

اثر نقیصه‌های لبه‌ای بر ترابرد بار در نانونوارهای گرافنی

سحر ایزدی ویشکائی، حمید رحیم‌پور سلیمانی

دانشگاه گیلان، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

چکیده

در این مقاله ترابرد الکترون در نانونوارهای گرافنی با استفاده از فرمول‌بندی تابع گرین مطالعه می‌شود. نقیصه‌های لبه‌ای پدیده‌ای است که معمولاً در سنتز نانونوارها ایجاد می‌گردد. در اینجا، تاثیر نقیصه‌های لبه‌ای بر رسانندگی الکتریکی و توان گرمایی سیستم بررسی می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که در این حالت ضریب ترابرد الکترونی و چگالی حالات دستخوش تغییر می‌گردد، به طوری که رسانندگی الکتریکی و توان گرمایی کاهش می‌یابد.

در این مقاله ترابرد بار در نانونوارهای گرافنی با استفاده از رهیافت تابع گرین، محاسبه می‌گردد. برای انجام محاسبات، نانونوار متشکل از سه ناحیه در نظر گرفته می‌شود، ناحیه‌ی مرکزی تحت عنوان کانال، قسمت محدودی از نانونوار را در بردارد و مابین دو الکتروود قرار گرفته است. الکتروودها به صورت نانونوارهای گرافنی با طول نیمه بی‌نهایت در نظر گرفته می‌شود. رابطه‌ی زیر هامیلتونی توصیف کننده‌ی چنین سیستمی را ارائه می‌دهد:

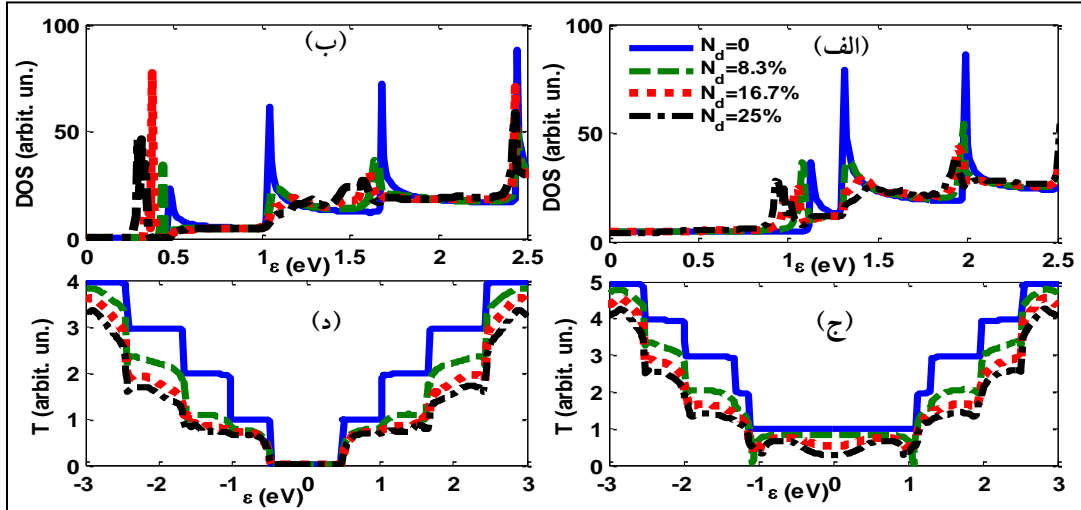
$$H = \sum_{i,j,\alpha=L,R} (t_{i,j} + \delta_{i,j}\varepsilon_i) c_{i,\alpha}^+ c_{j,\alpha} + \sum_{i,j} (t_{i,j} + \delta_{i,j}\varepsilon_i) d_i^+ d_j + \sum_{i,j} t_{i,j} c_{i,\alpha}^+ d_j + H.C., \quad (1)$$

که در آن جمله‌ی اول مربوط به الکتروودهای چپ ($\alpha = L$) و راست ($\alpha = R$) است، $(c_{i,\alpha}^+)$ عملگر خلق (نابودی) الکترونی در الکتروود α می‌باشد، $t_{i,j}$ و ε_i به ترتیب پارامتر انتگرال پرش الکترونی بین دو سایت اتمی همسایه و انرژی روی هر سایت اتم کربن است. جمله‌ی دوم هامیلتونی، ناحیه‌ی کانال را توصیف می‌کند. (d_i^+) عملگر خلق (نابودی) الکترون در ناحیه‌ی کانال است و چون ناحیه‌ی کانال و الکتروودها مشابه‌اند با هامیلتونی یکسانی توصیف می‌شوند. جمله‌ی آخر نشان‌دهنده‌ی تونلزنی الکترون از ناحیه‌ی کانال به درون الکتروودها و برعکس می‌باشد. در اینجا، انتگرال پرش الکترون بین اوربیتال‌های π اتم‌های کربن همسایه، $t_{i,j} = -2\gamma eV$ در نظر گرفته شده است. رابطه‌ی $\varepsilon_i = \varepsilon_c + U_i$ برقرار می‌باشد، که $\varepsilon_c = 0$ انرژی روی هر سایت اتم کربن است و U_i پتانسیل ناشی از حضور نقیصه را در محاسبات وارد می‌کند. عدم حضور یک سایت اتمی هم ارز با بی‌نهایت بودن پتانسیل درست در جایگاه آن سایت است. در انجام محاسبات در نقاطی که دارای نقص است، $U_i = 2\gamma t_{i,j}$ فرض شده است [۱]. باید دقت کرد، هنگامی که در یک سایت، اتم وجود نداشته باشد، پارامتر انتگرال پرش بین آن سایت و سایت‌های همسایه نیز تغییر می‌کند، اما محاسبات نشان داده است، با فرض بی‌نهایت بودن انرژی پتانسیل در محل جافتادگی اتمی شبکه، می‌توان از تغییر آن صرف نظر کرد. در مورد نانونوارهای گرافنی با لبه‌ی آرمچیر، جافتادگی اتم‌های کربن به صورت جفتی محتمل‌تر است، زیرا ساختار شبکه در این شکل از لحاظ شیمیایی پایدارتر می‌باشد. برای محاسبه‌ی رسانندگی الکتریکی و توان گرمایی در چنین ساختاری روابط جریان الکتریکی و جریان انرژی گرمایی با فرمول لاندائو ارائه می‌شوند [۲]. با فرض آنکه اختلاف دما و سطح پتانسیل شیمیایی بین دو الکتروود بسیار ناچیز باشد، می‌توان پاسخ جریان‌ها را در ناحیه‌ی خطی محاسبه کرد و روابط $G = L_0$ و $S = -\frac{1}{kT} L_1/L_0$ را برای رسانندگی الکتریکی و توان گرمایی به دست آورد [۳]. به طوری که انتگرال $L_\beta = \int d\varepsilon T(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) (\varepsilon - \mu)^\beta$ وابسته به، $\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$ مشتق تابع توزیع فرمی-دیراک، اختلاف سطح انرژی پتانسیل

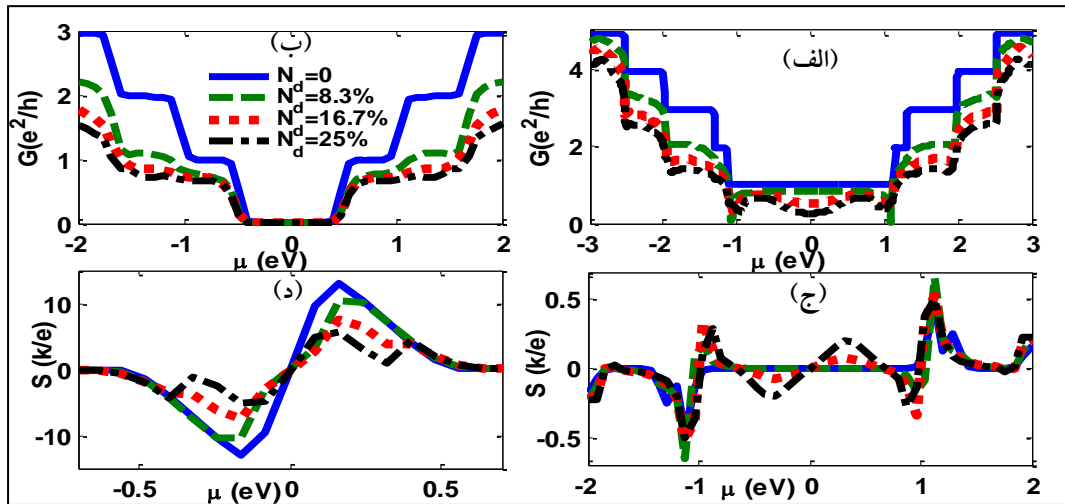
شیمیایی، μ ، با انرژی الکترون، ϵ ، در الکترودها و ضریب ترابرد الکترون از میان کانال:
 $T(\epsilon) = \text{trace}(\Gamma_L(\epsilon)G^r(\epsilon)\Gamma_R(\epsilon)G^{r'}(\epsilon))$ می‌باشد. تابع گرین سیستم به صورت زیر معرفی می‌گردد:

$$G^r(\epsilon) = [(\epsilon + i\eta)I - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1}, \quad (2)$$

H_C هامیلتونی مربوط به ناحیه کانال است (جمله میانی در رابطه (۱)) و $\Sigma_{L(R)}$ خودانرژی است که در بردارنده‌ی اثرات ناشی از اتصال الکترودها به کانال می‌باشد و با روش تکرار $[\epsilon]$ قابل حصول است. تابع پهن شدگی:
 $\Gamma_\alpha(\epsilon) = -i(\Sigma_\alpha - \Sigma_\alpha^+)$ و η برابر با یک مقدار محدود بسیار کوچک است.



شکل ۱: (الف) و (ب) چگالی حالت‌ها، (ج) و (د) ضریب ترابرد الکترون برای نانونوارگرافی آرمچیر برحسب انرژی $n_2=11$ در (الف) و (ج) و $n_2=9$ در (ب) و (د) می‌باشد.



شکل ۲: (الف) و (ب) رسانندگی الکتریکی و (ج) و (د) توان گرمایی برحسب پتانسیل شیمیایی، $kT=0.2(eV)$ در $n_2=11$ در (الف) و (ج) و $n_2=9$ در (ب) و (د) می‌باشد.

تعداد اتم‌های کربن واقع در عرض نانونوار آرمچیر در بروز خصوصیات فلزی یا نیمه رسانایی آن موثر است. در این مقاله، $n_2=9$ و $n_2=11$ در نظر گرفته شده است که در آن‌ها به ترتیب ۹ و ۱۱ اتم کربن در عرض نانونوار قرار دارند و

۶ سلول واحد آرمچیر در طول کانال فرض شده است. در حالتی که $n_2 = 9$ است، در ضریب ترابرد الکترون و چگالی حالات گاف مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده‌ی نیمه‌رسانا بودن آن است، در حالی که در $n_2 = 11$ ، $T(\mathcal{E})$ در هیچ محدوده‌ای صفر نیست و این عرض از نانونوارگرافن رفتار فلزی دارد (خط پر در شکل ارا ببینید). بعلاوه، نتایج نشان می‌دهد که وجود نقص‌های لبه‌ای تأثیری بر تغییر ماهیت نانونوارگرافن از فلز به نیمه‌رسانا و بالعکس ندارد. N_d درصدی از لبه‌ها که در ناحیه‌ی کانال دچار نقص شده‌اند را نشان می‌دهد. همانطور که از شکل ۱ پیداست، افزایش درصد نقیصه، ارتفاع پیک-های چگالی حالت را کاهش می‌دهد و موجب تغییر جایگاه پیک‌ها بر حسب انرژی، مخصوصاً در اولین پیک، می‌شود که ناشی از اثرات تداخل کوانتومی است. در هر دو نمونه‌ی انتخابی، افزایش نقیصه، ضریب ترابرد الکترونی را کاهش می‌دهد، زیرا الکترون در مسیر حرکت خود از میان کانال با پتانسیل‌های ناشی از عدم حضور اتم‌های کربن مواجه می‌شود و این خود سبب پراکندگی الکترون می‌گردد.

در شکل ۲ نمودارهای رسانندگی الکتریکی بسیار شبیه به ضریب ترابرد الکترون است، چرا که مهمترین عامل در رابطه‌ی G می‌باشد. گاف رسانندگی الکتریکی در شکل ۲ (ب) کاملاً مشهود است، در حالیکه در قسمت (الف) گافی مشاهده نمی‌شود و نانونوار رفتار فلزگونه دارد. با افزایش نقیصه در لبه‌ها رسانندگی الکتریکی مشابه با ضریب ترابرد کاهش می‌یابد. در شکل ۲ (ج) و (د) توان گرمایی نانونوارگرافنی رسم شده است که علامت آن نوع حامل‌های بار را مشخص می‌کند؛ زمانی که حفره‌ها در ترابرد شرکت می‌کنند توان گرمایی مثبت است و با حضور یافتن الکترون‌ها در ترابرد علامت آن منفی می‌شود. توان گرمایی نانونوار فلزی در مقایسه با نانونوار نیمه‌رسانا ناچیز است. با افزایش نقیصه‌های لبه‌ای، پیک‌های کوچک جدیدی در اطراف $\mu=0$ در شکل ۲ (ج) ظاهر می‌شود که ناشی از کم شدن ضریب ترابرد در حضور نقیصه است. در شکل ۲ (د) توان گرمایی بیشینه در محدوده‌ای از پتانسیل شیمیایی قرار دارد که رسانندگی الکتریکی در آن صفر است. با افزایش نقیصه، ارتفاع نوسان‌های توان گرمایی حول پتانسیل شیمیایی صفر کاهش می‌یابد که این نشان‌دهنده‌ی کم شدن قدرت تونل‌زنی گرمایی حامل‌های بار در نانونوارگرافنی نیمه رساناست.

نتیجه‌گیری

ترابرد بار در نانونوارهای گرافنی آرمچیر در حضور نقیصه‌هایی در لبه‌ی آن مورد بررسی قرار گرفت. محاسبات در چارچوب تقریب تنگ بست با استفاده از رهیافت تابع گرین انجام شد. چگالی حالت‌ها، ضریب ترابرد الکترون، رسانندگی گرمایی و توان گرمایی نانونوارگرافنی آرمچیر محاسبه شد. نتایج نشان داد که حضور نقیصه در لبه‌ی ساختار، بر ترابرد حامل‌های بار تأثیر می‌گذارد و چگالی حالات و ضریب ترابرد را تغییر می‌دهد به طوری که با افزایش درصد نقیصه‌ها، رسانندگی الکتریکی در نانونوار کاهش یافته و بیشینه‌ی توان گرمایی که در نانونوار نیمه‌رسانا گونه اتفاق می‌افتد کم می‌شود، در حالیکه، نوسان‌های کوچک جدیدی در توان گرمایی نانونوارگرافنی با خصوصیات فلزی ظاهر می‌گردد.

References

- [1] G. Y. Sun, Y. J. Zhu, *Journal of electronic materials*, **42** (2013) 1.
- [2] H. Haug, A. P. Jauho, "Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors", Springer, Berlin, 2008.
- [3] S. Izadi, M. B. Tagani, H. R. Soleimani, *Physica E*, **53** (2013) 200.
- [4] M. P. L. Sancho, J. M. L. Sancho, *Journal of Physics F*, **15** (1985) 851.