مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۲۱، شمارهٔ ۴، زمستان ۱۴۰۰

ساختار الکترونی و خواص رسانش الکتریکی ساختار دو بعدی آرسنین

فرهاد فردوسی و اسماعیل عبدالحسینی سارسری

دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

پست الکترونیکی: abdolhosseini@cc.iut.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۰۴/۰۱ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۴۰۰/۰۶/۱۱)

چکیده

آرسنین یکی از اعضای گروه بزرگی از ساختارهای دو بعدی است که در پروژهٔ حاضر ساختار تک‌لایه و نانونوارهای آن را بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی مورد بررسی قرار داده‌ایم. در این بررسی پس از محاسبهٔ ساختار نواری تک‌لایه، اثر عرض را بر ساختار نواری نانونوارها از زاویهٔ پدیدهٔ محدود شدگی کوانتمی مورد بحث قرار داده‌ایم. نتایج اثر متفاوت پدیدهٔ محدود شدگی کوانتمی بر نقاط مختلف هر نوار در ساختار نواری را نشان می‌دهد که عامل گذار گاف غیر مستقیم به مستقیم در اثر کاهش عرض نانونوارهای آرمچیر است. همچنین خواص رسانندگی الکتریکی تک‌لایهٔ آرسنین از طریق محاسبهٔ تحرک‌پذیری حامل‌های بار به دست آمده و اثر کرنش تک محوری ساختار بلوری بر آنها بررسی شده است. برای بررسی تحرک‌پذیری، از نقص‌های ساختار بلوری صرف نظر شده و تنها پراکندگی فونونی بر مبنای رابطهٔ تاکاگی مد نظر قرار گرفته است. در این روند تمرکز بر دقت کمّی مقادیر به دست آمده برای تحرک‌پذیری حامل‌های بار نبوده و ناهمسانگردی موجود بین تحرک‌پذیری در دو راستای آرمچیر و زیگزاگ محوریت بحث را به خود اختصاص داده است. نتایج محاسبات حاکی از ناهمسانگردی قابل توجه تحرک‌پذیری در دو راستای آرمچیر و زیگزاگ و تاثیر بسزای کرنش تک محوری ساختار بلوری بر آن است. همچنین تفاوت چشمگیری بین تحرک‌پذیری الکترون‌ها و حفره‌ها در راستای آرمچیر از جمله نتایج کلیدی قابل اشاره است.

واژه‌های کلیدی: تک‌لایه، نانونوار، ساختار نواری، آرسنین، تحرک‌پذیری، ناهمسانگردی

۱. مقدمه

گرافین، که ساختار اتمی تک لایهٔ مسطح و لانه زنبوری دارد، یکی از جذاب‌ترین مواد عصر حاضر است [۱و۲]. این ماده از تحرک‌پذیری حامل‌های بار زیاد، هدایت گرمایی و همچنین مقاومت مکانیکی بالایی برخوردار است اما با این حال به طور ذاتی فاقد گاف انرژی است، که استفاده آن در ابزارهای الکترونیکی را با محدودیت‌ها و دشواری‌هایی مواجه می‌کند. این موضوع باعث آغاز تحقیقات گسترده‌ای برای یافتن ساختارهای تک لایهٔ اتمی شد که گاف انرژی ذاتی دارند. در این مسیر ساختارهای تک لایهٔ لانه زنبوری خانوادهٔ کربن مانند سیلیسین، ژرمانین و استانین توجه زیادی را به خود جلب کردند [۳]. ساختار اتمی این مواد به دلیل ترکیب شدن[۱] اربیتال‌های sp^2 و sp^3 و به صورت خمیده[۲] است و در نتیجه گاف انرژی آنها با

۱. Hybridization

۲. buckled

اعمال میدان الکتریکی عمودی قابل کنترل است [۴ و ۵]. هرچند که این ساختارها به کمک زیرلایه به طور موفقیت آمیز ساخته شده است [۶ و ۷]، ساخت این ساختارها به صورت آزاد چندان سهل‌الوصول نیست. از دیگر ساختارهای مورد توجه که خواص منحصر به فردی دارد فسفرین است که با توجه به خواص ویژه آن گزینهٔ مناسبی برای استفاده در ترانزیستورهای اثر میدان است [۸]. آرسنین از لحاظ ساختار اتمی و خواص شباهت زیادی به فسفرین داشته و این یکی از دلایل مورد توجه قرار گرفتن آن است. همچنین تحقیقات صورت گرفته بر روی ساختار چروکیده[۱] این ماده نشان دهندهٔ ناهمسانگردی در خواص رسانش گرمایی آن بوده است [۹]. همین موضوع یکی از انگیزه‌های پژوهش حاضر است. در این بررسی علاوه بر بررسی ساختار نواری تک لایه و نانونوارهای آرسنین، برخی خواص این ماده در دو جهت اصلی را محاسبه کرده و ناهمسانگردی‌های موجود را مورد بررسی قرار داده‌ایم. در ابتدا خواص مکانیکی مانند ضریب الاستیک دو بعدی و پتانسیل تغییر شکل را در دو راستا محاسبه کرده و در نهایت به کمک مقادیر به دست آمده برای جرم مؤثر الکترون و حفره، تحرک‌پذیری حامل‌های بار در دو راستا محاسبه شده است. در ادامه اثر کرنش ساختار در دو راستای اصلی را بر خواص ذکر شده مورد بررسی قرار داده‌ایم.

۲. نتایج

در این پروژه برای محاسبات ابتدا به ساکن از بستهٔ محاسباتی کوانتوم اسپرسوا[۲] استفاده کرده‌ایم. این بسته محاسبات را بر اساس نظریهٔ تابعی چگالی انجام داده اما بر خلاف بسته‌های محاسباتی تمام‌الکترونی، تنها به محاسبهٔ ترازهای لایهٔ ظرفیت می‌پردازد و پتانسیل نواحی نزدیک به هسته‌های (ناحیهٔ هسته) اتمی را با پتانسیل‌هایی که از پیش برای هر اتم محاسبه شده‌اند جایگزین می‌کند. این پتانسیل‌ها، شبه پتانسیل[۳] نامیده می‌شوند و بر اساس روشی که برای تقریب پتانسیل ناحیهٔ هسته استفاده کرده‌اند، انواع مختلفی دارند. یکی از انواع این شبه پتانسیل‌ها که در این پروژه از آن استفاده شده، شبه‌پتانسیل PAW است.

همچنین در این تحقیق از تابعی PBE که بر اساس نوعی از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) (برای محاسبهٔ برهم‌کنش‌های تبادلی–همبستگی) طراحی شده است، استفاده کرده‌ایم. در ابتدای محاسبات، مقادیر پارامترهای انرژی جنبشی قطع برای توابع موج (ecut wfc)، انرژی جنبشی قطع برای چگالی بار و پتانسیل (ecut rho) و تراکم نمونه برداری از ناحیهٔ اول بریلوئن (k-grid mesh) را بهینه کرده‌ایم. از آنجایی که انرژی چسبندگی[۴] معمول‌ترین و اولین متغیری است که از لحاظ دقت همگرایی بررسی شده و (حداقل در شروع محاسبات) معیار انتخاب پارامترهای محاسباتی قرار می‌گیرد، ما نیز به منظور همگرایی انرژی چسبندگی با دقتی از مرتبه 10^{-3}eV مقادیر بهینه پارامترهای ذکر شده را به ترتیب $40Ry$، $400Ry$ و $10\times10\times1$ انتخاب کردیم (معمولا مقدار انرژی جنبشی قطع برای چگالی بار و پتانسیل را بین ۸ تا ۱۰ برابر انرژی جنبشی قطع برای توابع موج در نظر می‌گیرند). با این حال در روند محاسبات دقت همگرایی برخی متغییرهای مورد نظر را در موارد لزوم به صورت جداگانه بررسی کرده‌ایم.

۱،۲. ساختار اتمی

آرسنیک که موضوع بررسی این پژوهش است دو ساختار اتمی کپه‌ای تشکیل شده از صفحات اتمی دارد. در دو ساختار اتمی این ماده که ساختار پاکرد و باکلد نامیده می‌شوند، بر خلاف معروف‌ترین ساختار دو بعدی یعنی گرافین، کاملا در یک صفحه قرار نگرفته‌اند. این سه نوع ساختار در شکل ۱ نشان داده شده‌اند.

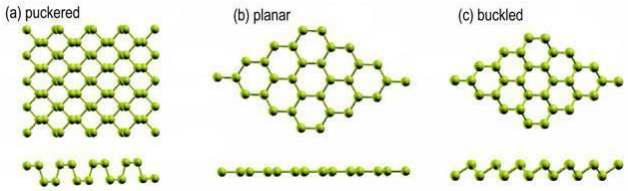
در پروژهٔ حاضر قصد بررسی خواص ساختار پاکرد آرسنین را داریم که تاکنون در مقایسه با ساختار باکلد کمتر به آن پرداخته شده است (در ادامه جز در مواردی که خلاف آن ذکر شود، منظور ساختار پاکرد است). از آنجایی که بستهٔ محاسباتی کوانتوم اسپرسوا محاسبات را صرفاً برای ساختارهای تکرار شونده و تناوبی انجام می‌دهد، برای شبیه سازی شرایط

۱. puckered

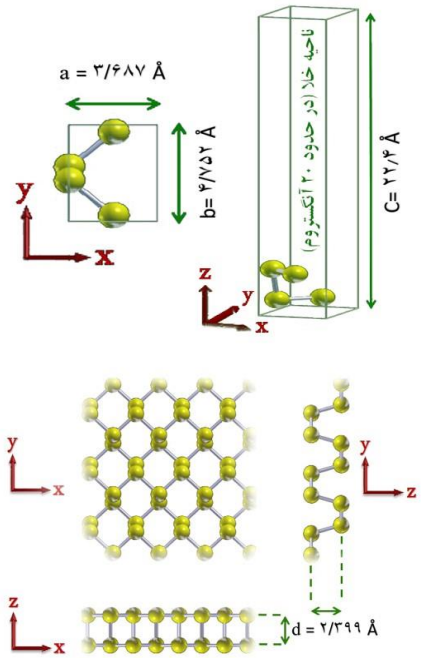
۲. Pseudopotential

۳. Quantum espresso

۴. Cohesive energy



شکل ۱. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) سه نوع ساختار بلوری باکلد، مسطح و پاکرد.



شکل ۲. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (الف) ابریاختهٔ ساختار تک لایهٔ پاکرد آرسنین و (ب) تصاویر بخشی از ساختار تک لایهٔ پاکرد آرسنین از سه نما.

انزوای تک‌لایه از لایه‌های مجاور، ابریاخته‌ای شامل ناحیه‌ای تهی در نظر می‌گیریم به گونه‌ای که به علت فاصلهٔ به وجود آمده بین لایه‌های تکرار شوندهٔ مجاور، بتوان از برهم‌کنش بین آنها صرف‌نظر کرد. معمولا در فواصل بیش از ۱۰ آنگستروم می‌توان برهم‌کنش‌های بین اتمی را ناچیز و قابل صرف‌نظر در نظر گرفت ولی ما در محاسبات از طرفی به جهت حصول اطمینان از کیفیت انزوای لایه‌ها و از طرف دیگر به دلیل این که در روند پروژه به نقطه‌ای در میانهٔ خلأ، که پتانسیل آن به عنوان مرجع ثابت پتانسیل قابل اتکا باشد، نیاز داریم طول ناحیهٔ خلأ را در حدود ۲۰ آنگستروم در نظر گرفته‌ایم (با توجه به ضخامت تقریبی ۲ آنگستروم تک لایه، اندازهٔ ارتفاع ابریاخته را ۲۲/۴ آنگستروم انتخاب کرده‌ایم). تصویر سه بعدی به همراه تصویر مقطع افقی این ابریاخته (که شامل ۴ اتم آرسنیک است) در شکل ۲. الف نشان داده شده‌است.

همانطور که در شکل مشخص شده است مقادیر طول و عرض ابریاخته پس از واهلش ساختار ۴/۷۵۲ و ۳/۶۷۸ آنگستروم به دست آمده است. با تکرار این ابریاخته در جهت‌های درون صفحه‌ای (جهت‌های x و y) بلور تک‌لایهٔ آرسنین ساخته می‌شود. تصاویر بخشی از این ساختار تک‌لایه از سه نمای x، y و z در شکل ۲. ب قابل مشاهده است.

به همین ترتیب در مورد نانونوارهای[۱] آرسنین، ابریاخته را به گونه‌ای در نظر گرفتیم که علاوه بر ناحیهٔ تهی در راستای z، دو ناحیهٔ تهی در دو طرف نانونوار داشته باشد تا با ایجاد فاصلهٔ

۱. Nanoribbon

عرضی کافی بین نانونوارهای مجاور، شرایط یک نانونوار منزوی به خوبی شبیه سازی شود. نانونوارها را می‌توان بخش بریده شده‌ای از یک ساختار تک لایه دانست. با توجه به جهت برش ساختار تک‌لایه، دو نوع نانونوار به وجود می‌آید که بر اساس شکل لبه، نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ نامیده می‌شوند. باید به این نکته توجه داشت که اتم‌هایی که در لبهٔ نوار قرار دارند برخلاف دیگر اتم‌ها، که به سه اتم آرسنیک متصل هستند، تنها با دو اتم آرسنیک پیوند دارند و این مسئله باعث می‌شود که این اتم‌ها یک پیوند آزاد داشته باشند که به پیوند آویزان[۱] معروف است. وجود پیوندهای آویزان در لبهٔ نانونوارها باعث ناپایداری و واکنش‌پذیری بالای لبه‌ها می‌شود. برای غلبه بر این مشکل و افزایش پایداری نانونوارها، معمولا به وسیلهٔ تکنیک‌های آزمایشگاهی متفاوتی، اتم‌هایی از دیگر عناصر را به لبهٔ نانونوارها متصل می‌کنند. این عمل را خنثی سازی لبه‌ها[۲] و اتم‌های متصل شونده به لبه‌ها را اتم‌های خنثی کننده[۳] می‌نامند. لازم به ذکر است که در حالت کلی اتم‌های خنثی‌کننده می‌توانند در مکان‌های متفاوتی نسبت به لبهٔ نانونوارهای قرار بگیرند که منجر به تغییراتی در میزان پایداری و خواص نانونوار حاصله شود. اما با توجه به این که از طرفی هدف پروژهٔ حاضر تمرکز بر جزییاتی از این دست در خنثی سازی نانونوارها نیست و از طرف دیگر تغییرات ناشی از محل قرار گیری اتم‌های خنثی کننده معمولا چندان قابل توجه و اساسی نیست، معمول‌ترین و محتمل‌ترین مکان را برای قرارگیری اتم‌های خنثی کننده انتخاب کرده‌ایم. محتمل‌ترین محل قرارگیری اتم خنثی کننده در محل همان اتمی است که در ساختار تک لایه به اتم لبه متصل بوده است و جای آن در لبهٔ نانونوار خالی است.

نانونوارها می‌توانند عرض‌های متفاوتی داشته باشند و آنها را بر اساس تعداد ابریاختهٔ تک‌لایه که در عرض خود دارند نامگذاری کرده‌ایم. در ادامه از اسامی $n-AsxPANR$[۴] و $n-AsxPZNR$[۵] به ترتیب برای نام‌گذاری نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ آرسنین استفاده می‌کنیم. در این نامگذاری n تعداد ابریاختهٔ تک‌لایه در عرض نانونوار و x نوع اتم خنثی کننده است.

۲. ۲. ساختار الکترونی

ساختار نواری در واقع ترازهای انرژی بلوری برای نقاط مختلف منطقهٔ اول بریلوئن در فضای وارون است. اما مسیرهای خاصی در فضای وارون وجود دارد که از نقاط پرتقارن منطقهٔ اول بریلوئن عبور می‌کنند و معمولاً بخش مهمی از اطلاعات ساختار نواری را در بر دارند. از این رو اغلب ساختار نواری را در طول این مسیرها محاسبه و رسم می‌کنند. مسیر پرتقارن ابریاختهٔ پاکرد آرسنین، همان‌طور که در مقالات برای رسم ساختار نواری این ماده و مواد مشابه استفاده شده است، از نقاط Γ، Y، S، X، Γ و S می‌گذرد (شکل ۳. الف). بنابراین ساختار نواری تک لایه آرسنین را در طول این مسیر محاسبه کردیم که در شکل ۳. ب قابل رویت است.

همان‌طور که در شکل دیده می‌شود ساختار نواری آرسنین گاف نواری غیرمستقیم به اندازهٔ ۰/۷۹۲ eV دارد. پایین‌ترین نقطهٔ نوار رسانش در نقطهٔ Γ فضای وارون و بالاترین نقطهٔ نوار ظرفیت در نقطه‌ای از مسیر فضای وارون اتفاق می‌افتد که آن را نقطهٔ R نامیده‌ایم. با توجه به این که ساختار نواری تنها در راستاهایی از بلور که تکرار شونده هستند قابل رسم است، در هر نانونوار تنها یک مسیر در فضای وارون برای رسم ساختار نواری وجود دارد. بنابراین ساختار نواری را برای نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ به ترتیب در جهت‌های y و x (جهت‌های طول هر نانونوار) محاسبه و رسم کرده‌ایم. شکل ۴ و شکل ۵، به ترتیب ساختار نواری نانونوارهای آرسنین آرمچیر و زیگزاگ خنثی شده با هیدروژن را برای عرض‌های مختلف (بر حسب تعداد ابریاختهٔ تک‌لایه در عرض نانونوار) نشان می‌دهد. در این تصاویر گاف نواری ساختارهای نواری با پیکان مشخص شده‌اند (رنگ آبی و قرمز پیکان‌ها به ترتیب به معنی مستقیم و غیرمستقیم بودن گاف نواری است). اندازه و نوع (از لحاظ مستقیم یا غیر مستقیم بودن) گاف نواری این

---

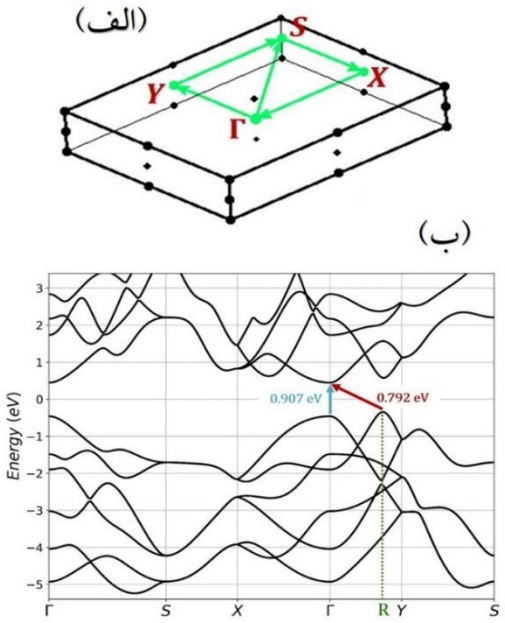
۱. Dangling bond

۲. Edge passivation

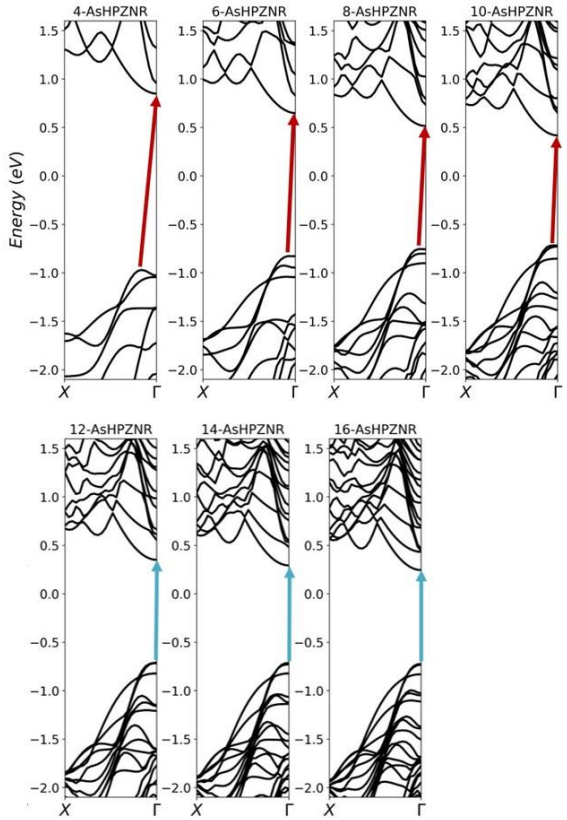
۳. Passivating atom

۴. Arsenene x Passivated Armchair NanoRibbon

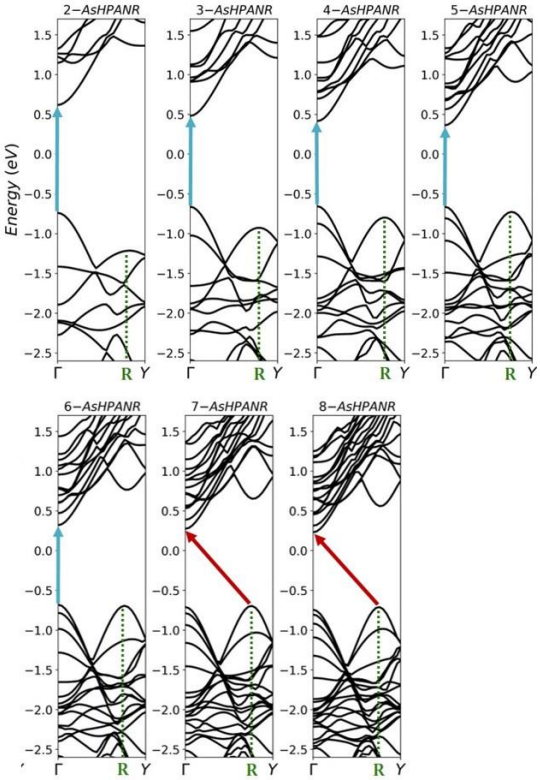
۵. Arsenene x Passivated Zigzag NanoRibbon



شکل ۳. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (الف) مسیر انتخاب شده در منطقهٔ اول بریلوئن فضای وارون و (ب) ساختار نواری تک لایهٔ آرسنین.



شکل ۴. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) ساختار نواری برای عرض مختلف نانونوار آرمچیر آرسنینِ خنثی شده با هیدروژن (در جهت طول نانونوار).



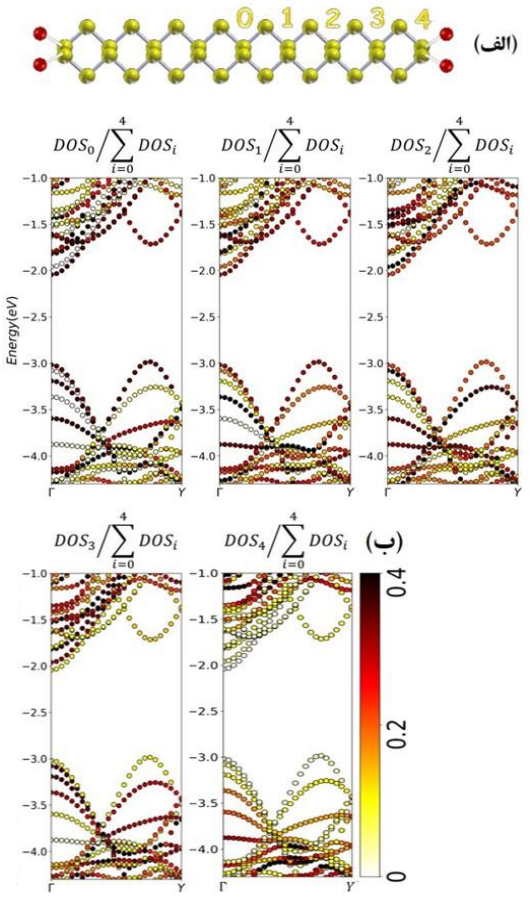
شکل ۵. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) ساختار نواری برای عرض مختلف نانونوار زیگزاگ آرسنینِ خنثی شده با هیدروژن (در جهت طول نانونوار).

جدول ۱. اندازه و نوع گاف نواری نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ آرسنین خنثی شده با هیدروژن بر حسب عرض.

عرض نانونوار	اندازه گاف نواری		نوع گاف نواری	
	نانونوار آرمچیر	نانونوار زیگزاگ	نانونوار آرمچیر	نانونوار زیگزاگ
٤	۱/۳۵۶ eV	۱/۸۱۹ eV	مستقیم	غیر مستقیم
٦	۱/۱۴۳ eV	۱/۴۷۵ eV	مستقیم	غیر مستقیم
٨	۱/۰۷۰ eV	۱/۲۷۱ eV	مستقیم	غیر مستقیم
١٠	۱/۰۲۴ eV	۱/۱۳۵ eV	مستقیم	غیر مستقیم
١٢	۱/۰۰۱ eV	۱/۰۶۰ eV	مستقیم	مستقیم
١٤	۰/۹۷۱ eV	۱/۰۰۶ eV	غیر مستقیم	مستقیم
١٦	۰/۹۴۱ eV	۱/۹۶۸ eV	غیر مستقیم	مستقیم

ساختارهای نواری در جدول ۱ آورده شده است.

اندازهٔ گاف نواری هر دو نوع نانونوار با کاهش عرض افزایش می‌یابد و این اتفاق با توجه به اثرات محدودیت کوانتمی کاملا قابل انتظار است. اما با توجه به شکل‌های ۴ و ۵



شکل ۶. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (الف) مقطع افقی ابریاختهٔ نانونوار آرمچیر عرض ۸ خنثی شده با هیدروژن، شامل نامگذاری یکی در میان ردیف‌های اتمی و (ب) نسبت چگالی حالات هر ردیف اتمی به مجموع چگالی حالات پنج ردیف نامگذاری شده (در نقاط مختلف ساختار نواری نانونوار (الف)).

می‌توان دید که ساختارنواری نانونوارها در مقایسه با بخش هم مسیر خود در ساختار نواری تک‌لایه (مسیر $\Gamma-X$ و $\Gamma-Y$) دچار تغییرات دیگری نیز شده است. در مقایسه با ساختار نواری تک‌لایه در ساختار نواری نانونوارها، تعداد بیشتری نوار انرژی در بازهٔ انرژی یکسان وجود دارد که با عریض‌تر شدن نانونوارها تعداد آنها افزایش می‌یابد. علت این موضوع را می‌توان در وجود شرایط متفاوت برای اتم‌های قرار گرفته در هر ردیف از عرض نانونوار (با توجه به فاصلهٔ متفاوتی که از لبه دارند) جستجو کرد. در ساختار تک‌لایه تمام اتم‌ها شرایطی مشابه دارند که باعث تبهگن شدن نوارهای آنها می‌شود. اما در نانونوارها وجود شرایط متفاوت برای ردیف‌های مختلف اتم‌ها باعث بر هم خوردن تبهگنی نوارهای اتم‌های مربوطه می‌شود که نتیجهٔ آن حضور نوارهای انرژی متعدد غیر تبهگن در ساختار نواری نانونوارها است. صحت این موضوع را می‌توان به طور کیفی با بررسی چگالی حالات وابسته به بردار موج[۱] نانونوارها تحقیق کرد.

با نگاه به شکل ۶. ب (که به عنوان مثال به یکی از نانونوارها پرداخته است) می‌توان دریافت که با وجودی که هر نوار انرژی به طور کامل به یک ردیف اتمی متعلق نیست، اما در هر نوار انرژی یک ردیف اتمی سهم بیشتری را نسبت به سایر ردیف‌ها به خود اختصاص داده است.

می‌توان دید که بالاترین نوار ظرفیت و پایین‌ترین نوار رسانش ساختار نواری نانونوارها شباهت زیادی به بالاترین نوار ظرفیت و پایین‌ترین نوار رسانش ساختار نواری تک‌لایه دارند.

۱. K resolved DOS

نتایج به دست آمده از بررسی‌های چگالی حالات وابسته به بردار موج در توجیه این پدیده نیز می‌توانند تا حدودی مفید واقع شوند به شکلی که علت این شباهت را می‌توان به سهم نسبی بالای ردیف‌های مرکزی نانونوارها در این نوارهای انرژی مورد بحث نسبت داد. از آنجایی که ردیف‌های اتمی مرکزی نانونوارها (به علت فاصلهٔ بیشتر از لبه‌ها) شرایطی شبیه‌تر به شرایط اتم‌های قرار گرفته در تک‌لایه را تجربه می‌کنند می‌شود انتظار داشت که نوارهای انرژی وابسته به این اتم‌ها تا حدودی به نوارهای انرژی ساختار نواری تک‌لایه شبیه باشند. از طرف دیگر با توجه به شکل‌های ۴ و ۵ دیده می‌شود که این شباهت با کاهش عرض نانوارها کمرنگ‌تر می‌شود به گونه ای که تغییر شکل بالاترین نوار ظرفیت باعث گذار گاف نواری غیر مستقیم به مستقیم برای نانونوارهای آرمچیر و گذار مستقیم به غیر مستقیم برای نانونوارهای زیگزاگ در اثر کاهش عرض شده است.

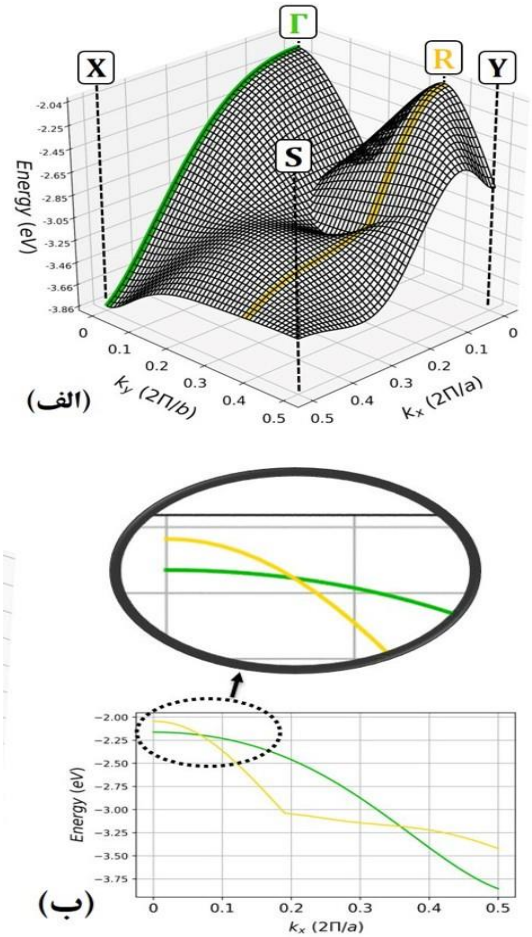
هر چند که اثر گذاری عوامل متعددی در این تغییر شکل محتمل است، اما برای مثال با دقت در روند تغییرات بالاترین نوار ظرفیت نانونوار آرمچیر می‌توان حدس زد که اثر محدودیت کوانتمی عمده ترین عامل مؤثر در این تغییرات باشد. در اکثر مواقع از محدود شدگی کوانتمی به عنوان عامل افزایش دهنده گاف نواری در اثر کاهش اندازه یاد می‌شود (همان‌طور که در پروژهٔ حاضر چنین است). اما افزایش گاف نواری تنها پیامد محدودیت کوانتمی نبوده و گاهی بررسی دقیق‌تر آن می‌تواند به درک و توضیح برخی دیگر از پدیده‌ها کمک کند. با توجه به مبانی پدیدهٔ محدودیت کوانتمی، چه در چاه کوانتمی کاملا آرمانی (چاه پتانسیل با عمق بی‌نهایت) و چه در چاه کوانتمی اصلاح شده (چاه پتانسیل با عمق محدود) انرژی ترازهای گسسته با عکس جرم مؤثر (دست کم با عکس توانی از جرم مؤثر) متناسب است. همچنین همین شکل از وابستگی انرژی ترازها به جرم مؤثر (با توجه به تاثیر جهت تقعر هر نقطه از نوار انرژی در علامت جرم مؤثر آن نقطه) به عنوان عامل بالا رفتن درهٔ نوار رسانش و پایین آمدن قله نوار ظرفیت در اثر کاهش اندازهٔ ماده (و در نتیجه افزایش گاف نواری) مطرح شده است. اما مد نظر قرار دادن مقادیر جرم مؤثر در نقاط دیگر ساختار نواری (از جمله در نقاط مختلف بالاترین نوار ظرفیت و پایین‌ترین نوار رسانش)، در کنار اثرات محدودیت کوانتمی، گاهی توضیح خوبی برای تغییر شکل نوارهای انرژی نیز ارائه می‌دهد. در ادامهٔ این روش بررسی را در مورد بالاترین نوار ظرفیت نانونوارهای آرمچیر به کار گرفته‌ایم.

همان‌طور که می‌دانیم جرم مؤثر نسبت داده شده به هر نقطه از ساختار نواری با مشتق دوم آن نقطه از ساختار نواری بر حسب تغییرات بردار موج در جهت مورد نظر رابطهٔ عکس داشته و از رابطهٔ زیر به دست می‌آید:

$$m^* = \hbar^2 \Big/ \partial^2 E / \partial^2 k, \qquad (۱)$$

از رابطهٔ فوق برای به دست آوردن جرم مؤثر در جهت x به صورت $m_x^* = \hbar^2 \Big/ \partial^2 E / \partial^2 k_x$ و برای به دست آوردن جرم مؤثر در جهت y به صورت $m_y^* = \hbar^2 \Big/ \partial^2 E / \partial^2 k_y$ استفاده خواهد شد. از طرف دیگر می‌دانیم که جرم مؤثر اثرگذار در انرژی ترازهای چاه کوانتمی، جرم مؤثر محاسبه شده در جهت محدود شدگی است. در گذار ساختار لایه‌ای به ساختار نواری، عرض محدود نانونوارها عامل محصور شدگی بوده و بنابراین جهت عرض نانونوارها جهت محدود شدگی به حساب می‌آید. اما از آنجایی که ساختار نواری در جهت عرض نانونوارها (دست کم به شکل مرسوم) قابل محاسبه نیست، برای محاسبهٔ جرم مؤثر با تقریب مرسوم باید از ساختار نواری تک‌لایه در مسیر و جهت معادل استفاده کرد.

این تقریب همان تقریبی مرسومی است که افزایش اندازهٔ گاف نواری را به خوبی توضیح می‌دهد. با این حال توجه به نتایج بررسی چگالی حالات وابسته به بردار موج که نشان دهندهٔ سهم عمدهٔ اتم‌های ردیف‌های مرکزی نانونوارها (یعنی همان اتم‌هایی که شرایط نسبتا مشابهی با اتم‌های ساختار تک‌لایه دارند) در نوارهای انرژی مورد بحث است، منجر به قابل اتکاتر به نظر رسیدن این تقریب (دست کم در تحلیل‌های کیفی) می‌شود. در مورد نانونوارهای آرمچیر مهم‌ترین مشخصهٔ تغییرات بالاترین نوار ظرفیت در مورد نانونوارهای آرمچیر مهمترین مشخصه ی تغییرات بالاترین نوار ظرفیت کاهش انرژی سریع‌تر نقطه R در مقایسه با نقطه Γ در اثر کاهش عرض نانونوار است. این موضوع منجر به مستقیم شدن گاف



شکل ۷. (الف) رویهٔ بالاترین نوار ظرفیت تک لایهٔ آرسنین در مش بندی منظمی از فضای وارون است و (ب) نمودار بالاترین نوار ظرفیت در امتداد دو مسیر سبز و زرد رنگ.

نواری در ساختار نواری نانونوارهای با عرض کمتر شده است.

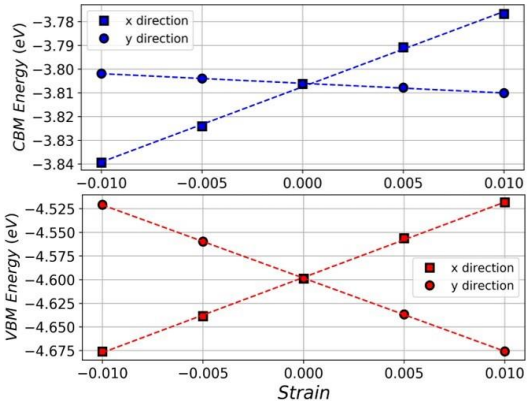
با توجه به شکل شماره ۷ می‌توان دید که در راستای محور x (در امتداد خطوط رنگی) نقطهٔ R تقعر بیشتری در مقایسه با نقطهٔ Γ دارد. با توجه به رابطهٔ ۱، تقعر بیشتر نقطهٔ R در راستای x به معنی جرم مؤثر کوچک‌تر این نقطه در این راستا است. بنابراین همان‌طور که حدس زده بودیم اثر متفاوت محصور شدگی کوانتمی بر نقاط مختلف ساختار نواری، علت گذار گاف نواری غیر مستقیم به مستقیم در اثر کاهش عرض در نانونوارهای آرمچیر است. این روش برای تحلیل و پیش بینی کیفی پیامدهای کاهش عرض بر قسمت‌های دیگر ساختار نواری نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ نیز قابل استفاده است که در این بخش به همین مقدار بسنده می‌کنیم.

۳,۲ تحرک‌پذیری حامل‌های بار تک لایهٔ آرسنین

در این بخش قصد داریم تحرک‌پذیری حامل‌های بار تک‌لایهٔ آرسنین را در جهت‌های آرمچیر و زیگزاگ (جهت‌های x و y) مورد بررسی قرار دهیم. یکی از معتبرترین روش‌های محاسبهٔ تحرک‌پذیری حامل‌های بار (بدون در نظر گرفتن تاثیر نقص‌های بلوری) استفاده از رابطهٔ تاکاگی است [۱۰و۱۱]. این رابطه به صورت زیر است:

$$\mu_{2D} = \frac{e\hbar^3 C_{2D}}{k_B T m^* m_d (E_l)^2}, \qquad (۲)$$

در این رابطه C_{2D} ضریب کشسانی دو بعدی، E_l پتانسیل تغییر شکل و m^* و m_d به ترتیب جرم مؤثر در جهت حرکت حامل‌های بار و جرم مؤثر میانگین هستند. تحرک‌پذیری حامل‌ها بسته به این که در چه انرژی قرار داشته و چه بردار



شکل ۸. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) نمودار تغییرات انرژی نقاط VBM و CBM ساختار نواری تک‌لایهٔ آرسنین بر حسب کرنش ساختار بلوری در دو راستای x و y.

موجی داشته باشند متفاوت است، به گونه‌ای که می‌توان به نقاط مختلف ساختار نواری تحرک‌پذیری متفاوتی نسبت داد. الکترون‌ها در هر نوار انرژی تمایل به قرار گرفتن در کم انرژی‌ترین حالات ممکن آن نوار را دارند. در نتیجه در نیمه رساناها الکترون‌های انتقال یافته به نوار رسانش در پایین‌ترین نقاط این نوار و حفره‌های به وجود آمده در نوار ظرفیت در بالاترین نقاط این نوار تجمع می‌یابند. بنابراین در ادامه پارامترهای این رابطه را به صورت جداگانه بررسی کرده و سپس به کمک آنها تحرک‌پذیری را برای بالاترین نقطهٔ نوار ظرفیت (VBM) و پایین‌ترین نقطهٔ نوار رسانش (CBM) محاسبه و بررسی می‌کنیم.

پتانسیل تغییر شکل E_l معیاری از وابستگی انرژی نقاط مختلف ساختار نواری به تغییر شکل ساختار بلوری است و برای هر نقطه از ساختار نواری به کمک رابطهٔ زیر قابل محاسبه است.

$$E_l^i = \Delta V_i / (\Delta l / l_\circ), \qquad (۳)$$

در این رابطه $l_\circ$ و Δl به ترتیب طول اولیه و تغییر طول یاختهٔ واحد در راستای مورد نظر، ΔV تغییر انرژی نقطهٔ مشخصی از ساختار نواری (نقطهٔ i) و E_l^i پتانسیل تغییر شکل آن نقطه است. برای این منظور ابریاختهٔ تک لایهٔ آرسنین را یک بار در جهت x (جهت زیگزاگ در ساختار بلوری) و بار دیگر در جهت y (جهت آرمچیر در ساختار بلوری) به اندازهٔ نیم و یک درصد کشیده و فشرده کرده و با آزاد گذاشتن پارامتر شبکه در جهت عمود بر جهت کشیدگی و فشردگی به کمک ابزار pw.x و محاسبات وی سی- رلکس[۱]، واهلش شد. سپس با محاسبهٔ ساختار نواری برای ابریاخته‌های واهلش یافته، تغییرات انرژی نقاط CBM و VBM بر حسب کرنش در دو راستا قابل محاسبه است که نتایج در شکل۸ قابل مشاهده است.

برای هر جهت، پتانسیل‌های تغییر شکل با محاسبهٔ شیب بهترین خط گذرنده از نقاط مربوطه در نمودار فوق به دست می‌آید و مقادیر آن برای CBM و VBM به ترتیب برابر با ۳/۳۲ و ۷/۶۸ الکترون ولت است. دیگر پارامترهای مؤثر در تحرک‌پذیری حامل‌های بار، جرم مؤثر در جهت حرکت حامل‌ها m^* و جرم مؤثر میانگین m_d هستند که مقادیر به دست آمده در جدول ۲ قابل مشاهده است.

آخرین پارامتری که برای محاسبهٔ تحرک‌پذیری مورد نیاز است ضریب کشسانی دو بعدی (C_{2D}) تک‌لایهٔ آرسنین در دو راستای x و y است که بر خلاف دو پارامتر قبلی به نقطهٔ مورد بررسی در ساختار نواری وابسته نیست. روش محاسبهٔ ضریب بر مبنای بررسی تغییرات انرژی کل ماده در اثر کشیدگی و فشردگی ساختار بلوری استوار است. با برازش دادن معادلهٔ درجه دو $E = a\varepsilon^2 + b$ بر تغییرات انرژی کل بر حسب کرنش می‌توان ضریب کشسانی دو بعدی را از رابطهٔ زیر به دست آورد:

$$C_{2D} = \frac{2a}{S_\circ}, \qquad (۴)$$

۱. vc-relax

جدول ۲. مقادیر جرم مؤثر نقاط VBM و CBM ساختار نواری تک‌لایهٔ آرسنین در دو راستای x و y .

	m_x^*	m_y^*	m_d
CBM	۱/۲۰ m_e	۰/۲۳ m_e	۰/۵۲۵ m_e
VBM	-۰/۳۶ m_e	-۰/۰۹ m_e	۰/۱۸ m_e

جدول ۳. مقادیر ضریب کشسانی به همراه مقادیر جرم مؤثر، پتانسیل تغییر شکل و تحرک‌پذیری نقاط VBM و CBM ساختار نواری تک لایهٔ آرسنین در دو راستای x و y.

	جهت y (جهت آرمچیر)		جهت x (جهت زیگزاگ)	
	VBM (حفره)	CBM (الکترون)	VBM (حفره)	CBM (الکترون)
پتانسیل تغییر شکل	-۷/۶۸eV	-۰/۳۸ eV	۸/۲۲eV	۳/۳۲ eV
جرم موثر	-۰/۰۹m_e	۰/۲۳ m_e	-۰/۳۶m_e	۱/۲۰ m_e
جرم موثر میانگین	۰/۱۸ m_e	۰/۵۲ m_e	۰/۱۸ m_e	۰/۵۲ m_e
ضریب کشسانی دو بعدی	۱۰/۸۵ N/m	۱۰/۸۵ N/m	۴۵/۶۴N/m	۴۵/۶۴ N/m
تحرک پذیری (در دمای اتاق)	۱۷۷۳ $cm^2/_{V\cdot s}$	۱۰۷۴۰۳ $cm^2/_{V\cdot s}$	۱۷۱۳ $cm^2/_{V\cdot s}$	۱۰۷۳ $cm^2/_{V\cdot s}$

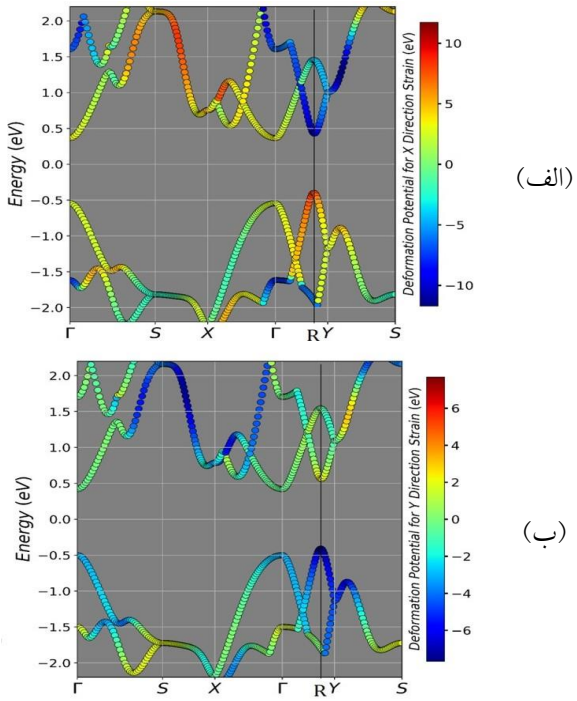
در این رابطه $S_{\circ}$ مساحت سطح مقطع افقی ابریاختهٔ تک‌لایه در حالت بدون کرنش است. با استفاده از این روش، در جهت y ضریب کشسانی دو بعدی تک‌لایهٔ آرسنین N/m ۱۰/۸۵ و در جهت x برای کرنش مثبت (کرنش کششی) N/m ۳۳/۳۴ و برای کرنش منفی (کرنش فشاری) N/m ۵۷/۹۴ به دست می‌آید.

به کمک پارامترهای محاسبه شده، تحرک‌پذیری الکترون‌ها (که به خواص CBM وابسته است) و حفره‌ها (که به خواص VBM وابسته است) برای تک‌لایهٔ آرسنین در دمای اتاق قابل محاسبه است. مقادیر به دست آمده برای تحرک‌پذیری و پارامترهای مؤثر در آن، که در بالا محاسبه شد، در جدول ۳ خلاصه شده است.

با نگاهی به این جدول ناهمسانگردی قابل توجهی را بین مقادیر برخی پارامترها در دو راستای x و y می‌توان دید. یکی از این ناهمسانگردی‌ها در مورد رفتار کشسانی متفاوت تک لایهٔ آرسنین در مقابل کشش و فشار در دو راستای متعامد است به گونه‌ای که نیروی لازم برای ایجاد تغییر طول مشخصی در راستای x حدودا ۴/۵ برابر نیروی لازم برای ایجاد همین تغییر طول در راستای y است. همچنین نقطهٔ CBM در ساختار نواری واکنش بسیار متفاوتی در مقابل کشیدگی و فشردگی ساختار بلوری در دو راستای مختلف از خود نشان می‌دهد که باعث تفاوت چند برابری پتانسیل تغییر شکل این نقطه در دو راستای x و y شده است. در دو نقطهٔ مورد بررسی ساختار نواری جرم مؤثر نیز در راستای x حدودا ۴ الی ۵ برابر بزرگ‌تر از جرم مؤثر در راستای y است. برایند همه این پارامترهای ناهمسانگرد در نهایت منجر به ناهمسانگردی تحرک‌پذیری شده که مقدار این ناهمسانگردی برای نوار ظرفیت بسیار قابل توجه است. واضح است که به علت توان دو پتانسیل تغییر شکل در رابطهٔ تحرک‌پذیری، این پارامتر نسبت به دیگر پارامترها نقش تعیین کننده‌تری در تحرک‌پذیری حامل‌های بار (چه از لحاظ اندازه و چه از لحاظ ناهمسانگردی) دارد.

۲. ۴. اثر کرنش بر ساختار الکترونی و تحرک‌پذیری حامل‌های بار تک لایهٔ آرسنین

اعمال کرنش یکی از روش‌های شناخته شده برای ایجاد تغییر در خواص ساختارهای دو بعدی محسوب می‌شود. با این حال

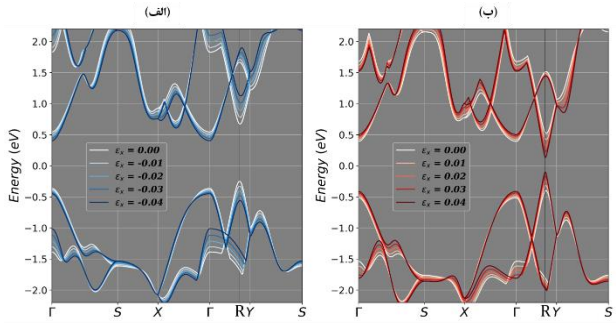


شکل ۹. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (الف) و (ب) به ترتیب پتانسیل تغییر شکل در دو راستای x و y برای نقاط مختلف ساختار نواری تک لایهٔ آرسنین. (مقادیر مربوط به هر رنگ در ستون رنگی کنار هر نمودار مشخص شده است) .

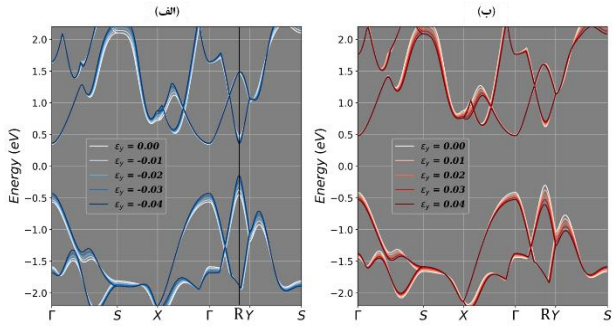
چگونگی تاثیر کرنش بر خواص همهٔ مواد یکسان نبوده و گاهی منجر به تأثیرات بسیار منحصر به فردی در برخی از ساختارهای بلوری می‌شود.

با توجه به نتایج بخش قبل و ناهمسانگردی قابل توجه مشاهده شده در مورد پارامترهای تک‌لایهٔ آرسنین، پاسخ ناهمسانگرد و جالب توجه خواص این ساختار به کشیدگی و فشردگی در راستاهای مختلف دور از ذهن نیست. در بخش قبل پتانسیل تغییر شکل نقاط VBM و CBM را به منظور محاسبهٔ تحرک‌پذیری حامل‌های بار قرار گرفته در این نقاط مورد بررسی قرار دادیم. اما با توجه به تعریف پتانسیل تغییر شکل، این پارامتر همچنین می‌تواند دید خوبی از چگونگی واکنش ساختار نواری به کرنش ساختار بلوری به دست داده و به پیش‌بینی تغییرات آن کمک کند. بنابراین پتانسیل تغییر شکل را برای تمام نقاط نوارهای بالایی نوار ظرفیت و نوارهای پایینی نوار رسانش محاسبه کردیم که نتیجهٔ آن در شکل ۹ قابل مشاهده است.

با توجه به رابطهٔ ۴، انرژی نقاط با پتانسیل تغییر شکل مثبت در اثر کشیدگی ساختار بلوری افزایش و در اثر فشردگی ساختار بلوری کاهش می‌یابد و این روند در مورد نقاط با پتانسیل تغییر شکل منفی برعکس است. از این رو با نگاهی به شکل ۹ می‌توان پیش‌بینی کرد که در اثر میزان کافی کشیدگی ساختار بلوری در راستای x به علت پتانسیل تغییر شکل منفی در راستای x نوار رسانش در بردار موج R و پتانسیل تغییر شکل مثبت در راستای x در بردار موج Γ، بردار موج کمینهٔ این نوار (CBM) از Γ به R تغییر یابد. هرچند که پتانسیل تغییر شکل جهت y این نقاط هم علامت هستند اما به علت بزرگ‌تر بودن مقدار آن در بردار موج R، همین اتفاق برای فشردگی ساختار بلوری در راستای y نیز محتمل است. به همین ترتیب در مورد نوار ظرفیت جابه‌جایی بردار موج بیشینه این نوار از R به Γ برای فشردگی ساختار بلوری در جهت x و کشیدگی ساختار بلوری در جهت y (هر دو به علت اختلاف در بزرگی پتانسیل تغییر شکل) قابل پیش‌بینی است. نتیجهٔ محاسبهٔ ساختار نواری تک لایهٔ کرنش یافته آرسنین تحت مقادیر ۱ تا ۴ درصدی کرنش کششی و فشاری تک محوری در دو راستای x



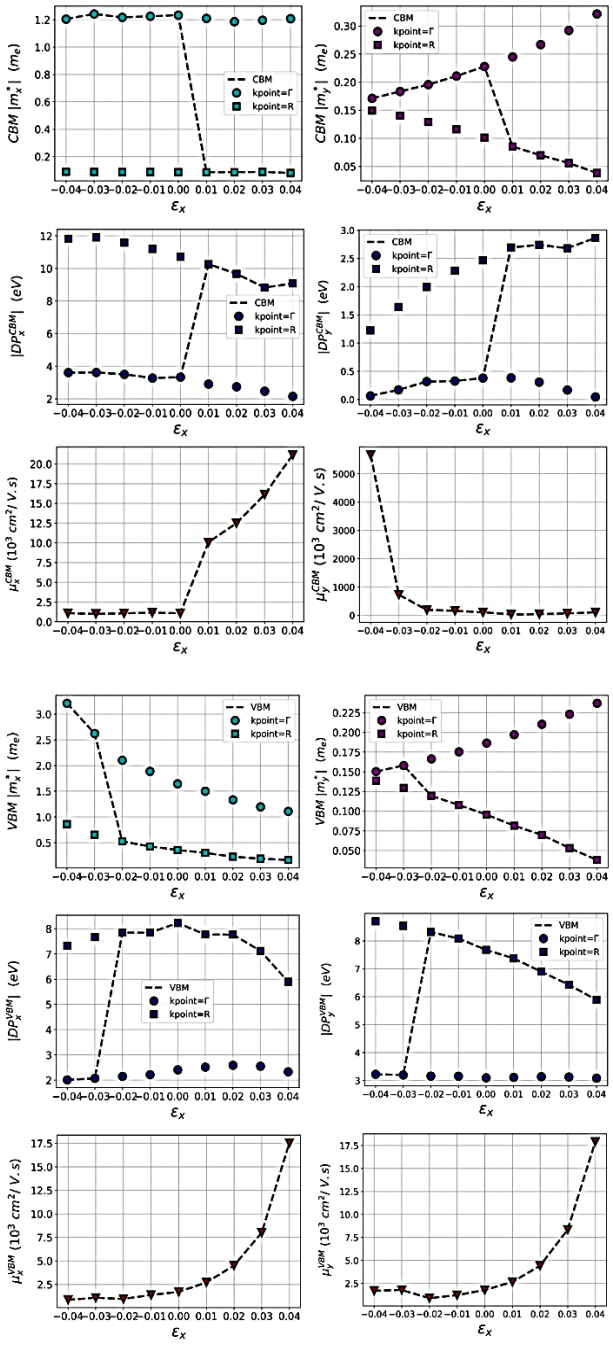
شکل ۱۰. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (الف) ساختار نواری تک لایهٔ آرسنین برای مقادیر منفی کرنش (فشردگی) در راستای x و (ب) ساختار نواری تک لایهٔ آرسنین برای مقادیر مثبت کرنش (کشیدگی) در راستای x.



شکل ۱۱. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (الف) ساختار نواری تک لایهٔ آرسنین برای مقادیر منفی کرنش (فشردگی) در راستای y و (ب) ساختار نواری تک لایهٔ آرسنین برای مقادیر مثبت کرنش (کشیدگی) در راستای y.

و y به ترتیب در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ به نمایش در آمده است.

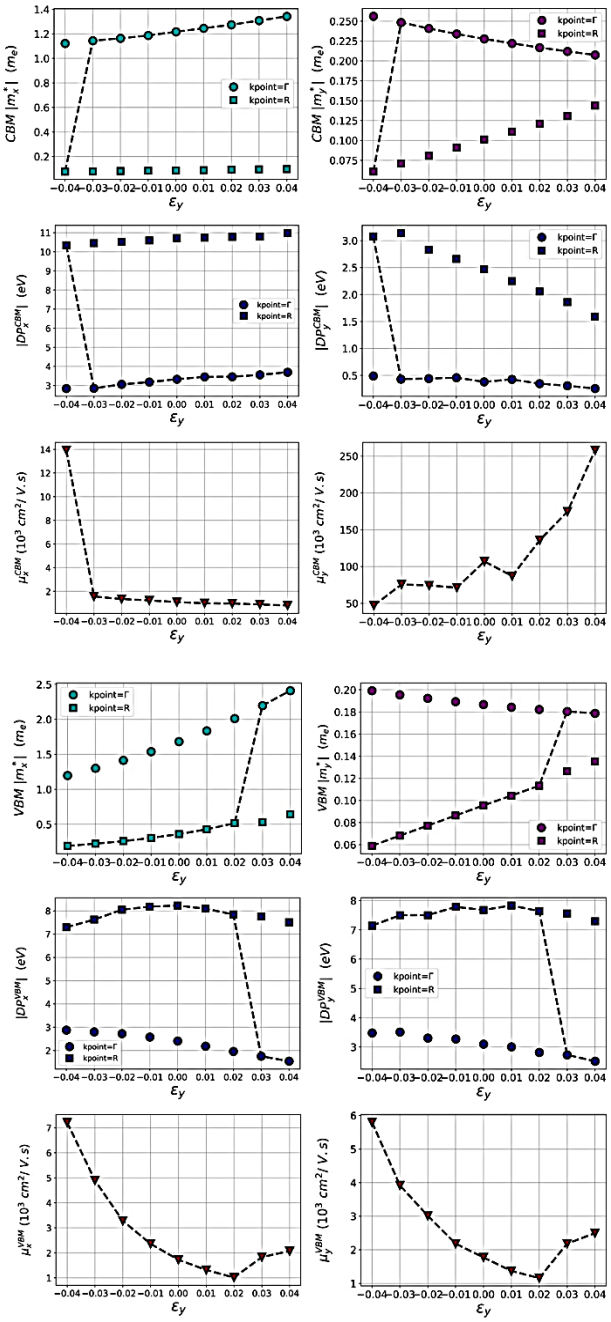
مطابق با انتظار، نتایج محاسبهٔ ساختار نواری برای ساختارهای بلوری کرنش یافته تک لایهٔ آرسنین سازگاری خوبی را با پیش‌بینی‌های متکی بر پتانسیل تغییر شکل نشان می‌دهد. بحث اخیر نکتهٔ جالب توجهی از نقطه نظر بررسی خواص تحرک‌پذیری در خود دارد. اگر علت تغییر بردار موج مربوط به کمینهٔ نوار رسانش (یا بیشنه نوار ظرفیت) تفاوت پتانسیل تغییر شکل کمینهٔ (یا بیشینهٔ) جدید و سابق است، با توجه به وابستگی تحرک‌پذیری حامل‌های بار به پتانسیل تغییر شکل، همین تفاوت (احتمالا) می‌تواند عامل تغییرات قابل توجه تحرک‌پذیری باشد. البته در بررسی تغییرات تحرک‌پذیری در اثر کرنش باید به نقش جرم مؤثر نیز دقت شود. هرچند در اثر اعمال کرنش به ساختار بلوری معمولا جرم مؤثر نقاط مختلف ساختار نواری دچار تغییرات ملایمی می‌شوند اما در واقع، تغییر بردار موج نقاط کمینهٔ نوار رسانش و بیشینهٔ نوار ظرفیت می‌تواند عامل تغییرات چشمگیر و ناگهانی جرم مؤثر مورد استفاده در محاسبهٔ تحرک‌پذیری باشد. برای مشخص شدن چگونگی این تغییرات مقادیر جرم مؤثر، پتانسیل تغییر شکل و تحرک‌پذیری را در دو راستای x و y مورد بررسی قرار داده‌ایم. در شکل‌های ۱۲ و ۱۳ مقادیر محاسبه شدهٔ این پارامترها برای کرنش ۴- تا ۴ درصدی قابل مشاهده است. در نمودارهای مربوط به پتانسیل تغییر شکل و جرم مؤثر مقادیر مربوط به بردار موج R و Γ (در کرنش‌های مختلف) به صورت جداگانه و به ترتیب با نشانگرهای مربع و دایره مشخص شده‌اند. برای مقادیر مختلف کرنش، بردار موج نقاط بیشینهٔ نوار ظرفیت و کمینهٔ نوار رسانش (که در تحرک‌پذیری حامل‌های بار حائز اهمیت هستند) تغییر کرده و بین بردارهای موج R و Γ جابه‌جا می‌شوند. بردار موج مربوط به VBM و CBM در هر کرنش با دنبال کردن مسیر خط‌چین در نمودارها قابل تشخیص است. توجه به تغییر ناگهانی بردار موج مربوط به



شکل ۱۲. نمودارهای مقادیر جرم مؤثر راستاهای x و y، پتانسیل تغییر شکل راستاهای x و y و مقادیرتحرک‌پذیری حامل‌های بار در راستاهای x و y مربوط به پایین‌ترین نقطهٔ نوار رسانش (حفره‌ها) و بالاترین نقطهٔ نوار ظرفیت (الکترون‌ها) بر حسب مقادر مختلف کرنش ساختار بلوری در راستای x.

VBM و CBM (انتقال از R به Γ و برعکس) برای درک دلیل تغییرات ناگهانی مقادیر جرم مؤثر، پتانسیل تغییر شکل و در نهایت تحرک‌پذیری سودمند است. نتایج نشان می‌دهد که در اثر اعمال کرنش به ساختار بلوری، تحرک پذیری تغییرات زیادی را تجربه می‌کند. در مواردی مانند تغییرات μ_x^{CBM} در ($\varepsilon_x = \%۰ \rightarrow \%۱$) و ($\varepsilon_x = \%-۳ \rightarrow \%-۴$)[۱] که شاهد تغییر

۱. تغییر کرنش راستای x از صفر به یک درصد



شکل ۱۳. نمودارهای مقادیر جرم مؤثر راستاهای x و y، پتانسیل تغییر شکل راستاهای x و y و مقادیرتحرک‌پذیری حامل‌های بار در راستاهای x و y مربوط به پایین‌ترین نقطهٔ نوار رسانش (حفره‌ها) و بالاترین نقطهٔ نوار ظرفیت (الکترون‌ها) بر حسب مقادر مختلف کرنش ساختار بلوری در راستای y.

ناگهانی و قابل توجه تحرک‌پذیری هستیم، تغییر بردار موج مربوط به VBM و CBM مسئولیت اصلی را به عهده دارد. در برخی از موارد نیز مانند تغییرات μ_y^{CBM}، μ_x^{CBM}، μ_y^{vBM}، μ_x^{vBM} در ($\varepsilon_x > \%0$)،با وجودی که تغییری در بردار موج مربوط به VBM و CBM رخ نداده، تغییرات ملایم اما تأثیر گذار پتانسیل تغییر شکل و جرم مؤثر منجر به افزایش چشمگیر تحرک‌پذیری شده است. کاهش قابل توجه m_y^* برای بالاترین نوار ظرفیت و پایین‌ترین نوار رسانش در بردار موج R بر اثر

کشش ساختار بلوری در راستای x، در شکل ۱۰ الف مشهود است (به تیز شدگی تدریجی نوارهای ذکر شده در بردار موج R با افزایش کشش ساختار بلوری در راستای x دقت کنید).

در واقع محاسبهٔ دقیق رسانایی الکتریکی امری بسیار پیچیده است. این در حالی است که محاسبات فوق که بر اساس رابطهٔ تاکاگی انجام شده شکل ساده‌ای از جفت شدگی الکترون-فونون را در نظر گرفته است و بنابراین تنها تخمینی از حد بالای تحرک‌پذیری به دست می‌دهد. در شرایط واقعی عوامل خارجی بسیاری وجود دارد که باعث کاهش این مقادیر بیش از حد براورد شده می‌شود. با این وجود نتایج به دست آمده از رابطهٔ تاکاگی از نقطه نظر مقایسهٔ تحرک‌پذیری نسبی راستاهای مختلف به منظور بررسی ناهمساگردی‌های موجود به اندازهٔ کافی قابل اعتماد است[۱۲]. به جهت درک بهتر از ناهمسانگردی تحرک‌پذیری تک لایهٔ آرسنین در دو راستای x و y و اثرات کرنش ساختار بلوری بر آن، نسبت تحرک‌پذیری در دو راستا را برای مقادیر مختلف کرنش محاسبه کردیم که نتایج در شکل ۱۴ قابل مشاهده است. نتایج، وابستگی ناهمسانگردی تحرک‌پذیری حامل‌های بار به کرنش تک محوری ساختار بلوری را نشان می‌دهد که این وابستگی برای الکترون‌ها (CBM) بسیار شدید و قابل توجه است.

۳. نتیجه گیری

محاسبات نشان می‌دهد که اگرچه ساختار تک لایهٔ آرسنین گاف غیر مستقیم دارد، در اثر فشردگی بیش از ۲ درصدی در راستای x و کشیدگی بیش از ۳ درصدی در راستای y شاهد گذار گاف غیر مستقیم به مستقیم خواهیم بود. اتصال اتم‌های هیدورژن به لبهٔ نانونوارها به خوبی اثر لبه را خنثی می‌کنند به شکلی که در نزدیکی سطح فرمی اتم‌های هیدروژن و اتم‌های آرسنیک لبه سهم ناچیزی دارند. این موضوع باعث می‌شود که در ساختار نواری، نوارهای نزدیک به سطح فرمی در نانونوارها و تک لایه شباهت قابل مشاهده‌ای داشته باشند. به عنوان پدیده‌ای شناخته شده، اثرات محدود شدگی کوانتمی باعث افزایش گاف نواری نانونوارها با کاهش عرض آنها می‌شود. اما بررسی دقیق‌تر نشان داد که کیفیت متفاوت اثرات محدود شدگی کوانتمی بر بخش‌های مختلف ساختار نواری منجر به گذار گاف غیر مستقیم به مستقیم در نانونوارهای آرمچیر با کاهش عرض نیز می‌شود. همچنین محاسبات تحرک‌پذیری، تحرک‌پذیری بسیار بالای الکترون‌ها در پایین ترین نقطهٔ نوار رسانش در راستای y را نشان می‌دهد که مهم‌ترین عامل آن را می‌توان مقدار بسیار کوچک پتانسیل تغییر شکل مربوطه دانست. با وجودی که تحرک‌پذیری حفره‌ها در دو راستای x و y تقریبا برابر است، ناهمسانگردی قابل توجهی در تحرک‌پذیری الکترون‌ها در این دو راستا وجود دارد. از طرف دیگر تفاوت بسیار زیادی بین تحرک‌پذیری الکترون‌ها و حفره‌ها در راستای y وجود دارد که شرایط خوبی را برای جداسازی مؤثر الکترون و حفره در موارد لزوم فراهم می‌آورد. نتایج به دست آمده از ساختارهای کرنش یافته نشان می‌دهد که کرنش ساختار بلوری با ایجاد تغییر در انحنای نوارهای انرژی موجب تغییرات جرم مؤثر و در نتیجه تحرک‌پذیری می‌شود. از طرف دیگر جابه‌جایی‌های بردار موج مربوط به بیشینه انرژی نوار ظرفیت و کمینه انرژی نوار رسانش در اثر کرنش، تغییرات قابل توجه و ناگهانی را در تحرک پذیری حامل‌های بار موجب می‌شوند. از مهم‌ترین نتایج اعمال کرنش بر ساختار بلوری می‌توان به کاهش شدید ناهمسانگردی تحرک‌پذیری الکترون‌ها در کرنش ۴- درصدی در راستای x و افزایش شدید این ناهمسانگردی در کرنش ۴- درصدی در راستای y اشاره کرد.

مراجع

1. H Castro Neto, F Guinea, N M R Peres, K S Novoselov, and A K Geim, *Rev. Mod. Phys*. **81** (2009) 109.
2. M I Katsnelson,, "*Graphene: Carbon in Two Dimensions*", Cambridge University Press, Cambridge (2012).
3. C Liu, H Jiang, and Y Yao, *Phys. Rev*. B **84** (2011) 195430.
4. N D Drummond, V Zolyomi, and V I Fal'ko, *Phys. Rev*. B **85** (2012) 075423.

5. M Ezawa, *New J. Phys*. **14** (2012) 033003.
6. P Vogt, P De Padova, C Quaresima, J Avila, E Frantzeskakis, M C Asensio, A Resta, B Ealet, and G Le Lay, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 155501.
7. A Fleurence, R Friedlein, T Ozaki, H Kawai, Y Wang, and Y Yamada-Takamura, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 245501.
8. L Li, Y Yu, G J Ye, Q Ge, X Ou, H Wu, D Feng, X H Chen, and Y Zhang, *Nat. Nanotechnol*. **9** (2014) 372.
9. M Zeraati, S M Vaez Allaei, I Abdolhosseini Sarsari, M Pourfath, and D Donadio, *Phys. Rev.* B **93,** 8 (2016) 85424.
10. S Takagi, A Toriumi, M Iwase, and H Tango, *IEEE Trans. Electron Devices*, **41,** 12 (1994) 2363.
11. J Qiao, X Kong, Z X Hu, F Yang, and W Ji, *Nat. Commun.* **5** 1 (2014) 4475.
12. R Fei and L Yang, *Nano Lett.* **14**, 5 (2014) 2884.