

## تأثیر نوع نانونوار زیگزاگ و دسته‌صندلی گرافن بر ضریب عبور و گاف انرژی

\*حسن ربانی، آزاده مظلوم شهرکی؛ دانشگاه شهرکرد، دانشکده علوم

### چکیده

در این مقاله با اتصال دو زنجیره اتمی یکنواخت به اتم‌های دو جایگاه متقابل نانونوارهای گرافن به بررسی رسانش الکترونی و گاف انرژی آن می‌پردازیم. محاسبات به‌کمک روش تابع گرین و رهیافت بستگی قوی در تقریب همسایه اول انجام می‌شود. بررسی منحنی‌های رسانش بر حسب انرژی الکترون ورودی نشان می‌دهد که برای یک نانونوار زیگزاگ گرافن به عرض یک حلقه بنزنی هیچ گافی در نوار انرژی سامانه وجود ندارد، در حالی‌که در مورد دسته‌صندلی همواره یک گاف حول انرژی فرمی مشاهده می‌شود که مقدار آن به اندازه نانونوار بستگی دارد. در پایان از مقایسه نتایج به‌دست آمده با پژوهش‌های قبلی، می‌توان نتیجه گرفت که رفتار رسانش الکترونی نانونوارهای گرافنی شدیداً به‌نحوه اتصال الکترونها و کیفیت اتصال‌ها وابسته است.

### مقدمه

گرافن ماده‌ای منحصربه‌فرد با پایه کربنی و دانسیته اتمی بالاست. خواص غیرادی آن نظیر سختی و استحکام مکانیکی زیاد، رسانایی الکتریکی و حرارتی زیاد و قابل تنظیم از جمله خصوصیات عالی نوری و سطحی آن است که مورد توجه خاص محققان قرار گرفته است [۱]، [۲]، [۳]. با توجه به بزرگ بودن مسیر آزاد میانگین الکترون در گرافن که از مرتبه میکرومتر است، گرافن گزینه خوبی برای ساخت وسایل الکترونی است [۴]. پراکندگی انرژی دیراک در دو بعد نشان می‌دهد که گرافن نیمه‌رسانایی است که چگالی حالت‌های آن با رسیدن به انرژی فرمی، به‌طور خطی کم می‌شود. بنا بر این گرافن یک پل جداکننده جهان نیمه‌رساناها- با یک گاف انرژی بین نوارهای ظرفیت و رسانش- و فلزات- چگالی حالت‌های الکترونی محدود در انرژی فرمی- است. گاف انرژی در یک نمونه گرافنی می‌تواند به‌کمک ناخالصی یا محدود شدن اندازه آن بزرگ شود [۵]، [۶]. با توجه به این ویژگی‌های غیرعادی، از گرافن می‌توان به‌عنوان ماده‌ای جدید در تحقیقات حوزه‌های الکترونیک، الکترومکانیک و شیمی یاد کرد [۷]، [۸]. از این‌رو درک و شناخت ویژگی‌های گرافن در گسترش و اصلاح کاربردهای آن سودمند است.

واژه‌های کلیدی: نانونوار، رسانش الکترونی، گاف انرژی، تابع گرین، بستگی قوی

پذیرش ۹۲/۴/۹

دریافت ۹۱/۵/۴

hasan.rabani@gmail.com

\*نویسنده مسئول

در مقالات مختلفی رسانندگی گرافن با اندازه‌های محدود یا بی‌نهایت، بررسی شده است [۳]، [۹]. که البته این کمیت به نوع دست‌گردی لبه‌ها، بعد نانو نوار گرافن مرکزی و جنس هادی‌های ورودی و خروجی الکترون وابسته است. در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت بستگی قوی در تقریب همسایه اول به بررسی خواص تراپردی نانو نوارهای گرافن که از دو جایگاه در سمت چپ و راست به دو زنجیره اتمی نیمه‌متناهی متصل شده است، می‌پردازیم، سپس وابستگی رسانش الکترونی سامانه را به طول و عرض نانو نوار به دست می‌آوریم. بررسی مشابهی در منبع [۱۰] انجام شده است با این تفاوت که زنجیره‌های اتمی به چند جایگاه در سمت چپ و چند جایگاه در سمت راست از نانو نوار گرافن متصل شده‌اند. در واقع ما در این مقاله با تغییر نحوه اتصال هادی‌ها به نانو نوار گرافن مرکزی، به بررسی اثر آن بر رسانندگی گرافن و تغییر رفتار تونل‌زنی الکترون می‌پردازیم. در بخش بعد فرمول‌بندی لازم برای محاسبات عددی را ارائه می‌کنیم، سپس در بخش نتایج با ارائه نتیجه محاسبات، به بررسی وابستگی ضریب عبور به اندازه نانو نوار پرداخته و پس از تحلیل نتایج به مقایسه آن‌ها با نتایج تحقیقات انجام شده می‌پردازیم. در آخر نیز خلاصه نتایج به دست آمده در این پژوهش را بیان می‌کنیم.

### مبانی نظری

مانند شکل ۱، یک نانو نوار گرافن که از دو جایگاه متقابل در سمت چپ و راست به دو زنجیره اتمی یک‌نواخت متصل شده است، در نظر می‌گیریم. هامیلتونی نانو نوار مرکزی (C) منزوی در رهیافت بستگی قوی و با در نظر گرفتن تقریب همسایه اول بدین صورت نوشته می‌شود [۱۱]، [۱۲]:

$$H_C = \sum_{i=1}^N (\varepsilon_C |i\rangle\langle i| + \beta_{CC} \sum_j |i\rangle\langle j|) + h.c., \quad (1)$$

که در آن انرژی جایگاهی هر اتم کربن،  $\beta_{CC}$  انرژی پرش بین اتم‌های کربن مجاور و  $N$  تعداد اتم‌های کربن در نانو نوار گرافن است. در این جا  $j$  شماره جایگاه نزدیک‌ترین همسایه‌های اتم  $i$  است که حداکثر سه مقدار را اختیار می‌کند. هامیلتونی زنجیره فلزی چپ (راست) نیز به این شکل نوشته می‌شود:

$$H_{L(R)} = \sum_i (\varepsilon_{L(R)} |i\rangle\langle i| + \beta_{L(R)} |i\rangle\langle i+1|) + h.c., \quad (2)$$

که در آن انرژی جایگاهی اتم‌ها و  $\beta_{L(R)}$  انرژی پرش بین همسایگان اول هستند. همچنین در جمع‌ها مقدار  $i$  برای هادی چپ از مقدار  $-\infty$  تا صفر و برای هادی راست از  $N+1$  تا  $+\infty$  تغییر می‌کند. هامیلتونی برهم‌کنش بین نانو نوار گرافن با هادی سمت چپ و راست نیز به ترتیب با این رابطه داده می‌شود:

$$\begin{aligned} H_{LC} &= H_{CL} = \beta_{CL} |0\rangle\langle 1| + h.c., \\ H_{RC} &= H_{CR} = \beta_{CR} |N+1\rangle\langle N| + h.c., \end{aligned} \quad (3)$$

که در آن  $1$  و  $N$  جایگاه‌هایی از نانو نوار هستند که به ترتیب به زنجیره‌های چپ و راست متصل شده‌اند و  $\beta_{CL(R)}$  انرژی پرش بین نانو نوار گرافن و زنجیره چپ (راست) است. وارون تابع گرین نانو نوار مرکزی در حضور هادی‌ها را می‌توان به این شکل به دست آورد:

$$G_C^{-1} = G_{0C}^{-1} - H_{LC} G_L H_{CL} - H_{RC} G_R H_{CR}, \quad (4)$$

که در آن  $G_{0C} = (\varepsilon - H_C)^{-1}$  و  $G_{L(R)} = (\varepsilon - H_{L(R)})^{-1}$  به ترتیب توابع گرین نانو نوار منزوی و هادی چپ (راست) هستند و  $\varepsilon$  انرژی الکترون ورودی است. در رابطه (۴) جملات دوم و سوم به ترتیب خود انرژی های نانو نوار در حضور هادی های سمت چپ و راست هستند. با توجه به نوار انرژی یک زنجیره خطی خود انرژی چپ (راست) به این شکل محاسبه می شود [۱۲]:

$$\Sigma_{L(R)} = \frac{\beta_{CL(CR)}^2}{\beta_{L(R)}} \exp(ik_{L(R)} a_{L(R)}), \quad ; \quad k_{L(R)} a_{L(R)} = \cos^{-1} \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_{L(R)}}{2\beta_{L(R)}} \right), \quad (5)$$

که در آن  $k_{L(R)}$  عدد موج الکترون،  $a_{L(R)}$  ثابت شبکه،  $\varepsilon_{L(R)}$  انرژی جای گاهی اتمها و  $\beta_{L(R)}$  انرژی پرش بین اتمها در زنجیره خطی چپ (راست) است. با محاسبه ماتریس تابع گرین از رابطه (۴)، ضریب عبور نانو نوار گرافن متصل به دو زنجیره خطی از این رابطه محاسبه می شود [۱۱]:

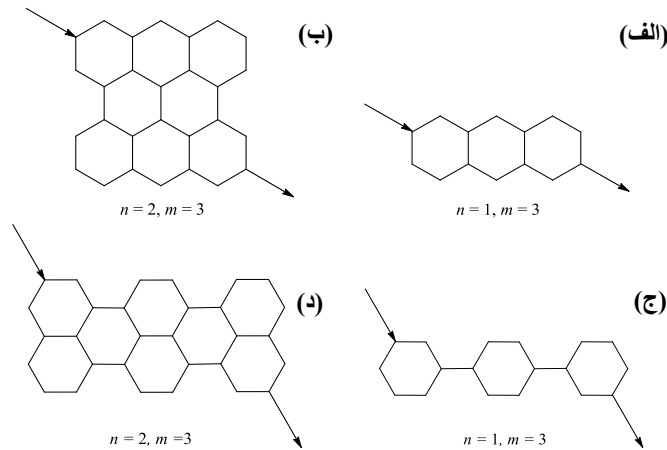
$$T(\varepsilon) = 4 \text{Im} \Sigma_L \text{Im} \Sigma_R |G_{C(IN)}|^2, \quad (6)$$

که در آن  $G_{C(IN)}$  عنصر سطر اول و ستون  $N$  ام تابع گرین نانو نوار متصل است. در بخش بعد بر پایه این فرمول بندی نتایج محاسبات عددی در خصوص خواص ترابردی یک نانو نوار متناهی متصل به دو زنجیره اتمی ساده را ارائه می کنیم و اثر اندازه نانو نوار را بر این خواص بررسی می کنیم.

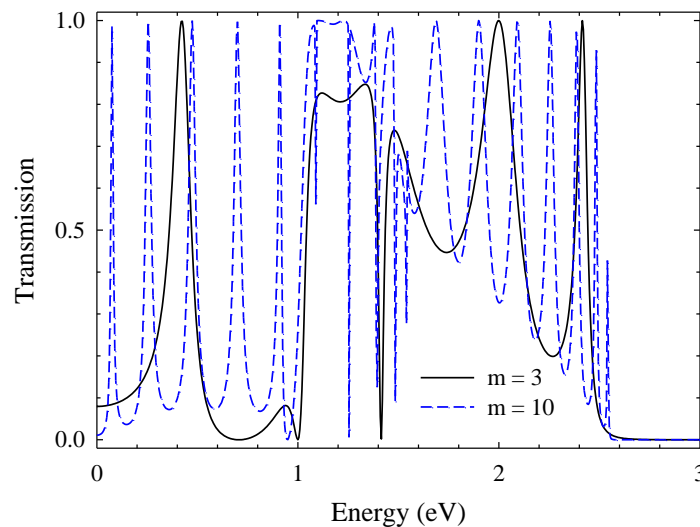
## نتایج و بحث

در این بخش نتایج عددی برای چند نانو نوار گرافنی با اندازه های مختلف را ارائه می کنیم که از دو جای گاه متقابل در سمت چپ و راست به دو زنجیره خطی یک نواخت متصل شده اند (شکل ۱). همچنین در این مقاله، مقدار انرژی جای گاهی تمام اتمهای کربن و اتمهای زنجیره ها را برابر با صفر، ( $\varepsilon_C = \varepsilon_{L(R)} = 0$ ) و انرژی های پرش بین اتمهای کربن در نانو نوار و بین اتمها در هادی ها را به ترتیب برابر با  $\beta_C = 1\text{eV}$  و  $\beta_{L(R)} = 2.5\text{eV}$  انتخاب می کنیم. انرژی پرش اتصال بین هادی ها و نانو نوار نیز برابر با  $\beta_{CL(R)} = 1.2\text{eV}$  در نظر گرفته شده است. با توجه به این مقادیر انتخاب شده، بازه مجاز انرژی نانو نوار بین  $-2.5\text{eV}$  و  $2.5\text{eV}$  خواهد بود، در حالی که بازه مجاز برای هادی ها بین  $-5\text{eV}$  و  $5\text{eV}$  است [۱۲]. به دلیل وجود تقارن در طیف رسانش نسبت به انرژی صفر، اغلب نمودارها در ناحیه مثبت رسم شده است. در حالی که برای گرافنی که از چند جای گاه در سمت چپ و چند جای گاه در سمت راست به دو زنجیره فلزی متصل است، فقط در دستگردی دسته صندلی نمودار ضریب عبور حول انرژی صفر متقارن است [۱۳]؛ و برای لبه ای با دستگردی زیگزاگ در صورت وجود اتصال های چندگانه بین هادی های ورودی و خروجی با نانو نوار، هم نمودار ضریب عبور و هم گاف ایجاد شده (برای گرافنی با اندازه بزرگ) حول انرژی صفر نامتقارن هستند [۱۰]. حال به کمک روابط ذکر شده در

بخش قبل، رسانش یک نانونوار شامل  $m$  حلقه در طول و  $n$  ردیف  $m$  حلقه‌ای در عرض (شکل ۱ را ببینید) را برای دو مورد زیگزاگ و دسته صندلی بررسی می‌کنیم.

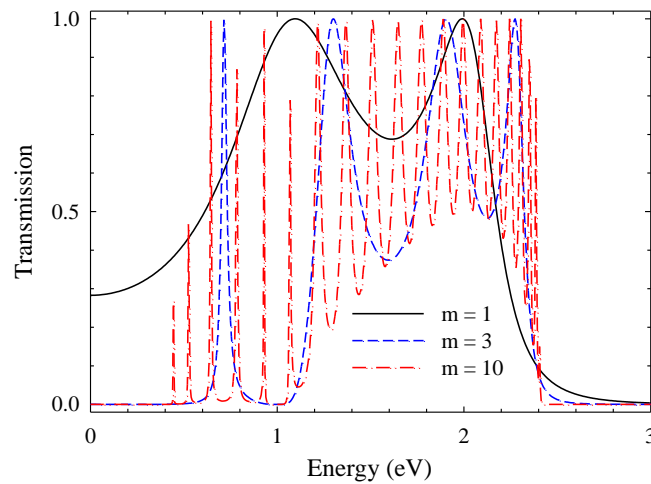


شکل ۱. چند مورد از نانونوارهای گرافن که از یک جایگاه در سمت چپ و از جایگاه متقابل در سمت راست به دو زنجیره اتمی متصل شده‌اند. (الف) و (ب) موارد زیگزاگ و (ج) و (د) موارد دسته صندلی را نشان می‌دهند.  $n$  و  $m$  به ترتیب نشان‌دهنده طول و عرض نانونوار هستند



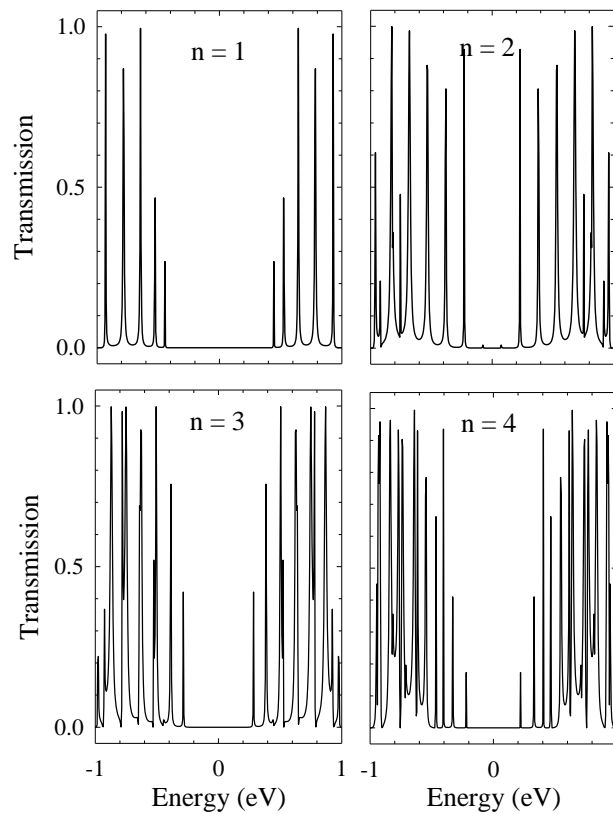
شکل ۲. نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی الکترون ورودی برای دو نانونوار زیگزاگ با عرض  $n=1$  و طول‌های  $m=3, 10$

وابستگی ضریب عبور به طول نوار در نمودارهای ضریب عبور برای دو نانونوار زیگزاگ با عرض‌های یکسان ( $n=1$ ) و طول‌های متفاوت ( $m=3, 10$ ) بر حسب انرژی الکترون ورودی در شکل ۲ رسم شده است. همچنین وابستگی ضریب عبور به طول نانونوار برای مورد دسته صندلی نیز در شکل ۳ آمده است. چنان‌که در این شکل‌ها مشاهده می‌شود، با افزایش طول نانونوار در هر دو مورد زیگزاگ و دسته صندلی، تعداد نوسان‌ها در منحنی ضریب عبور در ناحیه تشدید بیشتر و پدیده تونل‌زنی الکترون در خارج از نوار انرژی قوی‌تر می‌گردد.

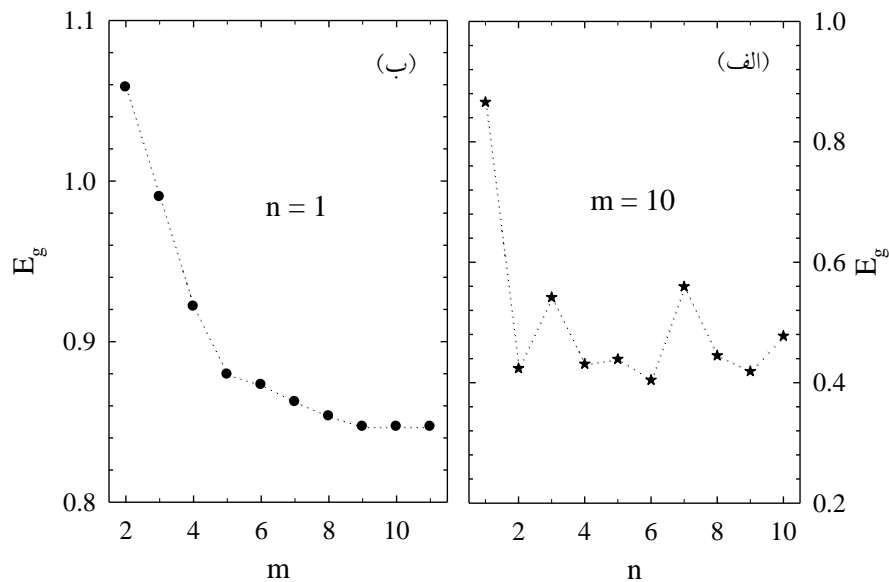


شکل ۳. نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای دو نانونوار دسته صندلی با عرض  $n = 1$  و طول‌های  $m = 1, 3, 10$

در نانونوار زیگزاگ با عرض  $n = 1$  برای هیچ یک از طول‌ها گافی حول انرژی صفر دیده نمی‌شود و فاصله بین دو قله ایجاد شده حول انرژی صفر با افزایش طول کاهش پیدا کرده به طوری که برای طول‌های خیلی بزرگ این دو قله در انرژی صفر به هم می‌پیوندند. در حالی که برای مورد دسته صندلی با همین عرض و برای طول‌های بلند حول انرژی صفر یک گاف انرژی مشاهده می‌شود. با مقایسه این نمودارها و نمودارهای مراجع [۱۰]، [۱۳] دیده می‌شود که اتصال زنجیره‌های اتمی به صورت چندگانه منجر به افزایش ضریب عبور و کاهش تعداد نوسانات ضریب عبور می‌گردد. با توجه به شکل‌های ۲ و ۳ دیده می‌شود که برای نانونوار زیگزاگ با عرض  $n = 1$  هیچ گاف انرژی حول انرژی صفر وجود ندارد. این نتیجه با نتیجه مرجع [۱۴] سازگار است. در حالی که در مورد دسته صندلی یک گاف انرژی از مرتبه یک دهم الکترون-ولت حول انرژی صفر مشاهده می‌شود. از این رو در شکل ۴ ضریب عبور الکترونی را برای چند نوار دسته صندلی به عرض‌های مختلف و طول  $m = 10$  بررسی کردیم. می‌توان گفت که با افزایش عرض نانونوار تعداد نوسانات ضریب عبور زیادتر می‌شود. همچنین مقدار گاف ایجاد شده حول انرژی صفر بسته به مقدار عرض نانونوار تغییر می‌کند. می‌توانیم برای همین طول، نمودار گاف انرژی حول انرژی صفر  $(E_g)$  را بر حسب عرض نانونوار دسته صندلی ترسیم کنیم. نتیجه چنین کاری در شکل ۵ الف آمده است. این گاف نسبت به افزایش عرض نوار ( $n$ ) دارای رفتاری افت و خیز گونه است که دلیل آن محدود بودن طول و عرض نانونوار است. در شکل ۵ ب نیز برای یک نانونوار با عرض ثابت  $n = 1$ ، انرژی گاف حول انرژی صفر بر حسب طول رسم شده است که رفتاری نزولی را نشان می‌دهد و با افزایش طول به عددی ثابت میل می‌کند. در اتصال چندگانه زنجیره‌های اتمی به نانونوار دسته صندلی، گاف ایجاد شده حول انرژی اتم‌های کربن با افزایش عرض رفتاری افت و خیز گونه و با افزایش طول رفتاری صعودی از خود نشان می‌دهد [۱۳]. این نتیجه با مرجع [۱۵] به صورت کیفی کاملاً در توافق است.



شکل ۴. نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای نانونوارهای دسته صندلی و طول  $m = 10$  که به دو زنجیره ساده اتمی از دو جایگاه متقابل در سمت چپ و راست متصل شده‌اند



شکل ۵. نمودار گاف انرژی حول انرژی فرمی برای یک نانونوار دسته صندلی الف) بر حسب عرض با طول ثابت  $m = 10$  و ب) بر حسب طول با عرض ثابت

## نتیجه‌گیری

در این تحقیق به کمک روش تابع گرین به بررسی اثر اندازه یک نانونوار گرافن- که از دو جایگاه متقابلش به دو هادی یک بعدی متصل است- بر ضریب عبور الکترونی پرداخته شده است. نتایج به دست آمده بیان می‌کند که با افزایش طول نانونوار برای هر دو مورد زیگزاگ و دسته صندلی، تعداد نوسان‌ها در منحنی ضریب عبور بیش‌تر می‌شود. در نانونوار زیگزاگ با عرض  $n = 1$  گافی حول انرژی صفر دیده نمی‌شود و فاصله بین دو قله ایجاد شده حول انرژی صفر با افزایش طول کاهش پیدا کرده به طوری که برای طول‌های بزرگ این دو قله در انرژی فرمی به هم می‌پیوندند. در حالی که برای مورد دسته صندلی حول انرژی فرمی یک گاف انرژی مشاهده می‌شود. در ادامه کار با ثابت در نظر گرفتن یک طول ثابت، وابستگی ضریب عبور به عرض نانونوار دسته صندلی را بررسی کردیم و مشاهده شد که گاف ایجاد شده حول انرژی فرمی نسبت به افزایش عرض، رفتاری افت و خیز گونه دارد که دلیل آن محدود بودن طول و عرض نانونوار است. برای یک نانونوار تک حلقه‌ای رفتار گاف مرکزی تابع طول نزولی است و برای طول‌های بلند به سمت یک عدد ثابت میل می‌کند. با مقایسه نتایج به دست آمده در این تحقیق و پژوهش‌های انجام شده قبلی می‌توان گفت که در بررسی رفتار رسانش الکترونی یک نانونوار گرافن، علاوه بر مشخصات فیزیکی و شیمیایی خود نانونوار، نحوه اتصال الکترودها به آن نیز بر تغییر رفتار و میزان رسانش آن تأثیرگذار است.

## منابع

1. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, Rev., Modern Phys., 81 (2009).
2. K. Novoselov, A. Geim, S. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. Dubonos, I. Grigorieva and A. Firsov, Science, 306 (2004).
3. S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang and E. Rossi, Rev. Mod. Phys., 83 (2011).
4. A. V. Rozhkov, G. Giavaras, Y. P. Bliokh, V. Freilikher and F. Nori, Phys. Rep. 351, 0198 (2011).
5. M. H. F. Sluiter and Y. Kawazoe, Phys. Rev. B 68 (2003).
6. M. Y. Han, B. ozyilmaz, Y. Zhang and P. Kim, Phys. Rev. Lett. 98 (2007).
7. Y. M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K. A. Jenkins, D.B. Farmer, H. Y. Chiu, A. Grill and P. "Avouris", Science 327 (2010).
8. T. O. Wehling, K. S. Novoselov, S. V. Morozov, E. E. Vdovin, M. I. Katsnelson, A. K. Geim and A. I. Lichtenstein, Nano Lett. 8 (2008).

9. Q. Yan, B. Huang, J. Yu, F. Zheng, J. Zang, J. Wu, B. Lin Gu, F. Liu and W. Duan, *Nano Lett.*, 7 (2007).
۱۰. حسن ربانی، محمد مردانی، آزاده مظلوم شهرکی، بررسی اثر طول و عرض بر ضریب عبور الکترونی نانو روبان‌های گرافن زیگزآگ، مجموعه مقالات پنجمین همایش ملی فیزیک پیام نور، دانشگاه تبریز (۱۳۹۰).
11. S. Datta; *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*; Cambridge, University Press, Cambridge (1997).
12. M. Mardaani, H. Rabani and A. Esmaili, *Solid State Commun.* 151(2011) 928.
۱۳. حسن ربانی، محمد مردانی، آزاده مظلوم شهرکی، تراز برد الکترونی نانونوارهای گرافنی دسته صندلی متصل به دو زنجیره اتمی، مجموعه مقالات هجدهمین کنفرانس فیزیک ماده چگال، مرکز تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، (۱۳۹۱).
14. B. Biel1, X. Blase, F. Triozon1 and S. Roche, *Phys. Rev. Lett.*, 102 (2009) 096803.
15. V. Barone, O. Hod and G.E. Scuseria, *Nano Lett.* 6 (2006).