهار تا پنج می‌باشد. هرچند کاهش جریان

21 - Dangling bonds  
22 - States  
23 - Quasi-bound

هدایت و در نتیجه افزایش امپدانس نانوسویچ در اثر افزایش چگالی نقص در ساختار، عملکرد کلیدزنی افزاره مختل شده و عمل وصل به درستی انجام نمی‌شود.

### نتیجه‌گیری

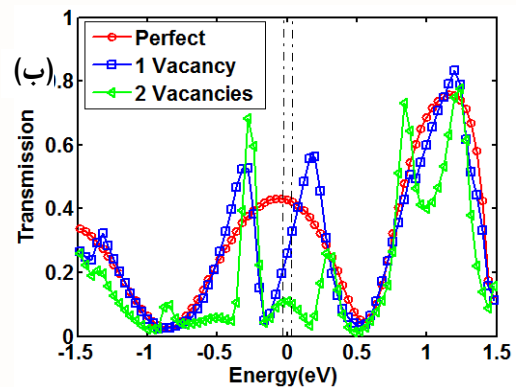
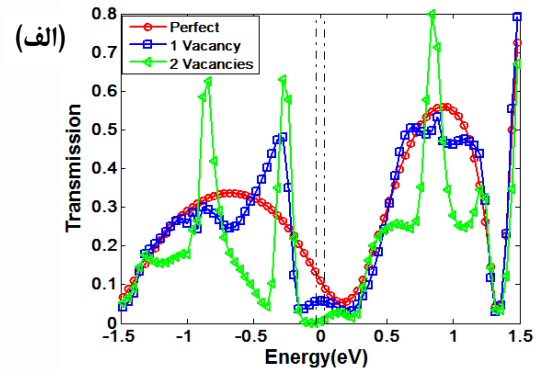
در این تحقیق، هدایت الکتریکی و تراورد الکترون نانولوله‌های کربنی تلسکوپ‌ی (TDWCNT) را با بکارگیری مدل تنگ‌بست و روش تابع گرین غیرتعدالی با استفاده از نرم افزار ATK محاسبه و مورد بررسی قرار داده و نانوسویچ تلسکوپ‌ی یکی از کاربردهای مهم و جالب این نانوساختار را شبیه‌سازی کرده‌ایم. در ادامه، اثر نقص تهی‌جا را بر هدایت TDWCNT و عملکرد نانوسویچ تلسکوپ‌ی بررسی کرده و با ساختار بدون نقص مقایسه کرده‌ایم. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که حرکت تلسکوپ‌ی دیواره‌ها در TDWCNT به دلیل برهمکنش بین دیواره‌ای و تغییر کوپلینگ حالت‌های الکترونی دو دیواره، باعث نوسان متناوب هدایت الکتریکی افزاره شده و به دلیل وجود مینیمم‌ها و ماکزیمم‌های نسبی در هدایت الکتریکی، می‌توان افزاره‌ی TDWCNT را به عنوان یک نانوسویچ الکترومکانیکی مورد استفاده قرار داد. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که حضور یک نقص تهی‌جا در ساختار، بعنوان یک مرکز پراکنده کننده الکترون عمل کرده و تا میزان ۵۰٪ باعث کاهش هدایت افزاره می‌شود. در صورتیکه چگالی نقص در ساختار کم باشد هرچند هدایت افزاره تا حدی کاهش می‌یابد اما به دلیل ثابت ماندن تقریبی نسبت جریان ON/OFF، رفتار الکتریکی و عملکرد افزاره به عنوان یک نانوسویچ چندان تحت تاثیر نقص قرار نمی‌گیرد. در صورتیکه چگالی نقص در ساختار افزایش یابد به دلیل کاهش شدید هدایت و جریان ON، عملکرد نانوسویچ ضعیف شده و عمل وصل به درستی انجام نمی‌شود.

### مرجع‌ها

- [1] M. F. Yu, O. Lourie, M. J. Dyer, K. Moloni, T. F. Kelly, and R. S. Ruoff, "Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load," *Science*, Vol. 287, no. 5453, pp. 637-640, January 2000.
- [2] J. Bernholc, D. Brenner, M. B. Nardelli, V. Meunier, and C. Roland, "Mechanical and electrical properties of nanotubes," *Annual Review of Materials Research*, vol. 32, no. 1, pp. 347-375, 2002.
- [3] T. D. Yuzvinsky, A. M. Fennimore, and A. Zettl, "Engineering nanomotor components from multi-walled carbon nanotubes via reactive ion etching," *AIP Conf. Proc.*, vol. 723, pp. 512-515, March 2004.
- [4] Z. C. Tu and X. Hu, "Molecular motor constructed from a double-walled carbon nanotube driven by axially varying voltage," *Phys. Rev. B.*, vol. 72, pp. 033404, July 2005.
- [5] Yu.E. Lozovik, A.V. Minogin and A.M. Popov, "Nanomachines based on carbon nanotubes," *Phys. Lett. A.*, vol. 313, no. 1-2, pp. 112-121, June 2003.

هدایت افزاره زمانیکه نقص در نانولوله‌ی داخلی وجود دارد، قطر کوچکتر نانولوله‌ی داخلی نسبت به نانولوله‌ی بیرونی و در نتیجه پراکندگی بیشتر الکترون در اثر نقص تهی‌جا می‌باشد.

برای بررسی اثر چگالی نقص بر هدایت افزاره‌ی TDWCNT، در حالت همپوشانی شش لایه‌ای و هفت لایه‌ای یک نقص تهی‌جا بر روی دیواره‌ی داخلی و یک نقص دیگر بر روی دیواره‌ی بیرونی ایجاد کرده و تابع انتقال مربوطه را بدست آورده‌ایم. این تابع انتقال را با توابع انتقال مربوطه به ساختار بدون نقص و ساختار دارای یک نقص مقایسه کرده و در شکل (۸) نشان داده‌ایم.



شکل ۸ تابع انتقال افزاره‌ی TDWCNT با دو نقص تهی‌جا و مقایسه‌ی آن با توابع انتقال ساختار بدون نقص و ساختار دارای یک نقص. (الف) همپوشانی شش لایه‌ای. (ب) همپوشانی هفت لایه‌ای.

شکل (۸) نشان می‌دهد که وجود دو نقص تهی‌جا در ساختار، هدایت افزاره را به شدت تحت تاثیر قرار داده و باعث کاهش بیشتر هدایت افزاره در اطراف تراز فرمی و پنجره بایاس می‌شود. در همپوشانی شش لایه‌ای مقدار هدایت افزاره در حالت بدون نقص  $8 \mu S$  و در حضور یک نقص تهی‌جا و دو نقص تهی‌جا به ترتیب  $5 \mu S$  و  $0.8 \mu S$  می‌باشد. همچنین در همپوشانی هفت لایه‌ای، مقدار هدایت افزاره در حالت بدون نقص  $33 \mu S$  و در حضور یک نقص تهی‌جا و دو نقص تهی‌جا به ترتیب  $21 \mu S$  و  $7/8 \mu S$  می‌باشد. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که دلیل کاهش شدید

- nonequilibrium electron transport,” *Phys. Rev. B.*, vol 65, p.165401, March 2002.
- [23] Y. Hancock, K. Saloriotta, A. Uppstu, A. Harju, and M.J. Puska, “Spin-dependence in asymmetric V-Shaped notched graphene nanoribbons,” *J Low Temp Phys.*, vol. 153, no. 5-6, pp. 393-398, October 2008.
- [24] S. Datta, “Nanoscale device modeling: the Green’s function method,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 28, no. 4, pp. 253-278, July 2000.
- [25] I. M. Grace, S. W. Bailey, and C. J. Lambert, “Electron transport in carbon nanotube shuttles and telescopes,” *Physical Review B*, vol. 70, pp. 153405, October 2004.
- [26] Y. J. Kang and K. J. Chang, “First-principles study of the electrical conductance of telescopically aligned carbon nanotubes,” *Physical Review B*, vol. 76, pp. 205441, November 2007.
- [27] Q. Yan, J. Wu, G. Zhou, and W. Duan, B. L. Gu, “Ab initio study of transport properties of multiwalled carbon nanotubes,” *Physical Review B*, vol. 72, pp. 155425, October 2005.
- [6] Yu. E. Lozovik, A. V. Minogin, A. M. Popov, “Possible nanomachines: nanotube walls as movable elements,” *JETP Letters*, vol. 77, no. 11, pp. 631-635, April 2003.
- [7] L. Maslov, “Concept of nonvolatile memory based on multiwall carbon nanotubes,” *Nanotechnology*, vol. 17, no. 10, pp. 2475-2482, May 2006.
- [8] M. Popov, Y. E. Lozovik, A. S. Kulish, and E. Bichoutskaia, “High frequency electro-mechanical memory cells based on telescoping carbon nanotubes,” *Nanoscience and Nano-technology*, vol. 10, pp. 4322-4328, July 2010.
- [9] E. Bichoutskaia, A. M. Popov, M. I. Heggie, Yu. E. Lozovik, “Multi-walled nanotubes: commensurate-incommensurate phase transition and NEMS applications,” *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, vol. 14, no. 2-3, pp. 131-140, 2006.
- [10] A. Subramanian, L. X. Dong, B. J. Nelson and A. Ferreira, “Supermolecular switches based on multiwalled carbon nanotubes,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 96, no. 7, pp. 073116, February 2010.
- [11] Q. Yan, G. Zhou, Sh. Hao, J. Wu, and W. Duan, “Mechanism of nanoelectronic switch based on telescoping carbon nanotubes,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 88, no. 17, p. 173107, April 2006.
- [12] Q. Zheng, and Q. Jiang, “Multiwalled carbon nanotubes as gigahertz oscillators,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 88, pp. 045503, January 2002.
- [13] Q. Zheng, J. Z. Liu, and Q. Jiang, “Excess van der Waals interaction energy of a multiwalled carbon nanotube with an extruded core and the induced core oscillation,” *Phys. Rev. B.*, vol. 65, pp. 245409.1-245409.7, May 2002.
- [14] M. Popov, E. Bichoutskaia, Y. E. Lozovik, and A. S. Kulish, “nanoelectromechanical systems based on multi-walled nanotubes: nanothermometer, nanorelay, and nano-actuator,” *physica status solidi (a)*, vol. 204, no. 6, pp. 1911-1917, June 2007.
- [15] J. M. Kinaret, T. Nord, and S. Viefers, “A carbon-nanotube-based nanorelay,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 82, no. 8, pp. 1287-1289, 2003.
- [16] R. Tamura, Y. Sawai, and J. Haruyama, “Suppression of the pseudoantisymmetry channel in the conductance of telescoped double-wall nanotubes,” *Phys. Rev. B.*, vol. 72, no. 4, pp. 045413, July 2005.
- [17] P. G. Collins, “Defects and disorder in carbon nanotubes,” Oxford University Press, Oxford, 2009.
- [18] Z. klusek, S. Datta, P. Byszeski, and W. kozłowski, “Scanning tunnelling microscopy and spectroscopy of Y-junction in carbon nanotubes,” *Surface Science*, vol. 507, pp. 577-581, 2002.
- [19] E. Aghabararian, A. Shakhoseini, “Electrical conductance of telescoping double-walled carbon nanotubes with Stone-Wales and monovacancy defects,” *Proc. of the 5th Conference on Nanoscience & Nanotechnology*, Tehran, Iran, 2014.
- [20] E. Aghabararian, A. Shakhoseini, “effect of relative rotation of walls on the conductance of telescoping double-walled carbon nanotubes,” *23<sup>rd</sup> Iranian Conference on Electrical Engineering*, Tehran, Iran, 2015.
- [21] O. V. Ershovaa, Yu. E. Lozovikb, A. M. Popovb, O. N. Bubel’c, N. A. Poklonskiac, and E. F. Kislyakovc, “Control of the Motion of Nanoelectromechanical Systems Based on Carbon Nanotubes” *Physics of the Solid State*, Vol. 49, No. 10, pp. 2010-2014, 2007.
- [22] M. Brandbyge, J. L. Mozos, P. Ordejón, J. Taylor, and K. Stokbro, “Density-functional method for