مشخصات الکترونیکی گرافین و گرافین با بی‌نظمی طلا

الهام بهروزی‌کیا[1]، عزیزاله شفیع خانی[2]، علی اصغر شکری[3]

1- گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد تهران شمال

2- گروه فیزیک، دانشگاه الزهرا و پژوهشکده فیزیک، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی

3 - گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور و پژوهشکده علوم نانو، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی

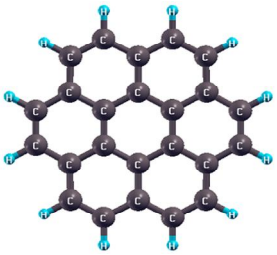
چکیده

در این مقاله به مطالعه نظری گرافین و گرافین با ناخالصی طلا پرداخته و خواص الکترونیکی آن ها را مورد بررسی قرار می دهیم. محاسبات با استفاده از کد SIESTA، تحت رهیافت نظریه تابعی چگالی انجام شده است. برای محاسبه پتانسیل تبادلی – همبستگی از تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) استفاده شده است. در تمامی موارد با استفاده از نتایج به دست آمده چگالی حالت‌ها، پایداری، گاف نواری و قطبش - اسپینی را بررسی نموده‌ایم. گاف نواری در ساختار گرافین با ناخالصی طلا به اندازه 1.84242 eV کاهش یافته است. پایدارترین حالت مربوط به ساختار گرافین با ناخالصی طلا است. هیبریداسیون در گرافین و گرافین با ناخالصی طلا میان اوربیتال S اتم هیدروژن و اوربیتال P اتم کربن وجود دارد. همچنین در گرافین با ناخالصی طلا میان اوربیتال d اتم طلا با اوربیتال P اتم کربن نیز هیبریداسیون وجود دارد. قطبش اسپینی در گرافین صفر بوده ولی گرافین با ناخالصی طلا دارای قطبش اسپینی است.

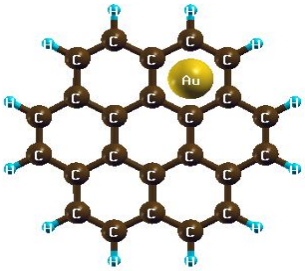
گرافین، تک لایه‌ای از اتم‌های کربن است که در دو بعد، با ساختار لانه زنبوری در کنار هم قرار گرفته‌اند. با این که گرافین به مدت شصت سال به صورت تئوری مورد بررسی قرار گرفته است[1]، اما عواملی باعث می‌شد که این ماده از جنبه عملی چندان مورد توجه قرار نگیرد. اول این که دیدن این ماده بسیار نازک، خیلی دشوار بود و دوم این که بیش از هفتاد سال پیش، وجود گرافین به عنوان ماده‌ای دو بعدی ناممکن دانسته می‌شد. ویژگی‌های بسیار جالب گرافین سبب شد تا این ماده بیشتر مورد توجه قرار گیرد و نظر بسیاری از پژوهشگران و دانشمندان را به خود جلب کند. از جمله این ویژگی‌ها می توان به ویژگی‌های مکانیکی و الکتریکی اشاره کرد. درباره ویژگی‌های مکانیکی می‌توان گفت که این ماده در برابر فشار بسیار مقاوم بوده و می تواند فشار زیادی را تحمل کند[2].

مواد و روش‌ها

تمامی محاسبات با کد SIESTA بر اساس نظریه تابعی چگالی و تحت تقریب گرادیان چگالی تعمیم یافته انجام شده است. دقت شبکه بندی بوسیله پارامتر mesh cutoff امواج تخت انجام می‌شود که در این محاسبات از امواج تخت با انرژی کمتر از 200 Ry صرف نظر می‌کنیم [3]. در این مقاله به شبیه سازی صفحه گرافین $C_{24}H_{12}$ در حضور و غیاب ناخالصی طلا (شکل 1و2) می‌پردازیم. در تمامی موارد بر اساس نتایج به دست آمده چگالی حالت‌های انرژی، پایداری، قطبش اسپینی و گاف نواری مدل ها مورد بحث قرار گرفته است.



شکل 1 صفحه گرافین



شکل 2. گرافین با ناخالصی طلا

از روی مقدار انرژی کل می‌توان پایداری ساختار را مورد بررسی قرار داد. گاف نواری تفاوت بین انرژی HOMO و LUMO است. انرژی فرمی به عنوان انرژی بالاترین اوربیتال پر در صفر مطلق است. در جدول 1و 2 مقادیر انرژی کل، انرژی فرمی و گاف نواری گرافین در غیاب و حضور ناخالصی طلا نشان داده شده است. از مقایسه مقادیر به دست آمده می‌توان فهمید که ناخالصی طلا در صفحه گرافین باعث افزایش پایداری این ساختار نسبت به ساختار دیگر شده است. همچنین افزودن طلا سبب کاهش گاف ساختار به اندازه 1.84242 eV می‌شود. ترازهای ساختار گرافین در حضور نانوذره طلا دارای قطبش اسپینی است در حالی که ساختار گرافین در غیاب نانوذره طلا فاقد قطبش اسپینی است. نوع و طول پیوندهای کربنی در این دو ساختار مشابه یکدیگر است. وجود طلا سطح را کمی از حالت تخت خارج می کند.

جدول 1. انرژی کل، انرژی فرمی، گاف نواری گرافین

انرژی کل (eV)	-4085.190089
انرژی فرمی (eV)	-3.0566
گاف نواری (eV)	-2.79397

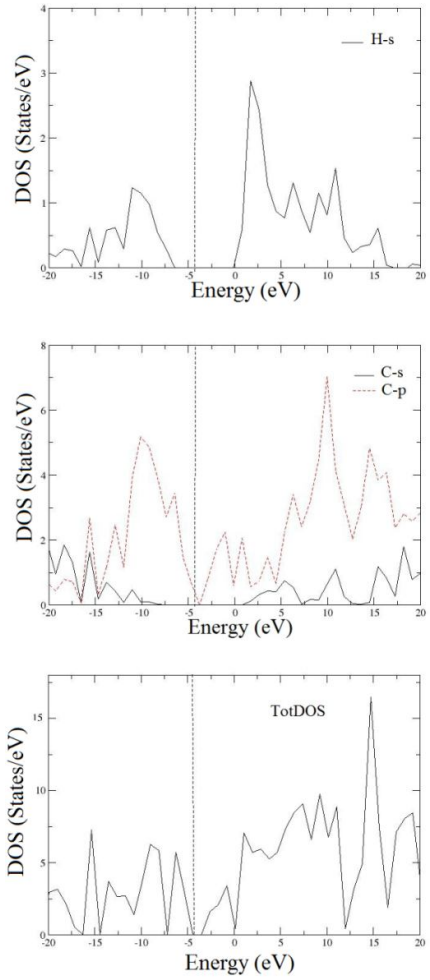
جدول2. انرژی کل، انرژی فرمی، گاف نواری گرافین در حضور ناخالصی طلا

انرژی کل (eV)	-5048.168455
انرژی فرمی (eV)	-3.0255
گاف نواری (eV)	-0.95155

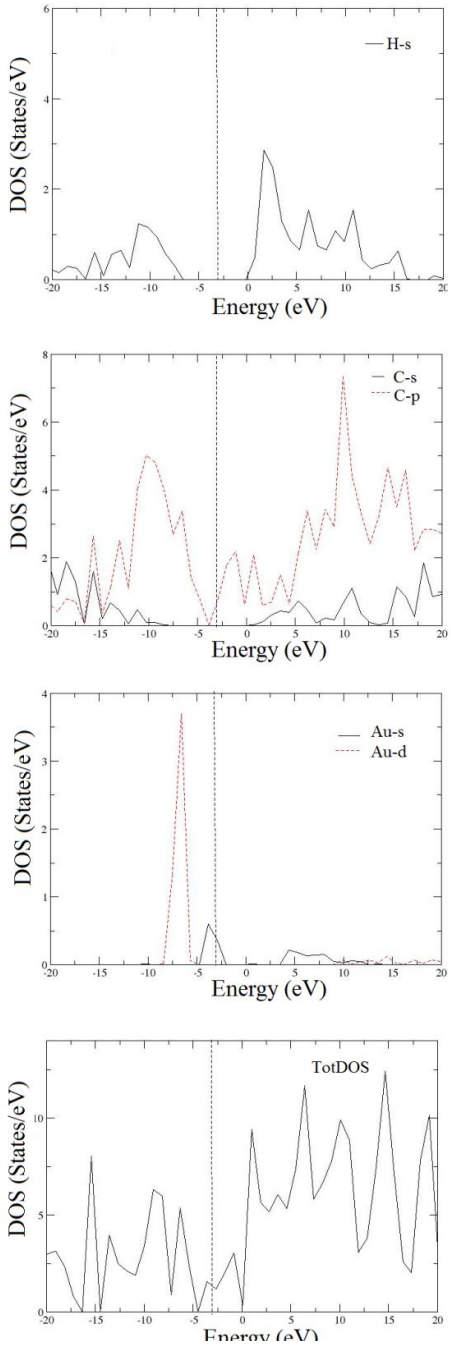
چگالی حالت‌های انرژی گرافین و گرافین با ناخالصی طلا در شکل های 3 و4 نشان داده شده است. در گرافین و گرافین با ناخالصی طلا هیبریداسیون میان اوربیتال S اتم هیدروژن و اوربیتال های S و P اتم کربن وجود دارد. در ساختار گرافین با ناخالصی طلا هیبریداسیون بین اوربیتال d اتم طلا با اوربیتال P اتم کربن وجود دارد. همان طور که در نمودار TotalDOS این دو ساختار نشان داده شده است قله TotalDOS صفحه گرافین با ناخالصی طلا تیزتر است که این به دلیل حضور نانوذره طلا است.

نتیجه گیری

ما در این مقاله به شبیه سازی دو ساختار گرافین و گرافین با ناخالصی طلا پرداختیم. در نتیجه افزودن ناخالصی طلا به گرافین، پایداری به صورت قابل توجه‌ای افزایش یافت. گاف نواری در ساختار گرافین با ناخالصی طلا به اندازه 1.84242 eV کاهش می‌یابد. قطبش اسپینی در گرافین صفر بوده ولی گرافین با ناخالصی طلا دارای قطبش اسپینی است. هیبریداسیون در گرافین و گرافین با ناخالصی طلا میان اوربیتال S اتم هیدروژن و اوربیتال P اتم کربن وجود دارد. همچنین در گرافین با ناخالصی طلا بین اوربیتال d اتم طلا با اوربیتال P اتم کربن نیز هیبریداسیون وجود دارد. شایان ذکر است در این پژوهش بررسی نظری گرافین در حضور ناخالصی طلا برای اولین بار انجام گرفته است.



شکل 3. چگالی حالت گرافین، خط چین بیانگر محل انرژی فرمی است



شکل 4. چگالی حالت های گرافین با ناخالصی طلا

مراجع

[1] P. R. Wallace, *The Band Theory of Graphite*, Phys. Rev, 71 (1947) 622-634.

[2] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, and J. Hone, *Measurement of The Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene*, Science, 321 (2008) 385-388.

[3] N. Troullier, J. L. Martins, *Effiecient pseudopotentials for plane-wave calculations*, Phys. Rev. B 43 (1991) 1993-2006.