

## مقاله‌نامه بیست و سومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۰-۲۹ اردیبهشت ۱۳۹۵)

### رسانندگی الکتریکی نانونوارهای گرافنی آرمچیر در حضور پارامتر گاف

حامد رضانیا<sup>۱</sup>، شبنم گلی<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup> دانشگاه رازی

<sup>۲</sup> دانشگاه رازی

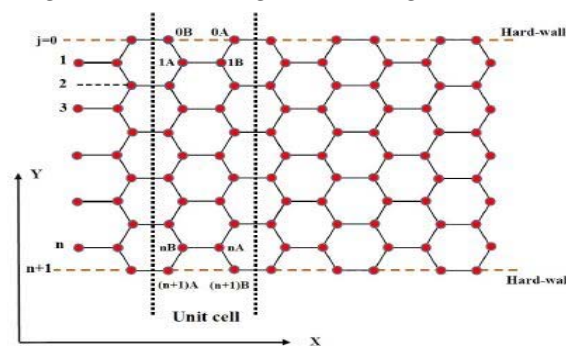
#### چکیده

هدف از این مقاله بررسی خواص الکتریکی نانونوارهای گرافنی آرمچیر با استفاده از مدل تنگ بست است. همچنین ما رفتار چگالی حالات و رسانندگی الکتریکی را با اعمال اثرگاف، عرض نوار و پتانسیل شیمیایی را مورد بررسی قرار می‌دهیم. روش تابع گرین به منظور محاسبه رسانندگی الکتریکی و چگالی حالات سیستم بکار برده می‌شود. واژه‌های کلیدی: آرمچیر، نانونوار، تابع گرین

گرافن یک تک لایه از گرافیت است که به علت خواص الکتریکی و گرمایی اخیراً توجهات زیادی را به خود جلب کرده است [1,2,3]. حضور لبه‌ها در گرافن دارای پیامدهای قوی برای طیف کم انرژی از الکترونهای  $\pi$  می‌باشد [4,5,6]. دوشکل اساسی و مهم لبه وجود دارد، آرمچیر و زیگزراگ که خواص نوارهای گرافنی را تعیین می‌کنند. پیش بینی می‌شود که همه نانونوارهای گرافنی زیگزراگ با حالت‌های موضعی در لبه‌ها، فلزی هستند [7,8]. در حالیکه نانونوارهای گرافنی آرمچیر فلزی یا عایق هستند که این موضوع به عرض نوار بستگی دارند [7]، اثرهایی از عرض نوار دارای غلظت الکترونی بر دمای مربوط به رسانندگی الکتریکی از نانونوارهای گرافنی آرمچیر در زمینه مدل هامیلتونین تنگ بست را مطالعه می‌کنیم. برای رسانندگی الکتریکی ایستا از مدل تابع گرین استفاده می‌شود با این اوصاف با استفاده از ساختار نواری الکتریکی میتوان عناصر ماتریس را به راحتی از تابع گرین بدست آورد. نتایج عددی ما چگونگی اثر عرض نوار، پارامتر گاف و پتانسیل شیمیایی بر وابستگی دمایی در رسانندگی الکتریکی را نشان می‌دهند. مدل تنگ بست هامیلتونین برای رفتار الکترون های  $\pi$  با فرض نزدیکترین همسایه‌ها به صورت زیر معرفی می‌شود:

$$H = -t \sum_{\langle m|m' \rangle} (C_m^\dagger C_{m'} + h.c) + \sum_m (\epsilon_m C_m^\dagger C_m) \quad (1)$$

ساختار بلوری نانونوارهای گرافنی آرمچیر شامل دو زیر شبکه A, B است، وسلول واحد آن از n اتم نوع A و n اتم نوع B تشکیل شده، که در شکل ۱ نشان داده شده است. به منظور به دست آوردن ساختار الکتریکی نانونوار گرافنی آرمچیر نیاز به معرفی عملگرهای خلق و فنا داریم



شکل ۱: ساختار نانونوار گرافنی آرمچیر که دو محدوده  $j=0, n+1$  بر هر دو مرز اعمال شده است.

مقاله‌نامه بیست و سومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۰-۲۹ اردیبهشت ۱۳۹۵)

$$\text{متعلق به منطقه اول بریلیون با} \left\{ \begin{array}{l} C_{A,k_x,p}^\dagger = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sum_{i=1}^n \sin\left(\frac{p\pi}{n+1}i\right) C_{A_i,k_x}^\dagger \\ C_{B,k_x,p}^\dagger = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sum_{i=1}^n \sin\left(\frac{p\pi}{n+1}i\right) C_{B_i,k_x}^\dagger \end{array} \right. \quad (2) K_x$$

ثابت شبکه  $3a$ ،  $n$  عرض نوار و  $p$  یک عدد صحیح با مقادیر  $p=1, \dots, n$  می باشد.

بنابراین هامیلتونی به شکل زیر بدست می آید:

$$H = \sum_{k_x,p} (f(k_x,p) C_{A,k_x,p}^\dagger C_{B,k_x,p} + h.c.) - \sum_{k_x,p} (\epsilon_A C_{A,k_x,p}^\dagger C_{A,k_x,p} + \epsilon_B C_{B,k_x,p}^\dagger C_{B,k_x,p}) \quad (3)$$

بطوریکه:

$$f(k_x,p) = -t[2\exp\left(\frac{ik_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{p\pi}{n+1}\right) + \exp(-ik_x a)]$$

با فرض  $\epsilon_A = -\epsilon_B = \frac{\Delta}{2}$ ، انرژی نوار بصورت زیر بدست می آید:

$$E_{\pm}(k_x,p) = \pm\sqrt{\Delta^2 + |f(k_x,p)|^2} \quad (4)$$

معرفی شده است. با استفاده از طیف نوار انرژی در معادله (4) هامیلتونین در معادله (3) به صورت زیر نوشته میشود.

$$H = \sum_{k_x,p,\eta=\pm} E_{\eta}(k_x,p) C_{\eta,k_x,p}^\dagger C_{\eta,k_x,p} \quad (5)$$

همچنین

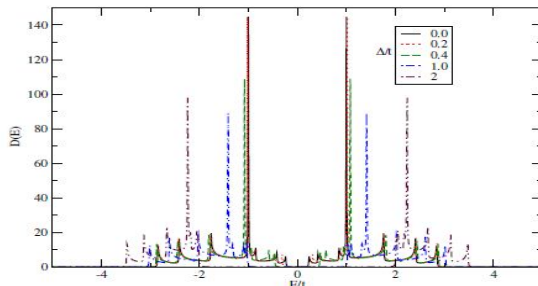
تابع گرین به شکل زیر معرفی میشود:

$$G_{\eta,p}(k_x, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E_{\eta}(k_x,p) + \mu} \quad (6)$$

فضای نواری، رسانندگی الکتریکی نانونوارهای گرافنی آرمچیر به صورت زیر بدست می آید:

$$\sigma_{xx}(T) = \frac{e^2}{4nN} \sum_{k_x,p,\eta} \left( \frac{\partial E_{\eta}(k_x,p)}{\partial k_x} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \left( \frac{\partial n f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right) \left( 2\text{Im} G_{\eta,p}(k_x, i\omega_n \rightarrow \epsilon + i0^+) \right) \quad (7)$$

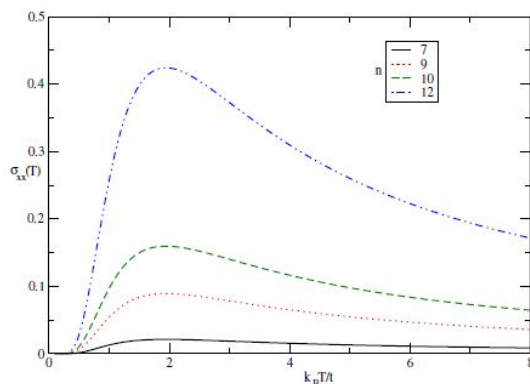
نمودار چگالی حالات بر حسب انرژی برای عرض  $n=7$  به ازای مقادیر مختلف از پارامتر گاف  $\Delta/t$  در شکل ۲ رسم کرده ایم. مشاهده می شود که افزایش اختلاف انرژی درون سایتی باعث افزایش پارامتر گاف  $\Delta$  می شود که در نتیجه باعث افزایش گاف نواری در چگالی حالات میشود همچنین عرض چگالی حالات با پارامتر گاف افزایش می یابد.



شکل ۲: چگالی حالات الکترونی برای نانونوارهای گرافنی آرمچیر عرض  $n=7$

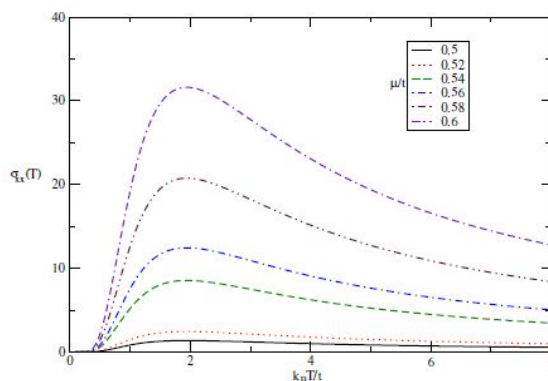
## مقاله‌نامه بیست و سومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۰-۲۹ اردیبهشت ۱۳۹۵)

نمودار استاتیکی رسانندگی الکتریکی نانونوار گرافنی آرمچیر را بدون گاف یعنی  $\Delta/t=0$  براساس دمای  $k_B T/t$  برای مقادیر مختلف عرض  $n$  در شکل ۳ رسم کرده ایم. این نمودار نشان می‌دهد که رسانندگی الکتریکی برای دمای محدود غیر صفر، برای همه ی  $n$  ها صفر میشود. در یک دمای ثابت رسانندگی الکتریکی با عرض نوار زیاد میشود چرا که گاف انرژی کاهش می یابد.



شکل ۳: رسانندگی الکتریکی نانونوارگرافنی آرمچیر براساس دمای  $k_B T/t$  برای عرض های مختلف نوار

شکل ۴، رفتار رسانندگی الکتریکی براساس دما را برای نانونوارهای گرافنی آرمچیربا عرض  $n=7$  برای پتانسیل های شیمیایی مختلف نشان میدهد مبینیم که افزایش پتانسیل شیمیایی موجب برانگیختگی الکتریکی بیشتر میشود که در نتیجه رسانندگی الکتریکی افزایش می یابد.



شکل ۴: رسانندگی الکتریکی نانونوار گرافنی آرمچیر برحسب دمای  $k_B T/t$  برای عرض  $n=7$

مراجع

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubons, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* 306, 666 (2004).
- [2] A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nature Mater* 6, 183 (2007).
- [3] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, and C. N. Lau, *Nano Lett* 8, 902 (2008).
- [4] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe, *J. Phys. Soc. Jpn* 65, 1920 (1996).
- [5] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* 54, 17954(1996).
- [6] M. Ezawa, *Phys. Rev. B* 73, 045432 (2006).
- [7] K. Sasaki, S. Murakami, and R. Saito, *J. Phys. Soc. Jpn* 75,074713 (2006).
- [8] K. Sasaki, S. Murakami, and R. Saito, *Appl. Phys. Lett* 88, 113110 (2006).