

Transporte Eletrônico entre Eletrodos de Carbyne.

Kazuko Ramos Nisioka

Faculdade de Engenharia de Materiais, Universidade Federal do Pará, Ananindeua 67113-901, Brasil.

Mayra Moura Moreira

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Universidade Federal do Pará, Belém 66075-110, Brasil.

Carlos Alberto Brito da Silva Júnior

Faculdade de Física, Universidade Federal do Pará, Ananindeua 67113-901, Brasil.

Jordan Del Nero

Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Pará, Belém 66075-110, Brasil.

Materiais unidimensionais e bidimensionais, tais como o Grafeno, Phagrafeno, e o Grafeno nanoribbons, atraem enorme interesse devido as suas inúmeras possibilidades de aplicações, esses materiais são mais leves e resistentes, dentro dessa classe o Carbyne ganhou destaque, sendo uma nova forma de carbono, consistindo em um filamento de átomos de carbono individuais classificado em Cumuleno e Polyyne de acordo com as ligações feitas entre os seus C-C. O efeito túnel possibilita através da aplicação direta dos conceitos da mecânica quântica inúmeras formas de aplicações que vão desde o decaimento radioativo alfa da fissão até a memória flash. Outra aplicação está relacionada a física de sistemas de baixa dimensionalidade, que é o caso do Carbyne, podendo produzir dispositivos eletrônicos cuja corrente do sistema esteja baseada no efeito túnel ressonante é o caso dos diodos túnel, transistor e dispositivos ôhmicos. Foi investigado o efeito de tunelamento de elétrons através de junções moleculares formada por dois fios atômicos 1-D de carbono denominado Carbyne na forma Polyyne sem a ligação efetiva baseada em simulações usando a metodologia da Teoria do funcional de Densidade combinada com a Função de Green de Não equilíbrio (DFT/NEFG). As distâncias entre os Carbynes onde ocorre o tunelamento foram compreendidas entre 2.1Å até 4Å variando de 0.1Å em cada junção. As curvas da corrente versus voltagem e condutância diferencial versus voltagem são mostradas para essas junções. Percebe-se que o transporte eletrônico por tunelamento aumenta, ou seja, é favorecido à medida que a distância entre os Carbynes diminui fazendo com que a corrente e a condutância aumentem com o aumento da voltagem havendo maior condução, isto é, para 4.0Å é 3.3nA e 5nS enquanto que para 2.1Å é 3750nA e 1500nS. Isso é decorrente da diminuição da energia potencial da barreira no tunelamento mostrando com isso a natureza metálica do material. Os Carbynes de 2.1Å até 3Å apresentam comportamento ôhmico característico de um resistor. Já para as distâncias entre 3.1Å e 4.0 Å exibem resistência diferencial negativa (RDN) para altas voltagens em consequência ao Bloqueio de Coulomb característico de diodo túnel ressonante (DTR). Palavras-chaves: materiais-unidimensionais, alótropos, Grafeno, Carbyne.