اثر جذب مولکول تتراسیانواتیلن روی خواص الکترونی گرافن و گرافین

رویا مجیدی[۱]، علیرضا کرمی[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

[۲] گروه شیمی، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

چکیده

گرافن و گرافین دارای خاصیت شبه فلزی می باشند. عدم حضور گاف انرژی در ساختار الکترونی گرافن و گرافین مانعی برای کاربرد این نانوساختارهای کربنی در نانوالکترونیک می باشد. در این مقاله امکان ایجاد گاف انرژی با جذب یک مولکول آلی بنام تتراسیانواتیلن مورد مطالعه قرار گرفته است. ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات الکترونی با استفاده از نظریه تابعی چگالی محاسبه شده اند. با جذب مولکول تتراسیانواتیلن، گرافن و گرافین به نیمرسانا با گاف انرژی کوچک تبدیل می شوند. نتایج حاکی از آن است که جذب مولکول تتراسیانواتیلن روش ساده ای برای ایجاد گاف انرژی در نانوساختارهای کربنی می باشد.

گرافن صفحه ای دوبعدی متشکل از اتم های کربن در یک پیکربندی لانه زنبوری است [۱]. این نانوساختار کربنی به دلیل ساختار و خواص جالب خود کاربردهای متنوعی داشته است. در میان ویژگی های مختلف گرافن، خواص الکترونی این ماده را تبدیل به زیربنایی برای طراحی و ساخت قطعات الکترونیکی نموده است [۲].

در سال های اخیر، آلوتروپ جدیدی از کربن به نام گرافین مطرح شده است [۳ و ٤]. گرافین مشابه گرافن دارای ساختار دوبعدی از اتم های کربن است که با جایگزین شدن اتصالات استیلن به جای برخی پیوندهای کربن در گرافن ساخته می شوند. خواص الکترونی گرافین به دلیل وجود مخروط دیراک مشابه گرافن، توجه زیادی را به خود جلب نموده است [۳ و ٤]. گرافین می تواند رقیبی جدی برای گرافن در نانوالکترونیک باشد. بنابراین مطالعه خواص الکترونی این نانوساختار کربنی و اثر عوامل مختلف روی آن ضروری است.

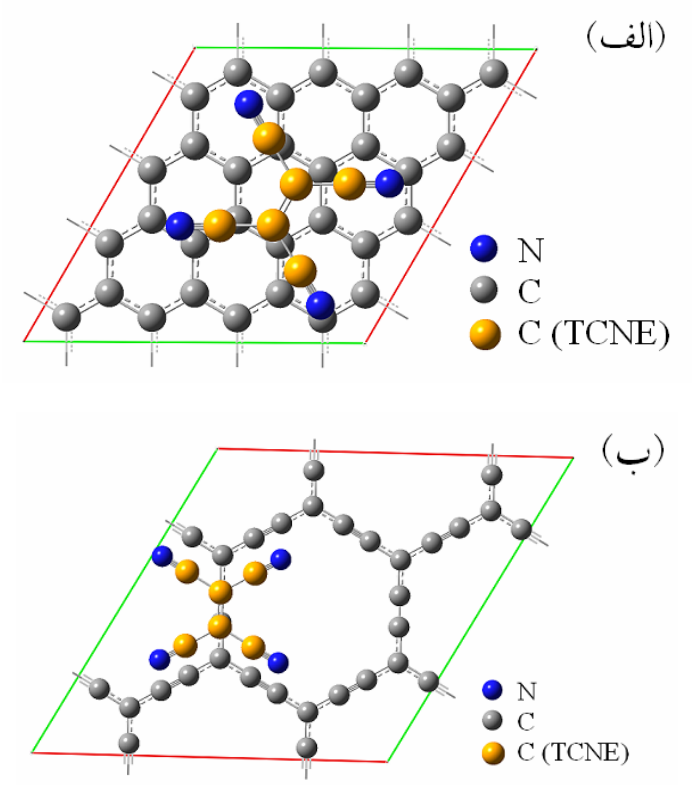
گرچه خواص الکترونی گرافن و گرافین برای سیستم های نانوالکتریکی امیدوار کننده است، ولی عدم وجود گاف کاربرد گرافن و گرافین را محدود می کند. رسانش الکتریکی را می توان در این مواد کنترل کرد، ولی به علت عدم وجود گاف انرژی، امکان قطع رسانش وجود ندارد [۵]. اخیرا تلاش های بسیاری برای ایجاد گاف انرژی در گرافن شده است و روش های مناسبی مانند اعمال میدان الکتریکی و یا ایجاد نقص و ناخالصی مطرح شده اند [٦–۸]. در این مقاله ایجاد گاف انرژی در گرافن و گرافین با استفاده از جذب مولکول آلی تتراسیانواتیلن (TCNE) بررسی شده است.

جزئیات محاسبات

محاسبه ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات بر مبنای نظریه تابعی چگالی و با استفاده از نرم افزار OpenMX3.6 انجام شده است [۹]. در محاسبات از تابعی PBE و تقریب گرادیان تعمیم یافته برای پتانسیل تبادلی–همبستگی استفاده نموده ایم. انرژی قطع Ry ۱۰۰ انتخاب شده است. در هر یک از راستاهای با تقارن بالا ٤۱ نقطه k در نظر گرفته شده است.

در اینجا ابرسلول گرافن با ٤×٤ سلول واحد و ابرسلول گرافین نوع آلفا با ۲×۲ سلول واحد با ۳۲ اتم کربن در نظر گرفته شده اند (شکل ۱). شرایط مرزی تناوبی در همه راستاها اعمال شده است. در هر ابرسلول یک مولکول TCNE جذب شده است. به منظور تعیین پایدارترین ساختار، مولکول TCNE در مکان ها، جهات و فواصل مختلف نسبت به صفحات گرافن و گرافین قرار گرفته است. انرژی جذب کلیه ساختارها محاسبه و مقایسه شده است. ساختارهای با کمترین

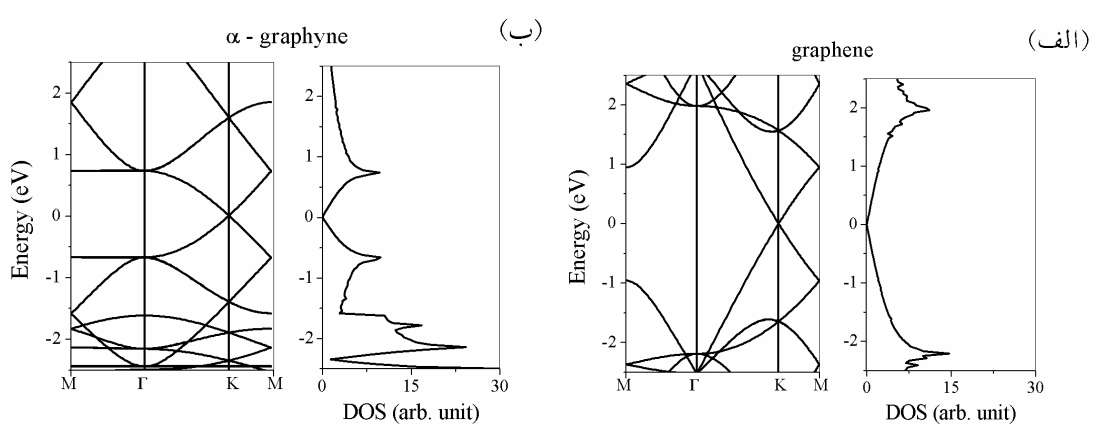
انرژی جذب به عنوان پایدارترین ساختارها انتخاب شده اند. تصویر شماتیکی از پایدارترین ساختارهای گرافن و گرافین در حضور TCNE جذب شده در شکل ۱ آورده شده است.



شکل۱ : ساختار ابرسلول (الف) گرافن ٤×٤ و (ب) گرافین نوع آلفا ۲×۲ در حضور TCNE

خواص الکترونی گرافن و گرافین

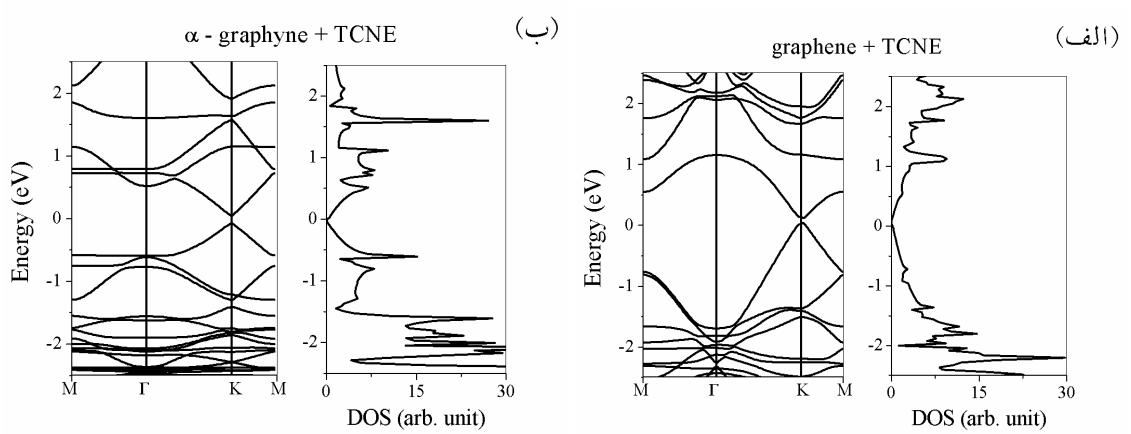
ابتدا خواص الکترونی گرافن و گرافین نوع آلفا بررسی شده است. در شکل ۲ ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات این ساختارها در طول جهات با تقارن بالا M - Γ - K - M نشان داده شده است. مشاهده می شود که نوار ظرفیت و نوار رسانش در تراز انرژی فرمی (انرژی صفر) یکدیگر را قطع می کنند. مقدار چگالی حالات در تراز انرژی فرمی صفر است. بنابراین گرافن و گرافین نوع آلفا دارای خاصیت شبه فلزی هستند. نتایج با مطالعات قبلی همخوانی دارد [۲-٤].



شکل۲ : ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات (الف) گرافن و (ب) گرافین نوع آلفا

خواص الکترونی گرافن و گرافین در حضور TCNE

در شکل ۳ ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات گرافن و گرافین در حضور مولکول TCNE نشان داده شده است. نتایج حاکی از آن است که جذب مولکول TCNE باعث ایجاد شکافی میان نوار ظرفیت و نوار رسانش در تراز انرژی فرمی شده است. گاف انرژی گرافن و گرافین در حضور مولکول TCNE به ترتیب ۰/۱۱ eV و ۰/۱٤ eV می باشد. بنابراین جذب مولکول TCNE باعث تغییر چشمگیری درخواص الکترونی گرافن و گرافین نوع آلفا شده است و رفتار این نانوساختارها از شبه فلزی به نیمرسانایی تغییر یافته است.



شکل۳ : ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات (الف) گرافن و (ب) گرافین آلفا در حضور TCNE

نتیجه گیری

در این مقاله اثر جذب مولکول TCNE روی خواص الکترونی گرافن و گرافین نوع آلفا با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات گرافن و گرافین نوع آلفا قبل و بعد از جذب مولکول TCNE مقایسه شده است. جذب مولکول TCNE باعث تغییر خاصیت شبه فلزی این مواد و ایجاد خاصیت نیمرسانایی آنها شده است. نتایج حاکی از آن است که می توان با جذب مولکول های آلی مانند TCNE در گرافن و گرافین گاف انرژی ایجاد نمود و خواص این نانوساختارهای کربنی را برای استفاده در نانوالکترونیک بهبود بخشید.

مرجع‌ها

1. A.K. Geim, K.S. Novoselov, *Nature Materials* **6** (2007) 183.
2. M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R.Saito, *Carbon* **33** (1995) 883.
3. D. Malko, C. Neiss, F. Viñes, A. Görling, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 086804.
4. A.L. Ivanovskii, Prog. *Solid State Chem.* **41** (2013) 1.
5. T.H. Wang, Y.F. Zhu, Q. Jiang, *J. Phys. Chem.* C **117** (2013) 12873.
6. Y.H. Lu, W. Chen, Y.P. Feng, P.M. He, *J. Phys. Chem.* B **113** (2009) 2.
7. M. Chi, Y-P, Zhao, *Comp. Mat. Sci.* **56** (2012) 79.
8. K. Novoselov, *Nature Matter* **6** (2007) 720.
9. T. Ozaki, H. Kino, J. Yu, M.J. Han, N. Kobayashi, M. Ohfuti, F. Ishii, et al. User's manual of OpenMX version 3.6. http://www.openmx-square.org