

بررسی افزایش طول بر ترابرد الکترونی نانو روبان گرافینی دسته صندلی در حضور ناخالصی نیتروژن

شریفه آقامیری اصفهانی و مریم صداقت‌نیا

دانشکده فیزیک، دانشگاه خيام مشهد

(دریافت مقاله: ۱۳۹۳/۷/۴؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۴/۳/۱۵)

چکیده

در این یادداشت اثر افزایش طول بر ترابرد الکترونی یک نانوروبان گرافینی دسته صندلی در دو حالت بدون ناخالصی و در حضور ناخالصی اتم نیتروژن مورد بررسی قرار داده شده است. سامانه مولکولی به دو الکتروود یک بعدی نیمه بی‌نهایت متصل و از اثرات برهم‌کنش الکترون - الکترون چشم پوشی شده است. سامانه مورد نظر با یک مدل تنگ بست ساده توصیف شده و همه محاسبات بر پایه رهیافت تابع گرین و روش محاسباتی لانداور - بوتیکر می‌باشد، الکترودها در تقریب نوار پهن توصیف شده‌اند.

واژه‌های کلیدی: ترابرد کوانتومی، نانوروبان گرافینی، مدل تنگ بست، رهیافت تابع گرین، روش لانداور - بوتیکر، تقریب نوارپهن

۱. مقدمه

سال‌های اخیر شناسایی و کشف شده است. گرافین می‌تواند به عنوان یک تک لایه به ضخامت یک اتم از گرافیت جدا شود. گرافین اولین ماده دوبعدی از اشکال مختلف کربن است و دارای خواص و ویژگی‌های منحصر به فردی می‌باشد که آن را برای تحقیقات و کاربردهای آینده مورد توجه ساخته است. گرافین بسیار سبک و انعطاف‌پذیر بوده و از شفافیت بالایی برخوردار است. گرافین فاقد گاف انرژی است و در نتیجه نمی‌توان از آن در دستگاه‌های الکترونی مبتنی بر گرافین استفاده کرد. با محدود کردن گرافین و ساخت نانوروبان‌های گرافینی می‌توان شکافی قابل تنظیم در نوار انرژی آن ایجاد کرد. بررسی

کربن موجود در طبیعت در بسیاری اشکال مختلف نظیر گرافیت، الماس، فولرین‌ها، نانولوله‌ها و ... وجود دارد [۱]. رایج‌ترین شکل کربن از انباشته شدن ورقه‌های کربن شش ضلعی روی همدیگر به وجود می‌آید و گرافیت نامیده می‌شود. تحت فشار زیاد الماس شکل می‌گیرد که یک فرم پایدار از کربن است. فرم دیگری از کربن فولرین‌ها هستند که کروی شکل بوده و همانند توپ می‌باشند. فرم یک بعدی کربن که از رول شدن ورقه‌های کربن به دست می‌آید، نانولوله‌های کربنی هستند. گرافین یکی دیگر از اشکال بلوری کربن است که در

همسایه‌ها با استفاده از تقریب تنگ‌بست و برای اوربیتال‌های π که مسئول ویژگی‌های الکترونی در انرژی‌های پایین هستند [۱] چنین نوشته می‌شود:

$$H = E_0 \sum_i c_i^\dagger c_i + t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_{j+} + c_j^\dagger c_i) \quad (1)$$

c_i^\dagger (c_i) عملگر خلق (نابود) الکترون در جایگاه i ام است. عبارت $\langle i,j \rangle$ اشاره به برهم‌کنش نزدیک‌ترین همسایه‌ها دارد. انرژی جایگاه الکترون E_0 انرژی فرمی است و می‌توان آن را بر روی صفر تنظیم کرد. t پارامتر پرش است. رسانندگی یک نانوروبان گرافنی با هامیلتونی H در حضور دو الکترون یک بعدی نیمه بی‌نهایت در رژیم پاسخ خطی و پراکندگی همدوس الکترون با استفاده از فرمول لاندور متناسب با ضریب عبور $T(E)$ است و از رابطه فیشر - لی به دست می‌آید [۴]:

$$G = \frac{2e^2}{h} T(E) \quad (2)$$

که در آن $T(E)$ ضریب عبور الکترونی است [۴]:

$$T(E) = \text{Tr} \left[\Gamma_L(E) G^R(E) \Gamma_R(E) G^A(E) \right] \quad (3)$$

در این رابطه $G^{R(A)}(E)$ تابع گرین تأخیری (پیشرفته) و $\Gamma_{L(R)}(E)$ تابع پهن‌شدگی [۱]:

$$G^{R(A)}(E) = \left[(E+i)I - H - \Sigma_L(E) - \Sigma_R(E) \right]^{-1}, \quad (4)$$

است. در روابط بالا، I ماتریس یکانی، E انرژی الکترون تزریق شده به سیستم و η یک مقدار بسیار کوچک می‌باشد. $\Sigma_{L(R)}(E)$ خود - انرژی مربوط به جفت‌شدگی نانوروبان گرافنی به الکترودهای چپ و راست هستند. این خود انرژی‌ها در تقریب نوار پهن بررسی شده‌اند؛ در این تقریب از قسمت حقیقی خود انرژی‌ها صرف‌نظر شده و فقط مهم‌ترین بخش که قسمت موهومی است باقی خواهد ماند، همچنین خود انرژی‌ها مستقل از انرژی در نظر گرفته شده و به صورت زیر محاسبه می‌شوند [۵]:

$$\Sigma_{L/R} = - \left(\frac{i}{\gamma} \right) \Gamma_{L/R}. \quad (5)$$

سپس چگالی حالات الکترونی (DOS) را با استفاده از رابطه زیر به راحتی محاسبه می‌کنیم [۶]:

$$DOS(E) = - \frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\text{Tr} \left(G^R(E) \right) \right]. \quad (6)$$

خواص الکترونی نانوروبان‌های گرافینی با توجه به هندسه آن‌ها صورت می‌گیرد، و با توجه به جهت برش گرافین دو نوع نانوروبان گرافینی زیگزاگ و دسته صندلی به وجود می‌آید. همه نانوروبان‌های گرافینی زیگزاگ فلز هستند و $\frac{2}{3}$ نانوروبان‌های گرافینی دسته صندلی نیم‌رسانا می‌باشند [۲].

همچنین از راه‌های مؤثر برای تنظیم خواص کوانتومی و الکترونی ترابرد، وارد کردن ناخالصی به گرافن و نانوروبان‌های گرافنی است. جایگزین کردن چندین اتم (N, B, O, Si, P) در شبکه گرافن گاهی اوقات می‌تواند به بالاترین سطح ناخالصی برسد (۲ درصد و یا بیشتر). ماهیت شیمیایی ناخالصی، موقعیت اتم‌های ناخالصی در ساختار ماده و غلظت ناخالصی‌ها از عوامل بسیار مهمی هستند که ویژگی‌های فیزیکی - شیمیایی گرافن آلاینده‌شده را تنظیم می‌کنند [۳].

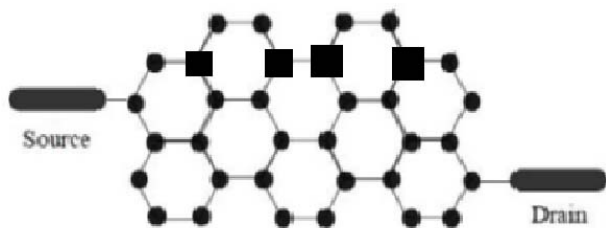
یادداشت حاضر با استفاده از رهیافت تابع گرین و تقریب تنگ بست خواص ترابرد الکترونی، چگالی حالات و مشخصه جریان-ولتاژ یک نانوروبان گرافینی دسته صندلی را در دو حالت بدون ناخالصی و همراه با ناخالصی بررسی کرده است. برای دسترسی به این منظور نانوروبان گرافینی بین دو الکترون نیمه بی‌نهایت خطی قرار داده می‌شود.

در بخش بعد مدل مسئله و روش محاسبات ارائه شده و پس از آن نتایج به دست آمده از انجام محاسبات آمده است و به بحث در مورد آنها پرداخته شده است.

۲. مواد و روش تحقیق

در این یادداشت از رهیافت تابع گرین و روش لاندور - بوتیکر برای بررسی رسانندگی الکترونی یک سیستم همدوس استفاده شده است. از برهم‌کنش‌های الکترون - الکترون صرف‌نظر شده است. سامانه همدوس، نانوروبان گرافینی است که بین دو الکترون نیمه بی‌نهایت خطی قرار گرفته (شکل ۱). فرض بر این است که نانوروبان گرافینی از دو جایگاه اول و آخر به الکترودها متصل است. لازم به ذکر است که می‌توان بر تعداد حلقه‌های گرافین اضافه کرد.

هامیلتونی سیستم با در نظر گرفتن برهم‌کنش نزدیک‌ترین



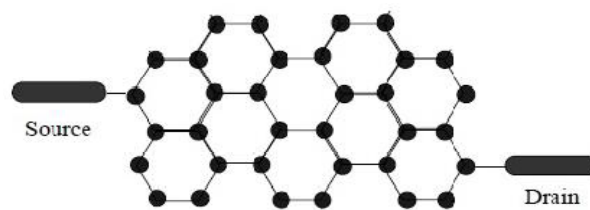
شکل ۲. مربع‌ها جایگاه‌هایی هستند که می‌توانند با اتم نیتروژن جایگزین شوند.

روبان، برخی عناصر روی قطر اصلی تغییر می‌کنند و به جای آن‌ها انرژی جایگاه نیتروژن قرار می‌گیرند. علاوه بر این، انرژی پرش مرتبط با جایگاهی که به طور تصادفی ناخالصی دریافت کرده تغییر می‌کند؛ انرژی پرش کربن - کربن $t = -3 \text{ eV}$ و انرژی پرش کربن - نیتروژن $t = -3.14 \text{ eV}$ می‌باشند. این دو تغییر سبب از بین رفتن تقارن موجود در هامیلتونی روبان می‌شوند. جایگزینی اتم‌های کربن با نیتروژن باعث تقویت گرافین و انتقال آن از ماده نیم‌رسانا به فلز و یا نیم‌فلز می‌شود [۳] $\Gamma_{L/R} = 0.5$ می‌باشد. رسانندگی به عنوان تابعی از انرژی الکترون تزریقی به سیستم و در بازه انتخابی $[-5, 5]$ رسم می‌شود.

در ادامه فرض شده است که ولتاژ در محل اتصال روبان و الکترودها کاهش می‌یابد. بر طبق این فرض ویژگی‌های طیفی مشخصه جریان - ولتاژ تغییری نمی‌کند. این فرض بر این واقعیت استوار است که میدان الکتریکی داخلی روبان به ویژه برای روبان‌های باریک، اثر کمی روی مشخصه ولتاژ - جریان دارند. از طرف دیگر، برای روبان‌های بسیار بزرگ‌تر و ولتاژهای بایاس بیشتر، میدان الکتریکی نقش مهمی دارد که به ساختار داخلی و اندازه روبان بستگی دارد [۹].

۳. نتایج و بحث

شکل‌های ۳ و ۴ نمایش‌دهنده طیف رسانندگی، چگالی حالات و مشخصه جریان - ولتاژ یک نانوروبان خالص است. در طیف رسانندگی و چگالی حالات گاف انرژی نزدیک $E=0$ ظاهر می‌شود. برای طیف رسانندگی، نمودار نوسانی است. هر کدام از قله‌های تشدید موجود در طیف رسانندگی نشان‌دهنده پدیده تونل زنی الکترون از منبع به چاه از طریق



شکل ۱. یک نانوروبان گرافینی دسته صندلی که از طریق منبع و چاه به دو الکتروود یک بعدی نیمه بی‌نهایت متصل شده است.

مشخصه جریان - ولتاژ سامانه را می‌توان از رابطه زیر محاسبه نمود [۷]:

$$I(V) = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) [f_L(E) - f_R(E)] dE \quad (7)$$

$f_{L/R}$ تابع توزیع فرمی مربوط به الکترودهای چپ و راست سامانه می‌باشد [۷].

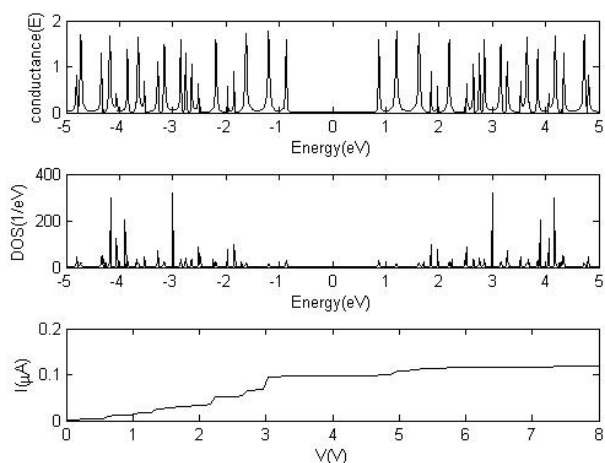
$$f_{L/R} = [\exp(\frac{E - \mu_{L/R}}{k_B T})]^{-1} \quad (8)$$

$\mu_{L/R}$ پتانسیل‌های شیمیایی هستند، در واقع ولتاژ اعمالی به سامانه در رابطه پتانسیل شیمیایی وارد می‌شود. k_B ثابت بولتزمن و T دما می‌باشد.

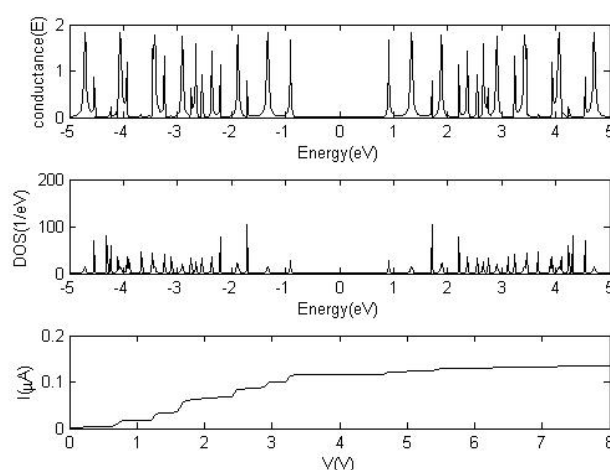
$$\mu_{L/R} = \varepsilon_f \pm \frac{eV}{2} \quad (9)$$

ε_f انرژی فرمی است. برای ساده سازی در محاسبات $h = e = 1$ در نظر گرفته شده است [۴].

شکل ۱ نمایش‌دهنده نانوروبان گرافینی مورد بررسی در مسئله می‌باشد. تعداد حلقه‌ها در طول روبان با N و تعداد حلقه‌ها در عرض روبان با M نشان داده می‌شوند. انرژی جایگاه‌های کربن صفر و انرژی جهش اتم کربن 3 eV در نظر گرفته شده است. رسانندگی برای سامانه بدون ناخالصی و سامانه در حضور ناخالصی محاسبه شده است. اتم‌هایی که سه اتم در نزدیک‌ترین همسایگی خود دارند به طور تصادفی ناخالصی دریافت می‌کنند (شکل ۲). ناخالصی از نوع اتم نیتروژن با انرژی جایگاهی 2.5 eV و انرژی جهش نیتروژن - کربن 3.14 eV می‌باشد [۸]. یعنی انرژی جایگاه نیتروژن ($E = -2.5 \text{ eV}$)، جایگزین انرژی جایگاه کربن ($E = 0 \text{ eV}$) می‌شود. به این صورت که در ماتریس هامیلتونی



شکل ۴. نمودارهای رسانندگی، چگالی حالات و جریان - ولتاژ برای نانوروبان گرافینی دسته صندلی $N=15$ و $M=2$.



شکل ۳. نمودارهای رسانندگی، چگالی حالات و جریان - ولتاژ برای نانوروبان گرافینی دسته صندلی $N=12$ و $M=2$.

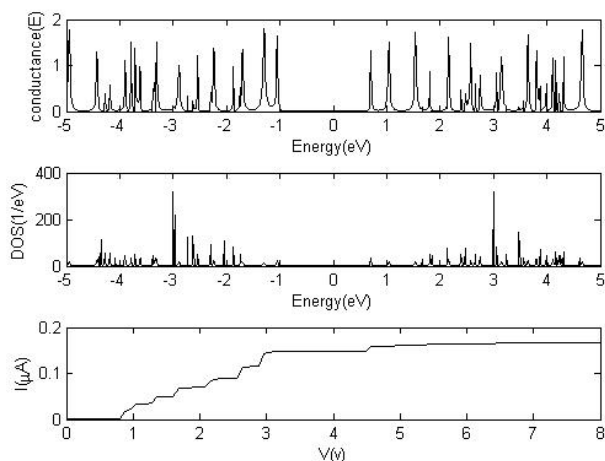
رسانندگی می‌کند. این ولتاژ به ولتاژ آستانه معروف است. با وارد شدن ناخالصی انرژی جایگاه و انرژی پرش مرتبط با جایگاهی که ناخالصی دریافت کرده تغییر می‌کنند. در این حالت با وارد کردن ۳۰ درصد ناخالصی به روبانی که از ۲۴ حلقه (۹۹ اتم کربن) تشکیل شده، $N=12$ و $M=2$ فقط ۳ جایگاه (جایگاه‌های ۴، ۱۴ و ۲۳) در لبه بالایی ناخالصی دریافت می‌کنند. با ورود ناخالصی به سامانه تعداد پرش‌ها در منحنی جریان بیشتر شده و شکل پله‌ای آن واضح‌تر می‌شود و جریان به میزان اندکی افزایش می‌یابد. همچنین حضور ناخالصی باعث افزایش ولتاژ آستانه می‌شود (شکل ۵).

با وارد کردن ۳۰ درصد ناخالصی به روبانی که از ۳۰ حلقه (۱۲۳ اتم کربن) تشکیل شده، $N=15$ و $M=2$ ، ۴ جایگاه (جایگاه‌های ۷، ۱۴، ۱۵ و ۲۳) در لبه بالایی ناخالصی دریافت می‌کنند. همانند قبل مشاهده می‌کنیم با ورود ناخالصی به سامانه تعداد پرش‌ها در منحنی جریان بیشتر شده و شکل پله‌ای آن واضح‌تر می‌شود و جریان نیز به میزان اندکی افزایش می‌یابد. همچنین حضور ناخالصی باعث افزایش ولتاژ آستانه می‌شود (شکل ۶).

افزایش طول روبان به تنهایی و بدون حضور ناخالصی باعث کاهش چشمگیری در جریان عبوری از سامانه می‌شود، ولی با وارد کردن ناخالصی شاهد افزایش جریان عبوری از سامانه هستیم. با تغییر انرژی پرش و انرژی جایگاه آلییده شده

نانوروبان می‌باشند. در واقع زمانی که انرژی الکترون‌های تزریق شده با هر کدام از سطوح انرژی نانوروبان بین دو الکتروود یکی شود، ترابرد الکترونی اتفاق می‌افتد و یک قله در رسانندگی ظاهر می‌شود. هر کدام از قله‌های تشدید در رسانندگی معادل یک ویژه مقدار انرژی مربوط به نانوروبان می‌باشند. از طرف دیگر، برای همه انرژی‌های الکترون‌های تزریقی دیگر (جدای از سطوح انرژی نانوروبان)، الکترون نمی‌تواند از طریق نانوروبان عبور کند و بر این اساس، ترابرد صفر می‌شود [۹]. چگالی حالات الکترون نشان‌دهنده سطوح انرژی قابل دسترس برای الکترون می‌باشد.

تمام ویژگی‌های اساسی انتقال الکترون‌ها را می‌توان با مطالعه مشخصه جریان - ولتاژ توضیح داد. برای مشخصه جریان - ولتاژ نمودار پلکانی ظاهر می‌شود. این رفتار پله مانند به دلیل وجود قله‌های رزونانسی است که در طیف رسانندگی ظاهر می‌شوند. از این رو جریان با انتگرال‌گیری از تابع انتقال محاسبه می‌شود. شکل پله‌ای جریان به شدت به قدرت جفت شدگی "منبع - نانو روبان - چاه"، ارتفاع و فاصله بین سطوح تشدید در منحنی ترابرد بستگی دارد و منعکس کننده ساختار الکترونی نانوروبان می‌باشد. همان‌طور که ولتاژ بایاس افزایش می‌یابد، پتانسیل الکتروشیمیایی دو الکتروود یکی از سطوح انرژی روبان را عبور می‌دهد و بر این اساس یک جهش در منحنی $I-V$ دیده می‌شود. همچنین از یک مقدار مشخص در طیف رسانندگی، الکترون از طریق نانوروبان شروع به

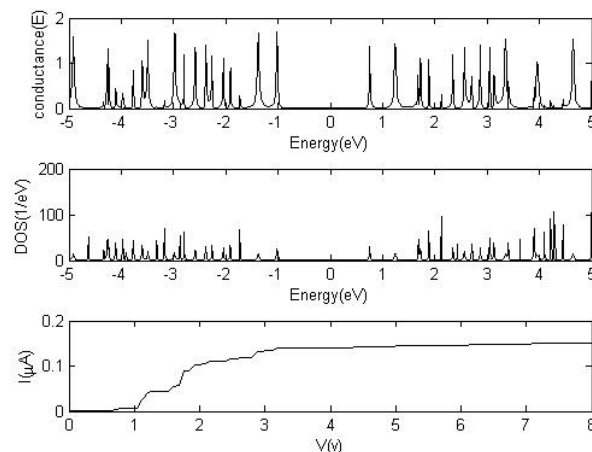


شکل ۶. نمودارهای رسانندگی، چگالی حالات و جریان - ولتاژ برای نانوروبان گرافینی دسته صندلی در حضور ۳۰ درصد ناخالصی نیتروژن، $N=15$ و $M=2$.

نزدیکترین همسایگی خود دارند ناخالصی دریافت می کنند. با وارد شدن ناخالصی تقارن مولکول از بین می رود و تعداد قله های پاد تشدید بیشتری را می توان در طیف رسانندگی مشاهده کرد، علاوه بر این جریان عبوری از سامانه افزایش می یابد.

قدردانی

از حمایت های علمی جناب آقای دکتر سانتانومایتی کمال تشکر و قدردانی را دارم.



شکل ۵. نمودارهای رسانندگی، چگالی حالات و جریان - ولتاژ برای نانوروبان گرافینی دسته صندلی در حضور ۳۰ درصد ناخالصی نیتروژن، $N=12$ و $M=2$.

تقارن حول تراز فرمی از بین می رود و همچنین فاصله بین قله های تشدید کمتر می شود، علاوه بر این، مقدار رسانندگی و مقدار جریان گذرنده از سامانه افزایش می یابد.

۴. نتیجه گیری

در این یادداشت اثر حضور ناخالصی روی ترابرد الکترونی از طریق یک نانوروبان گرافینی را بر پایه مدل تنگبست و با روش تابع گرین بررسی کردیم. ناخالصی اتم نیتروژن می باشد، که به صورت تصادفی به سامانه اضافه شده است. این ناخالصی به میزان ۳۰ درصد به صورت تصادفی وارد لبه بالایی نانوروبان گرافینی می شود. لبه هایی از گرافین که سه اتم کربن در

مراجع

1. P Dietl, "Numerical Studies of Electronic Transport Through Grapheme Nanoribbons With Disorder." Diplom Thesis (2009).
2. فرهاد فضیله، مهدیه قربانی زواره، زهره معقول، بهروز میرزا و سید محمد علی صالحی، مجله پژوهش فیزیک ایران، ۲، ۱۱، ۱۶۷ (۱۳۹۰).
3. H Terrones, R Lv, M Terrones, and M Dresselhaus, *Rep. Prog. Phys.* **75** (2012) 062501.
4. S K Maiti, *Solid State Communications*, **145** (2008) 126.
5. K Walczak, *Physics E: Low-dimensional Systems*
- and *Nano Structures* **33**, 1(2006) 110.
6. Z Xu, "Molecular Circuits Based on Graphene Nanoribbon Junctions." arxiv.org/pdf/0704.0411 (2007).
7. P Dutta, S K Maiti, and S N Karmakar, *Organic Electronics* **11** (2010) 1120.
8. حسین میلانی مقدم، زیور آزموده، مقاله نامه کنفرانس فیزیک ایران (۱۳۹۰) ۲۰۸۵.
9. S K Maiti, "Electron Transport Through Honeycomb Lattice Ribbons With Armchair Edges", arXiv:0901.3238v1 [cond-mat.mes-hall] 21 Jan (2009).