مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۸، شمارهٔ ۲، تابستان ۱۳۹۷

بررسی اثرات شعاع داخلی و پهنا روی طیف انرژی و جریان پایا در حلقه‌های کوانتومی گرافینی هگزاگونال با لبه‌های زیگزاگ

معصومه قربانی و سید ادریس فیض آبادی

دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

پست الکترونیکی: Edris@iust.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۱۱/۱۹ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۳۹۶/۱۱/۱۵)

چکیده

در این کار با استفاده از مدل تنگ بست، تأثیر تغییرات شعاع داخلی و پهنای حلقه‌های کوانتومی گرافینی هگزاگونال با لبه‌های زیگزاگ در حضور شار مغناطیسی گذرنده از مرکز حلقه، روی طیف انرژی و جریان پایای آنها مورد بررسی قرار گرفته است. این بررسی نشان می‌دهد که طیف انرژی این گونه حلقه‌ها به زیرنوارهایی شامل شش تراز انرژی جفت شده تقسیم می‌شود که به وسیله گاف‌هایی از هم جدا شده‌اند و به شدت تحت تأثیر شعاع داخلی و پهنا هستند. به عبارت دیگر پهنای این حلقه‌های کوانتومی به همراه شعاع داخلی، پارامترهای بسیار مهمی هستند که به وسیلهٔ انتخاب هوشمندانه آنها می‌توان به مهندسی گاف انرژی در این ساختارها پرداخت. حلقه‌های باریک‌تر، زیرنوارهای انرژی منظم‌تر و گاف انرژی بزرگ‌تری دارند که ناشی از افزایش محدودیت کوانتومی و اثرات لبه‌ای به ویژه در گوشه‌های ساختار حلقهٔ گرافینی هگزاگونال است. افزایش شعاع داخلی هم می‌تواند ترازهای انرژی جفت شده شش تایی را فشرده‌تر و گاف بین زیرنوارهای نزدیک انرژی فرمی را کاهش دهد. لازم به ذکر است که افزایش شعاع داخلی و یا افزایش پهنا تأثیرات مشابهی روی طیف انرژی دارد و چنانچه یکی از آنها افزایش و دیگری کاهش یابد، می‌توانند تأثیرات همدیگر را به ویژه روی گاف انرژی نزدیک تراز فرمی کاهش دهند. علاوه بر آن، افزایش شعاع داخلی و یا افزایش پهنا منجر به افزایش دامنه جریان پایا و نیز نوسانات آن می‌شود. این در حالی است که تغییرات پهنا نسبت به تغییرات شعاع داخلی روی جریان پایا مؤثرتر است.

واژه‌های کلیدی: حلقهٔ کوانتومی گرافینی هگزاگونال، مدل تنگ بست، جریان پایا، گاف انرژی

۱. مقدمه

گرافین مادهٔ شگفت انگیزی است که می‌تواند با استفاده از تکنیک‌های مختلف بریده شود و به صورت ساختارهای هندسی مختلفی در آید [۱، ۲]. از جمله این ساختارها حلقه‌های گرافینی هستند که به دلیل ویژگی‌های منحصر به فردی که دارند، بسیار مورد علاقه دانشمندان قرار گرفته‌اند [۳- ۵]. این حلقه‌ها می‌توانند به شکل‌ها و اندازه‌های مختلفی ساخته شوند و انواع پدیده‌های کوانتومی از جمله اثر آهارنف- بوهم به سهولت در آنها قابل مشاهده است [۴- ۶]. با عبور شار مغناطیسی از وسط حلقه، جریان پایایی در حلقه به وجود

می‌آید که بسیار جالب توجه است [۴، ۷]. در سال ۲۰۰۹ آقای ما و همکارانش با مقایسه دو حلقهٔ کوانتومی هگزاگونال گرافینی با پهنای زوج و فرد، اثر زوج و فردی پهنا را روی طیف انرژی و جریان پایا بررسی کردند. آنها در بررسی‌های خود پهنای حلقه را با پارامتر N مشخص کردند و نتیجه گرفتند که حلقه‌های کوانتومی هگزگونال گرافینی با N زوج، نیمه رسانا و با N فرد، فلز هستند که البته این اثر در پهناهای خیلی بزرگ از بین می‌رود [۸]. آنها در ادامه تحقیقات خود روی حلقه‌های لوزی شکل با لبه‌های مختلف کار کردند و نتیجه گرفتند که حلقه‌های لوزی شکل با لبه‌های زیگزاگ مستقل از هندسهٔ حلقه، فلز هستند و با لبه‌های دسته مبلی که پهنای حلقهٔ آن به صورت رابطهٔ $N=۳\mathrm{m}-۱$ باشد، که در آن m عددی صحیح است، نیز فلز می‌باشند [۴]. در سال ۲۰۱۴ دکاستا و همکارانش تأثیر هندسه و لبه را روی طیف انرژی حلقه‌های کوانتومی گرافینی با مقایسه دو مدل تنگ بست و مدل دیراک ساده شده مورد بررسی قرار دادند. آنها با بررسی حلقه‌های هگزاگونال، مثلثی، لوزی شکل و دایره‌ای گرافینی مشاهده کردند که طیف انرژی به زیرنوارهایی تقسیم می‌شوند که تعداد ترازهای انرژی جفت شده در آن به تقارن حلقه بستگی دارد. علاوه بر آن هندسه و نوع لبه‌های حلقه نیز تأثیر مهمی در طیف انرژی ساختار داشته و در نتیجه می‌تواند ویژگی‌های حلقه را دگرگون کند [۹].

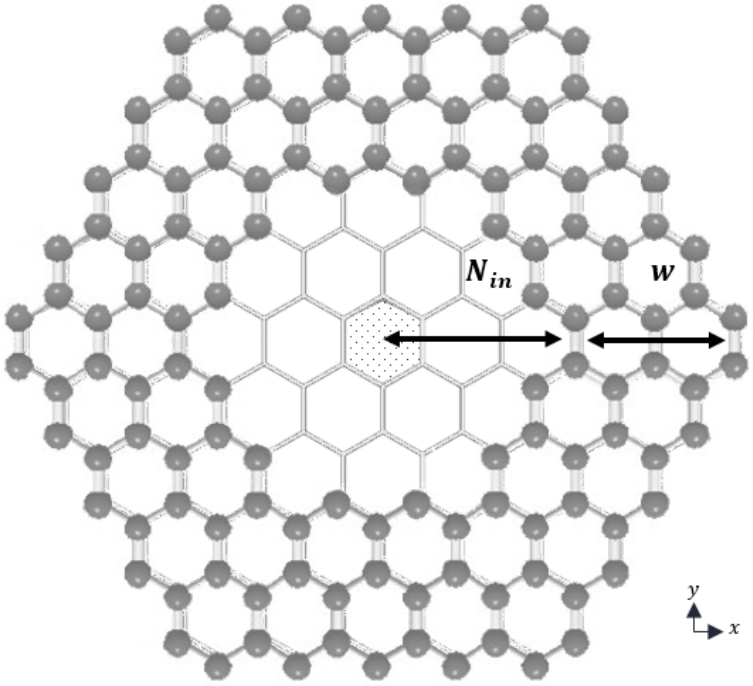
در این تحقیق با استفاده از روش تنگ بست و با قطری سازی دقیق هامیلتونین سیستم، به بررسی و تحلیل اثرات تغییرات شعاع داخلی و همچنین اثرات تغییرات پهنا بر طیف انرژی و نیز جریان‌های پایای مربوطه در حلقه‌های کوانتومی گرافینی هگزاگونال با لبه‌های زیگزاگ پرداخته‌ایم. نتایج ما نشان می‌دهد که در حلقه‌های باریک‌تر، نوسانات انرژی بر حسب شار مغناطیسی منظم‌تر می‌شود و گاف بین زیر نوارهای شامل ترازهای شش تایی جفت شدهٔ انرژی اطراف تراز فرمی افزایش می‌یابد. همچنین دامنهٔ جریان پایا در حلقه‌های باریک‌تر کاهش می‌یابد. افزایش شعاع داخلی می‌تواند نوسانات انرژی را فشرده و محل تقاطع ترازهای انرژی را در راستای ϕ به هم نزدیک کند و همچنین نوسانات جریان پایا را افزایش دهد.

۲. مدل

حلقهٔ گرافینی در واقع برشی از گرافین است که با برداشتن تعدادی حلقهٔ شش کربنی بنزن از میان آن، به صورت حلقه در می‌آید. هر کدام از اتم‌های چهار ظرفیتی کربن با سه پیوند کووالانسی σ به سه اتم دیگر در یک صفحه متصل است که سه الکترون ظرفیت هر اتم کربن در این پیوند کووالانسی به دام افتاده و چهارمین الکترون که الکترون π نامیده می‌شود، وارد این گونه پیوندهای کوالانسی نشده و با قید کمتری به اتم کربن مربوطه متصل است. در واقع همین الکترون‌های π هستند که در حلقه‌های کوانتومی گرافینی، جریان پایا را به وجود می‌آورند. به منظور توصیف دقیق‌تر سیستم مورد بررسی، در شکل ۱ طرح‌واره‌ای از یک حلقهٔ کوانتومی گرافینی هگزاگونال با لبه‌های زیگزاگ را به نمایش گذاشته‌ایم. همان طور که از شکل پیداست، ما در این نوشتار تعداد ردیف‌های بنزن برداشته شده از وسط حلقه را با N_{in} نشان می‌دهیم که در این شکل، سه ردیف است و تعداد ردیف‌های بنزن موجود در پهنای حلقهٔ شش ضلعی را با w مشخص می‌کنیم که در شکل، دو ردیف می‌باشد. شعاع خارجی را هم به صورت $\mathrm{N}_{out}=\mathrm{N}_{in}+w$ نمایش می‌دهیم. میدان مغناطیسی اعمال شده به صورت عمود بر سطح صفحهٔ حلقهٔ کوانتومی $\vec{B}=B\hat{k}$ و محدود به ناحیهٔ مرکزی آن است به طوری که شار مغناطیسی از میان یک حلقهٔ بنزن می‌گذرد که در شکل ۱ مشخص شده است و به صورت $\phi=\frac{۳\sqrt{۳}}{۲}a^{۲}B$ در نظر گرفته می‌شود که در آن a فاصلهٔ بین دو اتم کربن همسایه و برابر ۱٫۴۲ آنگستروم می‌باشد. برای بررسی طیف انرژی و جریان پایا در این ساختار از مدل تنگ بست با تقریب نزدیک‌ترین همسایه‌ها استفاده می‌کنیم که هامیلتونین آن در شکل کوانتش دوم برای الکترون‌های π به شکل زیر است:

$$H=\sum_i \varepsilon_i c_i^{+}c_i+\sum_{<i,j>}(t_{ij}c_i^{+}c_j+t_{ij}^{*}c_i c_j^{+}), \qquad (۱)$$

که در آن ε_i انرژی i امین جایگاه است، c_i^{+} و c_i به ترتیب



شکل ۱. یک حلقه کوانتومی گرافینی هگزاگونال با $w=۲v$,$N_{in}=۳$ و لبه‌های داخلی و خارجی زیگزاگ در حضور شار مغناطیسی گذرنده از یک حلقهٔ بنزن در مرکز آن.

عملگرهای خلق و فنای الکترون π در جایگاه iام هستند. $<i,j>$ به این معناست که جمع روی نزدیک‌ترین i و jها صورت می‌گیرد. پارامتر پرش t_{ij} در حضور میدان مغناطیسی غیر صفر به صورت $t_{ij}\rightarrow t_{ij}e^{i۲\Phi_{ij}}$ تحت تأثیر قرار می‌گیرد که در آن $\Phi_{ij}=\frac{۱}{\Phi_{۰}}\int_{r_j}^{r_i}A.dl$ فاز پیرلز [۱۰] و $\phi_{۰}=\frac{hc}{e}$ کوانتم شار مغناطیسی می‌باشد. پتانسیل برداری را در پیمانهٔ لاندائو و به صورت $\vec{A}=(۰,Bx,۰)$ در نظر می‌گیریم. با شماره گذاری دلخواه اتم‌های کربن سیستم، هامیلتونین فوق را می‌توان به شکل ماتریسی زیر نمایش داد:

$$H=\begin{bmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \iddots \\ \cdots & \varepsilon_{i-۱} & t_{i-۱,i} & ۰ & \cdots \\ \cdots & t_{i,i-۱} & \varepsilon_i & t_{i,i+۱} & \cdots \\ \cdots & ۰ & t_{i+۱,i} & \varepsilon_{i+۱} & \cdots \\ \iddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \qquad (۲)$$

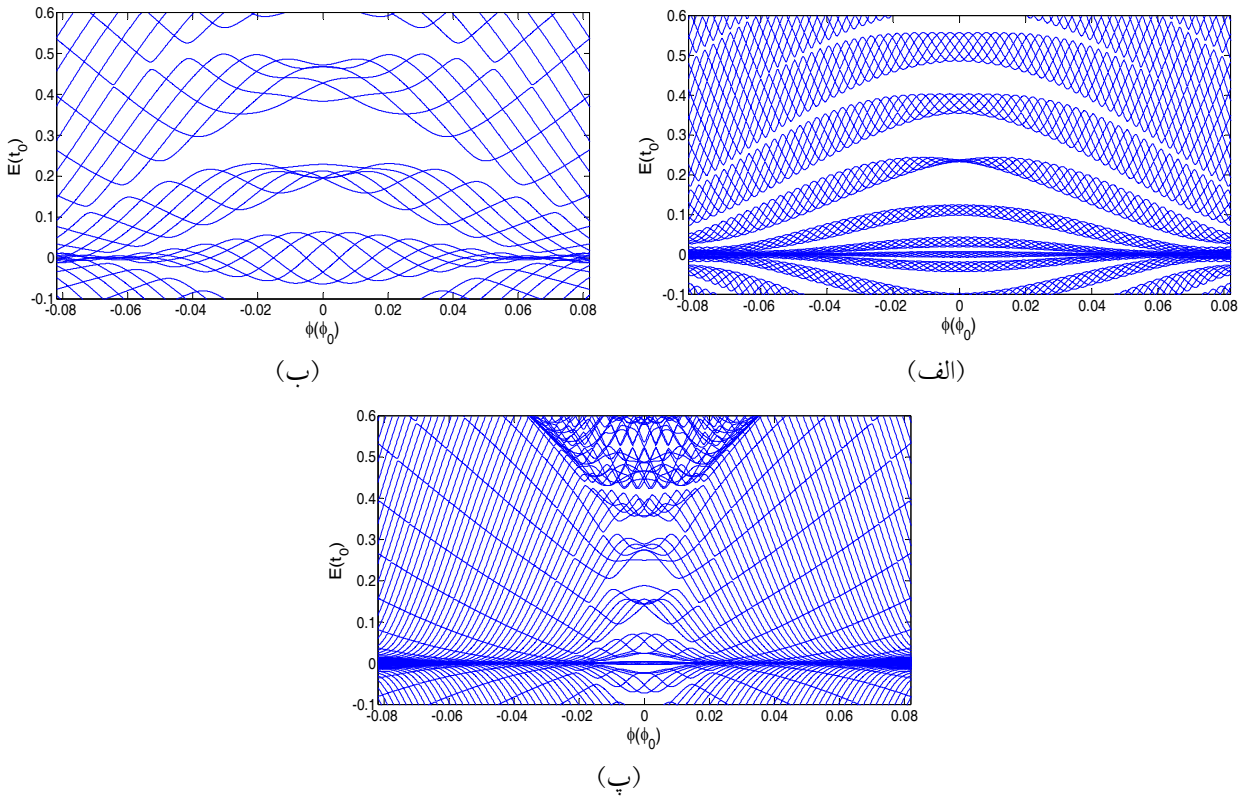
که ابعاد این ماتریس مربعی وابسته به تعداد جایگاه‌های اتم کربن در سیستم است. برای نزدیک‌ترین همسایه‌ها t_{ij} برابر رابطهٔ ذکر شده و بقیه t_{ij} ها برابر صفر می‌باشد. با استفاده از روش قطری سازی دقیق می‌توان با تکنیک‌های عددی معادله ویژه مقداری مربوط به هامیلتونین فوق را حل کرد و به طیف انرژی سیستم دست یافت [۱۱]. جزییات و ویژگی‌های طیف انرژی این ساختار را بر حسب مشخصات مربوط به شعاع داخلی حلقهٔ کوانتومی و نیز پهنا در بخش بعد مورد بحث و تحلیل قرار داده‌ایم. علاوه بر آن با مشتق‌گیری عددی نسبت به شار مغناطیسی می‌توان به جریان پایا به شکل زیر دست یافت:

$$I=-\sum_i\frac{\partial E_i}{\partial\phi}, \qquad (۳)$$

که رفتار جریان پایا را در این گونه حلقه‌های کوانتومی گرافینی بر حسب شعاع داخلی و پهنای آنها و نیز بر حسب شار مغناطیسی در بخش بعدی به بحث گذارده‌ایم.

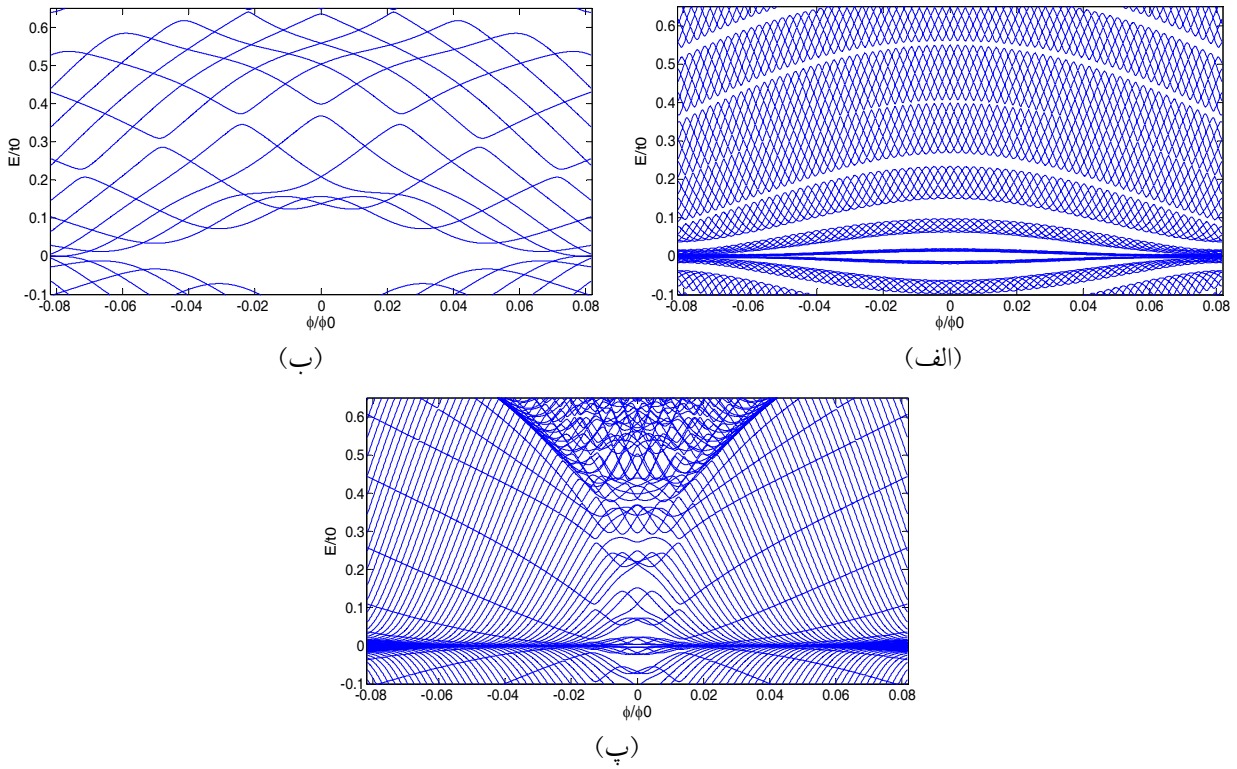
۳. بحث و نتایج

با استفاده از روش ارائه شده در بخش قبل، اکنون به توصیف و تحلیل نتایج خود در مورد حلقه‌های کوانتومی گرافینی هگزاگونال با لبه‌های زیگزاگ می‌پردازیم. لازم به ذکر است که برای حذف اثرات فونونی، این بررسی در دمای صفر کلوین



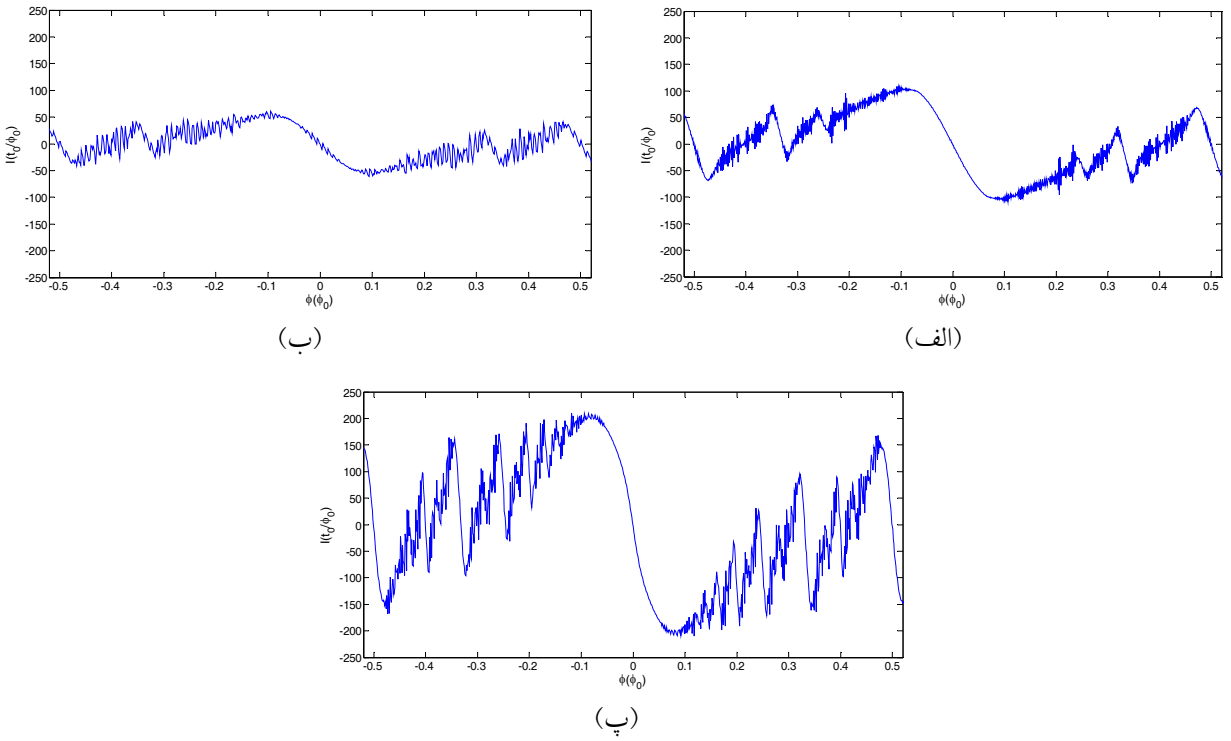
شکل ۲. طیف انرژی برای سه حلقهٔ کوانتومی گرافینی هگزاگونال با لبه‌های زیگزاگ و (الف) $N_{in}=۱۰$ و $w=۴$، (ب) $N_{in}=۴$ و $w=۴$ و (پ) $N_{in}=۴$ و $w=۱۰$ به صورت تابعی از شار مغناطیسی.

انجام شده است. از آنجایی که کلیهٔ اتم‌های موجود در حلقهٔ کوانتومی، اتم‌های کربن هستند لذا انرژی جایگاه همهٔ آنها یکسان بوده که در اینجا آن را برابر صفر $\varepsilon_i=۰$ و ثابت پرش بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها در غیاب شار مغناطیسی را نیز برابر $t_۰=-۲/۷eV$ در نظر گرفته‌ایم [۱۲]. در نمودارهای ارائه شده طیف انرژی در واحد $t_۰$، شار مغناطیسی در واحد $\phi_۰$ و جریان پایا در واحد $\frac{t_۰}{\phi_۰}$ آورده شده است. محاسبات و نتایج مربوط به طیف انرژی حلقه‌های کوانتومی گرافینی هگزاگونال در حضور شار مغناطیسی به خوبی نوسانات آهارانف- بوهم با دورهٔ تناوب $\phi_۰$ را نشان می‌دهد؛ اما به دلیل اینکه در یک دورهٔ تناوب کامل، تعداد ترازهای انرژی بسیار زیاد و پیچیدگی ظاهری آن به حدی است که نمی‌توان به خوبی روی آن بررسی انجام داد؛ از این رو در اینجا طیف انرژی در محدودهٔ شار مغناطیسی از $-۰/۰۸\phi_۰$ تا $۰/۰۸\phi_۰$ را رسم و به نمایش گذاشته‌ایم. طیف انرژی به ترتیب برای سه حلقهٔ مختلف با $w=۴$، $N_{in}=۱۰$ و $N_{in}=۴, w=۴$ و $N_{in}=۴, w=۱۰$ در شکل ۲ و سه حلقه دیگر به ترتیب با $N_{in}=۱۱$، $w=۳$ و $N_{in}=۳$، $w=۳$ و سپس $N_{in}=۳$، $w=۱۱$ در شکل۳ به نمایش گذاشته شده است. همان طور که از شکل‌های ۲ و ۳ پیداست، طیف انرژی به زیرنوارهایی شامل شش تراز انرژی جفت شده تقسیم شده‌اند که علت آن تقارن شش تایی این حلقه‌های کوانتومی گرافینی هگزاگونال است. این زیرنوارها توسط گاف‌هایی از هم جدا شده‌اند که به دلیل پراکندگی الکترون‌ها از لبه‌های حلقه کوانتومی و نیز تحت تأثیر گوشه‌ها و محدودیت کوانتومی ناشی از ساختار به وجود می‌آید. ساختار طیف انرژی حلقه‌ها مستقل از شعاع داخلی، خارجی و پهنا در محدوده مشخص شده، نشان می‌دهد که با افزایش شار مغناطیسی گاف بین زیر نوارهای انرژی کاهش یافته و در نهایت صفر می‌شود که باعث می‌شود این حلقه‌های گرافینی خاصیت فلزی پیدا کنند. بررسی‌های ما نشان می‌دهد که برای حلقه‌های کوانتومی



شکل ۳. طیف انرژی برای سه حلقهٔ کوانتومی گرافینی هگزاگونال با لبه‌های زیگزاگ و (الف) $N_{in}=۱۱$ و $w=۳$، (ب) $N_{in}=۳$ و $w=۳$ و (پ) $N_{in}=۳$ و $w=۱۱$ به صورت تابعی از شار مغناطیسی.

هگزاگونال گرافینی با w زوج بر خلاف حلقه‌های با w فرد، یک زیرنوار شامل شش تراز انرژی در اطراف تراز فرمی که برابر صفر می‌باشد ایجاد می‌شود. وجود تبهگنی در تراز فرمی نشان دهندهٔ فلز بودن این حلقه‌ها است. با مقایسهٔ طیف انرژی شکل ۲. الف و پ در حلقه‌های با پهنای w زوج و مقایسهٔ طیف انرژی شکل ۳. الف و پ در حلقه‌های با پهنای w فرد مشاهده می‌شود که در حلقه‌های با شعاع خارجی ثابت، در اطراف شار صفر، حلقهٔ باریک‌تر که شعاع داخلی بزرگ‌تری هم دارد، ترازهای انرژی شش تایی جفت شدهٔ فشرده‌تر و منظم‌تری دارد و محل تقاطع ترازهای انرژی در راستای ϕ به هم نزدیک‌تر هستند. با این وجود در حلقه‌های با w زوج، حلقهٔ پهن‌تر یک زیرنوار شش ترازی فشرده‌تر از حلقهٔ باریک نزدیک تراز فرمی دارد. در حلقه‌های باریک‌تر صرف نظر از زوج یا فرد بودن پهنا، گاف‌های بین زیرنوارهای انرژی با افزایش شار، بیشتر حفظ می‌شوند و بر خلاف حلقهٔ پهن‌تر که شعاع داخلی کوچک‌تری دارد، زیرنوارهای انرژی همه از هم مجزا هستند؛ که می‌توان علت را در پراکندگی ناشی از محدودیت الکترون‌ها و گوشه‌های حلقه شش ضلعی با نوع خاص لبه‌های آن دانست که با باریک شدن حلقه این اثرات افزایش می‌یابد. در حلقه‌های با شعاع خارجی ثابت، در w زوج افزایش شعاع داخلی و کاهش پهنا، گاف بین زیرنوارهای انرژی نزدیک به انرژی فرمی را فقط کمی کوچک‌تر می‌کند و در حلقه‌های با w فرد، این گاف کمی بزرگ‌تر می‌شود که تغییرات هر دو بسیار ناچیز است. واضح است که این گاف ها در حلقه‌های پهن‌تر با افزایش شار مغناطیسی خیلی سریع‌تر کاهش می‌یابند و از بین می‌روند. با مقایسهٔ شکل ۲. ب و پ مشاهده می‌شود که در حلقه‌های با شعاع داخلی ثابت بر خلاف حلقه‌های با شعاع خارجی ثابت، افزایش پهنای حلقه ترازهای جفت شدهٔ شش تایی را به هم فشرده می‌کند و محل تقاطع ترازهای انرژی را در راستای ϕ اندکی به هم نزدیک‌تر می‌کند. در حلقهٔ باریک‌تر گاف بین زیرنوارهای انرژی افزایش می‌یابد؛ به ویژه این افزایش گاف بین زیرنوارهای نزدیک

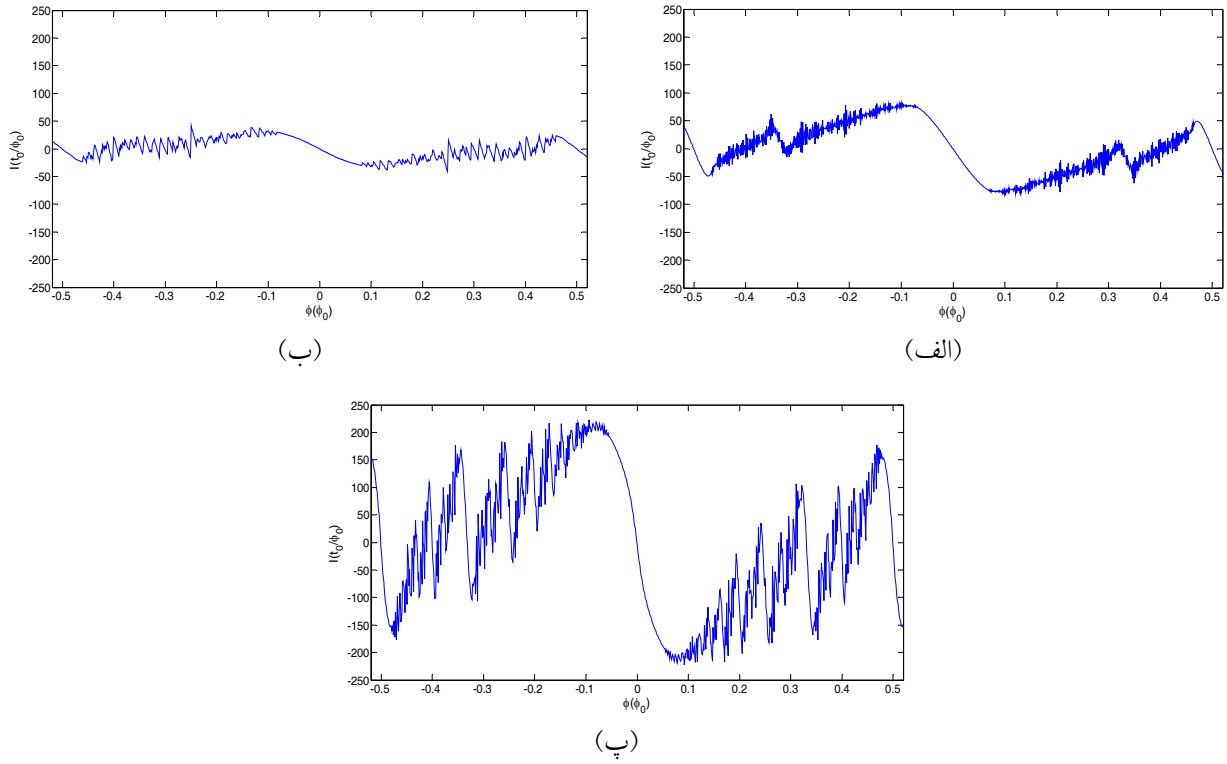


شکل ۴. جریان‌های پایای سه حلقهٔ کوانتومی گرافینی هگزاگونال با لبه‌های زیگزاگ و (الف) $N_{in}=۱۰$ و $w=۴$، (ب) $N_{in}=۴$ و $w=۴$ و (پ) $N_{in}=۴$ و $w=۱۰$ به صورت تابعی از شار مغناطیسی.

به انرژی فرمی، چشمگیر است. همچنین با افزایش شار، گاف‌های بین زیرنوارهای انرژی بیشتر حفظ می‌شوند. با توجه به شکل ۳. ب و پ در حلقه‌های با پهنای فرد هم وضعیت به همین ترتیب است؛ با این تفاوت که افزایش پهنا فقط گاف انرژی بین دو زیرنوار شش‌تایی که در بالا و پایین تراز فرمی هستند را کاهش و این دو زیرنوار را خیلی به هم نزدیک می‌کند و تأثیر چندانی روی گاف بین زیرنوارهای دیگر ندارد. با مقایسهٔ دو طیف انرژی حلقه‌های با پهنای w زوج یکسان در شکل ۲. الف و ب و مقایسهٔ دو طیف انرژی حلقه‌های با پهنای w فرد یکسان در شکل ۳. الف و ب مشاهده می‌شود که با افزایش شعاع داخلی ترازهای جفت شدهٔ شش‌تایی فشرده تر و حالت‌های عبوری به هم نزدیک‌تر می‌شوند. افزایش شعاع داخلی تأثیر قابل ملاحظه‌ای روی گاف بین زیرنوارهای اطراف انرژی صفر گذاشته و آنها را کاهش می‌دهد؛ اما با وجود تغییرات قابل توجه شعاع داخلی، در گاف انرژی بین زیرنوارهای دور از انرژی فرمی تغییرات خاصی دیده نمی‌شود.

بنابراین تغییرات شعاع داخلی فقط گاف بین زیر نوارهای انرژی نزدیک تراز فرمی را تحت تأثیر قرار می‌دهد. شایان ذکر است که نتایج به دست آمدهٔ ما در مورد طیف انرژی حلقه‌های کوانتومی گرافینی مختلف از جمله حلقه‌های کوانتومی گرافینی هگزاگونال با لبه‌های زیگزاگ با $N_{in}=۷$، $N_{out}=۲۱$ و $N_{in}=۱۲$، $N_{out}=۲۱$ با نتایج به دست آمده توسط گروه باهامون[۱] [۱۲] در هماهنگی کامل است. جریان‌های پایا برای سه حلقهٔ یاد شده با پهنای w زوج به ترتیبی که قبلاً در طیف انرژی ذکر شد، در شکل ۴ و برای حلقه‌های یاد شده با پهنای w فرد به ترتیب قبل در شکل ۵ به صورت تابعی از شار مغناطیسی در یک دورهٔ تناوب ϕ_0 نمایش داده شده است. همان طور که انتظار می‌رود در شار مغناطیسی صفر جریان پایا برابر صفر و در شارهای $\phi=n\phi_0$ هم جریان پایا برابر صفر می‌باشد. جریان‌های پایای رسم شده برای حلقه‌های کوانتومی مختلف نشان می‌دهد جریان های پایا دارای نوسانات زیادی

۱. D. A. Bahamon



(الف) (ب) (پ)

شکل ۵. جریان‌های پایای سه حلقهٔ کوانتومی گرافینی هگزاگونال با لبه‌های زیگزاگ و (الف) $N_{in}=۱۱$ و $w=۳$، (ب) $N_{in}=۳$ و $w=۳$ و (پ) $N_{in}=۳$ و $w=۱۱$ به صورت تابعی از شار مغناطیسی.

هستند و دائماً با تغییر شار کم و زیاد می‌شوند؛ حتی در اطراف صفر که به نظر می‌رسد جریان به طور ممتد در حال افزایش است، اما در واقع به صورت دندانه دار است که این دندانه‌ها ناشی از مشتق‌گیری عددی در محل تقاطع ترازهای انرژی عبوری است. با مقایسهٔ جریان برای حلقه‌های کوانتومی هگزاگونال گرافینی مختلف مشاهده می‌شود که در همه آنها با منفی شدن شار، جریان پایا تغییر علامت می‌دهد یعنی مثلاً اگر در شار $\phi_۱$ جریان پایا مثبت است، در شار $-\phi_۱$ (که معنی آن معکوس شدن جهت اعمال میدان مغناطیسی است) جریان پایا منفی می‌شود و برعکس. با مقایسهٔ شکل ۴. الف و ب و همچنین شکل ۵. الف و ب مشاهده می‌شود که در حلقه‌های با پهنای یکسان، چه w زوج و چه فرد، افزایش شعاع داخلی (خارجی) منجر به افزایش دامنهٔ جریان پایا می‌شود.

با مقایسهٔ شکل ۴. الف و پ در حلقه‌های با پهنای w زوج و شکل ۵. الف و پ در حلقه‌های با پهنای w فرد و همچنین با مقایسه شکل ۴. ب و پ در حلقه‌های با پهنای w زوج و شکل ۵. ب و پ در حلقه‌های با پهنای فرد مشاهده می‌شود که در حلقه‌های با شعاع خارجی (داخلی) یکسان مستقل از زوج یا فرد بودن پهنا، افزایش پهنا، باعث افزایش دامنهٔ جریان پایا شده است و این به دلیل کاهش محدودیت الکترون‌ها در ساختار و افزایش آزادی آنها در حلقه و نیز افزایش تعداد اتم‌ها و در نتیجه تعداد حامل‌های بار در حلقه است.

۴. نتیجه‌گیری

در این تحقیق با استفاده از روش تنگ بست اثرات تغییرات شعاع داخلی و پهنا روی طیف انرژی و جریان پایا در حلقه‌های کوانتومی هگزاگونال گرافینی با لبه‌های زیگزاگ مورد بررسی قرار گرفته است. مشاهده می‌شود که طیف انرژی این حلقه‌های کوانتومی هگزاگونال به دلیل تقارن شش تایی ساختار به زیرنوارهای شامل شش تراز انرژی جفت شده تقسیم می‌شوند و تغییرات پهنا و شعاع داخلی روی این زیرنوارها و گاف بین‌شان تأثیر گذار است به طوری که در حلقه‌های با پهنای

یکسان، افزایش شعاع داخلی می‌تواند به شدت روی طیف انرژی تأثیر گذاشته و ترازهای شش‌تایی جفت شده این زیرنوارها را به هم فشرده‌تر و ترازهای عبوری را به هم نزدیک‌تر کند. در شعاع داخلی ثابت نیز، افزایش پهنا هم اثرات مشابهی را روی زیرنوارها دارد. در شعاع خارجی ثابت نیز زمانی این اتفاق می‌افتد که همزمان شعاع داخلی افزایش و پهنا کاهش یابد، اما تأثیر آن نسبتاً کمتر است. تغییرات شعاع داخلی و پهنا همچنین روی گاف بین زیرنوارهای انرژی نزدیک‌تراز فرمی بسیار تأثیر گذار است و افزایش شعاع داخلی و یا افزایش پهنا منجر به کوچک‌تر شدن این گاف می‌شود. لازم به ذکر است که افزایش شعاع داخلی و کاهش پهنا به صورت همزمان، می‌توانند تأثیرات همدیگر را کاهش دهند، به طوری که تأثیر همزمان آنها می‌تواند منجر به این شود که تغییرات گاف انرژی بین زیرنوارهای نزدیک‌تراز فرمی بسیار ناچیز باشد. جریان پایا نیز که از تغییرات انرژی بر حسب شار مغناطیسی ناشی می‌شود، تحت تأثیر تغییرات شعاع داخلی و پهنا قرار می‌گیرد به نحوی که افزایش شعاع داخلی یا پهنا، منجر به افزایش دامنهٔ آن می‌شود که این امر به دلیل افزایش تعداد اتم‌ها و حامل‌های بار در حلقه و همچنین کاهش محدودیت کوانتومی در سیستم اتفاق می‌افتد. با این وجود نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که تغییرات پهنا نسبت به تغییرات شعاع داخلی روی جریان پایا مؤثرتر است و می‌تواند دامنهٔ آن را بیشتر تغییر دهد.

مراجع

1. C Cile, N Berger, C Zhimin Song, *et al*., *Science* **312** 5777 (2006) 1191.
2. D A Areshkin and C T White, *Nano Lett*. **7** 11 (2007) 3253.
3. B L Huang, M C Chang, and C Y Mou, *J. Phys. Condens. Matter.* **24** 24 (2012) 245304.
4. M M Ma and J W Ding, *Solid State Commun*. **150** 27-28 (2010) 1196.
5. J Schelter, P Recher, and B Trauzettel, *Solid State Commun*. **152** 15 (2012) 1411.
6. E Faizabadi and M Omidi, *Phys. Lett. A* **374** 15-16 (2010) 1762.
7. M Omidi and E Faizabadi, *Phys. Lett. A* **379** 34-35 (2015) 1898.
8. M M Ma, J W Ding, and N Xu, *Nanoscale* **1** 3 (2009) 387.
9. D R da Costa, A Chaves *et al*., *Phys. Rev. B* **89** 7 (2014) 075418.
10. M Zarenia, A Chaves, G A Farias, and F M Peeters, *Phys. Rev. B*: *Condens. Matter Mater. Phys*. **84** 24 (2011) 1.
11. A Weiße and H Fehske, *Computational Many-Particle Physics* **739** (2008) 529.
12. D A Bahamon, A L C Pereira, and P A Schulz, *Phys. Rev*. **79** 12 (2009) 125414.