

## بررسی خواص اپتیکی و هدایت گرمایی نانوتیوب‌های کربن آلاییده با نیتروژن در حضور میدان الکتریکی

سمیه بهزاد<sup>۱</sup> و رعد چگل<sup>۲</sup>

۱. دانشکده فیزیک مهندسی، دانشگاه صنعتی کرمانشاه، کرمانشاه

۲. گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ملایر، ملایر

(دریافت مقاله: ۱۳۹۶/۰۱/۱۸؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۷/۰۲/۱۹)

### چکیده

در این مقاله، خواص اپتیکی و ظرفیت گرمایی نانوتیوب‌های کربنی آلاییده با اتم نیتروژن در حضور میدان الکتریکی خارجی، با استفاده از روش تابع گرین در تقریب تنگ بست بررسی شده است. افزودن ناخالصی و اعمال میدان‌های خارجی باعث ایجاد تغییرات در چگالی حالت‌ها، خواص اپتیکی، رسانندگی الکتریکی و هدایت گرمایی نانوتیوب‌های کربنی می‌شود. گاف انرژی با افزایش اندازه میدان الکتریکی کاهش یافته و به صفر می‌رسد و این اثرات در نانوتیوب‌های با شعاع بزرگ‌تر بیشتر است. تعداد و انرژی قله‌ها در طیف چگالی حالت‌ها و طیف اپتیکی به مقدار میدان الکتریکی و درصد ناخالصی بستگی دارد. در این دسته از نانوتیوب‌ها، رسانندگی الکتریکی و هدایت گرمایی با دما افزایش یافته و پس از رسیدن به مقدار بیشینه مجدداً کاهش می‌یابد. در حضور میدان، رفتار نانوتیوب‌های خالص و آلاییده متفاوت است. در محدوده دمایی بزرگ، با افزایش درصد ناخالصی و افزایش شدت میدان، مقدار پارامترهای محاسبه شده برای نانوتیوب‌های خالص و آلاییده کاهش می‌یابد.

واژه‌های کلیدی: نانوتیوب، تقریب تنگ بست، خواص اپتیکی، هدایت گرمایی، ناخالصی نیتروژن

### ۱. مقدمه

زیگزاگ یا کایرال باشند. نانوتیوب‌های تک دیواره با دو عدد صحیح  $(n, m)$  مشخص می‌شوند که در حالت‌های  $m=0$  و  $n=m$  به ترتیب شکل‌های زیگزاگ و آرمچیر را نشان می‌دهند و برای سایر مقادیر شکل کایرال را می‌سازند [۱]. نانوتیوب‌های کربنی در حالتی که  $|n-m|$  مضرب صحیحی از ۳ باشد فلز و برای سایر مقادیر نیم‌رسانا می‌باشد [۲]. با استفاده از مدل تنگ بست، خواص الکتریکی و اپتیکی گرافن بررسی شده و تابع تحلیلی برای ساختار نواری آن به دست

مقاله‌های بسیاری، خواص الکتریکی، اپتیکی و مکانیکی نانوتیوب‌های کربنی را به صورت تئوری و تجربی مورد بررسی قرار داده‌اند و با توجه به خواص منحصر به فرد آنها، کاربردهای فراوانی را در صنعت الکترونیک پیش‌بینی کرده‌اند. نانوتیوب‌ها، سیستم‌های استوانه‌ای تک بعدی هستند که از پیچش صفحه گرافنی ساخته می‌شوند و با توجه به راستای محور پیچش، می‌توانند به شکل‌های آرمچیر،

## ۲. روش محاسبات

برای به دست آوردن چگالی حالت‌های نانوتیوب کربن آلاییده شده در حضور میدان الکتریکی، سلول واحد نانوتیوب را به صورت استوانه‌ای به ارتفاع بردار انتقال ( $T_0$ ) و متشکل از تمام اتم‌های تشکیل دهنده نانوتیوب در نظر می‌گیریم [۲۷]. هر سلول واحد نانوتیوب ( $n, 0$ ) زیگزاگ شامل دو دسته اتم مشابه  $A$  و  $B$  با تعداد برابر  $2n$  می‌باشد. در مدل تنگ بست و در تقریب نزدیک‌ترین همسایه، هامیلتونین سیستم به صورت زیر نشان داده می‌شود [۲۱]:

$$[H]^{(\alpha_p, \beta_q)} = H_\alpha + H_\beta, \quad (1)$$

$$H_\alpha = \sum_i \Delta_{\alpha_p}^i (F) c_{(\alpha_p, i)}^+ c_{(\beta_q, i)},$$

$$H_\beta = \sum_{i,j} \sum_{p,q} t_{ij}^{(\alpha_p, \beta_q)} c_{(\alpha_p, i)}^+ c_{(\beta_q, j)},$$

که  $\alpha$  و  $\beta$  نشان دهنده اتم‌های کربن نوع  $A$  و  $B$ ،  $(\alpha_p, i)$  نشان دهنده  $p$ امین اتم از جنس  $\alpha$  در سایت  $\alpha$ ام،  $c_{(\alpha_p, i)}^+$  و  $c_{(\beta_q, i)}$  عملگرهای خلق و نابودی الکترون و  $t_{ij}^{(\alpha_p, \beta_q)}$  انتگرال پرش به نزدیک‌ترین همسایه‌ها می‌باشد. انرژی جایگاهی  $\Delta_i(\alpha_p, F)$  برابر با حاصل جمع انرژی جایگاهی در غیاب  $[\Delta_i^{(1)}(\alpha_p)]$  و حضور  $[\Delta_i^{(2)}(\alpha_p, F)]$  میدان الکتریکی برای اتم  $\alpha_p$  در سایت  $\alpha$ ام است. در کربن نانوتیوب با حضور ناخالصی نیتروژن، مقدار عددی انتگرال پرش برای نزدیک‌ترین همسایه‌ها به ترتیب برابر با  $-3$  و  $-3/14$  برای کربن-کربن و نیتروژن-کربن در نظر گرفته شده است [۲۸]. همچنین در غیاب میدان الکتریکی، انرژی جایگاهی  $\Delta_i^{(1)}$  اتم نیتروژن و کربن به ترتیب  $-2/5$  و  $0$  انتخاب شده است [۲۸ و ۲۹]. با استفاده از تبدیل فوریه، هامیلتونین ( $n, 0$ ) کربن نانوتیوب زیگزاگ، به صورت ماتریس  $4n \times 4n$  خواهد شد. با قطری کردن ماتریس هامیلتونین می‌توان ساختار نواری  $E^{c,v}(m, k, F)$  را به دست آورد که تابعی از  $m$  شماره ترازها،  $k$  بردار موج در منطقه اول بریلوئن و  $F$  اندازه میدان الکتریکی است. اندیس  $(v)$  حالت‌های اشغال نشده باند رسانش (اشغال شده باند ظرفیت) را نشان می‌دهد. با استفاده از تبدیل فوریه، مؤلفه‌های

آمده است [۳]. با استفاده از مدل تنگ بست و با اعمال شرایط دوره‌ای متناسب با راستای پیچش نانوتیوب، می‌توان خواص الکتریکی نانوتیوب‌ها را به دست آورد [۴]. در نهایت با محاسبه عبارات مربوط به انتقالات مجاز ناشی از تابع دوقطبی الکتریکی، می‌توان تابع جذب اپتیکی را برای نانوتیوب‌ها محاسبه کرد [۵ و ۶]. با توجه به پایدار بودن ساختار نانوتیوب‌های کربنی در حضور تزریق نیتروژن، در مطالعه حاضر اثرات جذب اتم نیتروژن را در این ساختارها بررسی کنیم [۷-۹]. در مطالعات متعددی که با روش تابعی چگالی انجام شده است، اثرات جذب گازهایی مانند  $CO_2$  و  $CO$  بر روی نانوتیوب‌های کربنی بررسی شده است [۸، ۱۰ و ۱۱]. همچنین خواص اپتیکی و رسانندگی نانوتیوب‌های کربنی در حضور ناخالصی نیتروژن مورد مطالعه قرار گرفته است [۱۲-۱۶]. برای افزایش کاربرد صنعتی نانوتیوب‌ها، می‌توان با اعمال میدان الکتریکی خارجی و تزریق ناخالصی، خصوصیات الکترو-اپتیکی آنها را تغییر داده و تحت کنترل در آورد [۱۲، ۱۷-۲۰]. در این زمینه می‌توان به اثراتی مانند گذار فاز فلز به نیم‌رسانا (و بالعکس) کربن نانوتیوب‌ها و برن نیتريد نانوتیوب‌ها اشاره کرد که باعث ایجاد تغییرات عمده‌ای در خواص الکتریکی و اپتیکی می‌شود [۱۶ و ۲۱-۲۶]

در این مطالعه، برای بررسی اثرات تزریق ناخالصی نیتروژن در نانوتیوب کربن، تمام اتم‌های نانوتیوب کربن به صورت سلول واحد در نظر گرفته شده و اتم‌های ناخالصی مستقیماً جایگزین شده‌اند. این شیوه در مقالات مختلفی مورد استفاده قرار گرفته است [۱۲ و ۲۱]. پس از ساختن ساختار آلاییده شده با اتم نیتروژن، هامیلتونین سیستم محاسبه شده و با قطری کردن آن، چگالی حالت‌ها، طیف جذب اپتیکی، رسانندگی الکتریکی و هدایت گرمایی به دست می‌آید. در ادامه با تزریق درصدهای مختلف ناخالصی و اعمال میدان الکتریکی خارجی بر نانوتیوب‌هایی با شعاع‌های مختلف، وابستگی این کمیت‌ها نسبت به همدیگر بررسی شده است.

$$L_{ij}^{\mu\nu}(T) = \frac{\sigma_e}{e^2} \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^{i+j-2} \left[ \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right] d\varepsilon \quad (۶)$$

$$\int_{FBZ} Tr[\hat{v}_\mu \hat{A}(k, \varepsilon) \hat{v}_\nu \hat{A}(k, \varepsilon)] dk,$$

ثابت  $\sigma_e = e^2 / h$  واحد رسانندگی الکتریکی است. در بخش بعد، نتایج عددی برای بررسی چگالی حالت‌ها، تابع جذب اپتیکی و رسانش و هدایت گرمایی برای نانوتیوب‌های زیگزاگ کربنی در حضور میدان الکتریکی خارجی و ناخالصی نیتروژن مورد بررسی قرار می‌گیرد.

### ۳. خواص الکتریکی و اپتیکی

در این مقاله، نانوتیوب‌های (n,0) زیگزاگ برای مطالعه انتخاب شده‌اند که در حالت خالص، دارای ۴n اتم کربن هستند [C<sub>2n</sub>-NT]. اگر تعداد m اتم ناخالصی از نوع نیتروژن در ساختار نانوتیوب خالص وارد شود، ساختار جدید به صورت C<sub>2n-m</sub>N<sub>m</sub>-NT نشان داده می‌شود.

شکل ۱ ساختار نانوتیوب کربن (۰, ۱۶) [C<sub>۶۴</sub>-NT] را در حضور ناخالصی‌های متفاوت نشان می‌دهد. این نانوتیوب در حالت خالص دارای ۶۴ اتم کربن است و ساختارهای متفاوت آلیپده، با جایگزین کردن اتم‌های کربن با نیتروژن در موقعیت‌های مختلف ساخته شده‌اند. چگالی حالت‌ها برای نانوتیوب‌های خالص C<sub>۶۴</sub>-NT و C<sub>۸۰</sub>-NT در حضور میدان‌های الکتریکی متفاوت و ناخالصی‌های مختلف، در شکل‌های ۱ و ۲ نشان داده شده است. چگالی حالت‌های نانوتیوب خالص C<sub>۶۴</sub>-NT، در بازه انرژی  $|E| < 1.5 eV$  دارای سه قله بوده که به طور متقارن در دو طرف تراز فرمی ( $E_F = 0$ ) قرار دارند. قله اول باندهای رسانش و ظرفیت در انرژی در حدود  $\pm 0.33 eV$  قرار دارند. با اعمال میدان الکتریکی، تغییراتی در طیف چگالی حالت‌ها رخ می‌دهد که ناشی از وابستگی ساختار نواری نانوتیوب به میدان الکتریکی است. به طور مثال، در میدان الکتریکی  $F = 0.15 eV/\text{\AA}$ ، شدت اولین قله واقع در باندهای رسانش و ظرفیت افزایش می‌یابد زیرا در این میدان الکتریکی، بالاترین تراز باند ظرفیت و پایین‌ترین تراز باند رسانش در اطراف نقطه بریلوئن  $\Gamma$ ، وابستگی خود را نسبت به

تابع گرین به صورت زیر به دست می‌آیند [۳۰]:

$$G_{ij}(E) = \sum_k e^{ik \cdot r_{ij}} [EI - \zeta_k]^{-1}, \quad (۲)$$

که ماتریس  $k$  تبدیل فوریه ماتریس هامیلتونین است.

با حل عددی رابطه فوق، چگالی حالت‌ها از قسمت موهومی ماتریس گرین به دست خواهد آمد [۳۰]. اندازه گاف انرژی از فاصله بین اولین قله باند رسانش و اولین قله باند ظرفیت در تابع چگالی حالت‌ها محاسبه می‌شود.

در ادامه برای بررسی رسانش الکتریکی سیستم‌های مورد مطالعه، از رابطه رسانندگی کوبو- گرینوود بر حسب تابع طیفی استفاده می‌کنیم [۳۱] که بر آن اساس رسانندگی جریان مستقیم  $\sigma_{\mu\nu}(T)$  از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۳۲]:

$$\sigma_{\mu\nu}(T) = \frac{\hbar \sigma_e}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right] d\varepsilon \quad (۳)$$

$$\int_{FBZ} Tr[\hat{v}_\mu \hat{A}(k, \varepsilon) \hat{v}_\nu \hat{A}(k, \varepsilon)] dk,$$

که  $f(\varepsilon)$  تابع توزیع فرمی دیراک،  $\hat{v}_\mu$  سرعت الکترون در جهت  $\hat{x}_\mu$ ،  $\omega$  بسامد نور فرودی و  $T$  دمای سیستم است. انتگرال  $dk$  پیرامون تمام منطقه اول بریلوئن محاسبه می‌شود. مؤلفه‌های ماتریسی  $\hat{v}_\mu$  در فضای  $k$  و بر اساس ساختار باندهای به شکل  $E_i = \partial_{k_\mu} \hat{v}_\mu^{ii} = \partial_{k_\mu} E_i(k)$  محاسبه می‌شوند که در آن  $E_i$  نشان دهنده آمین مقدار ویژه ماتریس هامیلتونین است [۳۳]. تابع طیفی بر حسب تابع گرین تاخیری قابل بیان است و اطلاعاتی درباره حالت‌های مجاز الکترونی را داده و رد آن، چگالی حالت سیستم را می‌دهد [۳۴]:

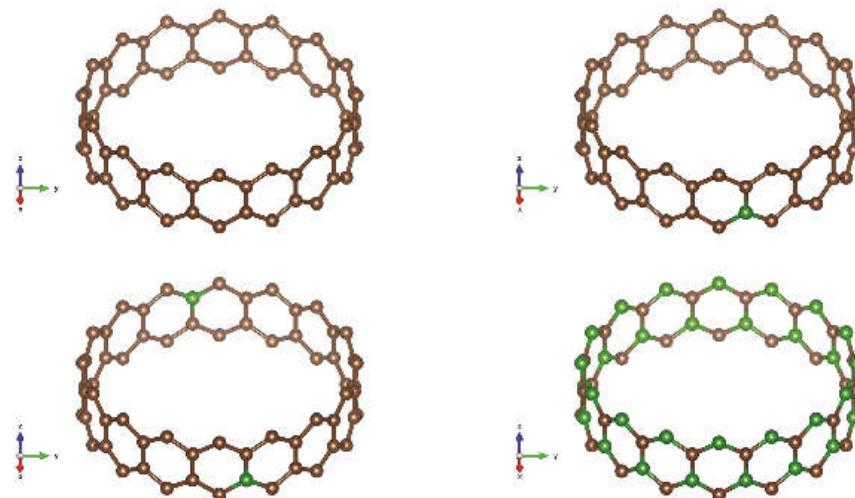
$$[\hat{A}(k, \varepsilon)]^{ii} = \gamma \pi \delta(\varepsilon - E_i(k)), \quad (۴)$$

$$\hat{A}(k, \varepsilon) = -2 \text{Im} \hat{G}^R(k, \varepsilon),$$

در ادامه، ضریب هدایت گرمایی از رابطه زیر قابل محاسبه است [۳۵]:

$$\kappa_{\mu\nu}(T) = \frac{k_B^2}{T} \left[ L_{\gamma\gamma}^{\mu\nu}(T) - \frac{L_{\gamma\gamma}^{\mu\nu}(T) L_{\gamma\gamma}^{\mu\nu}(T)}{L_{\gamma\gamma}^{\mu\nu}(T)} \right], \quad (۵)$$

که ضرایب مورد نیاز برای محاسبه تانسور  $\kappa_{\mu\nu}$  به صورت زیر به دست می‌آیند:



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) ساختار شبکه نانوتیوب (۱۶، ۰) زیگزاگ کربنی در غیاب ناخالصی و در حضور ناخالصی نیتروژن.

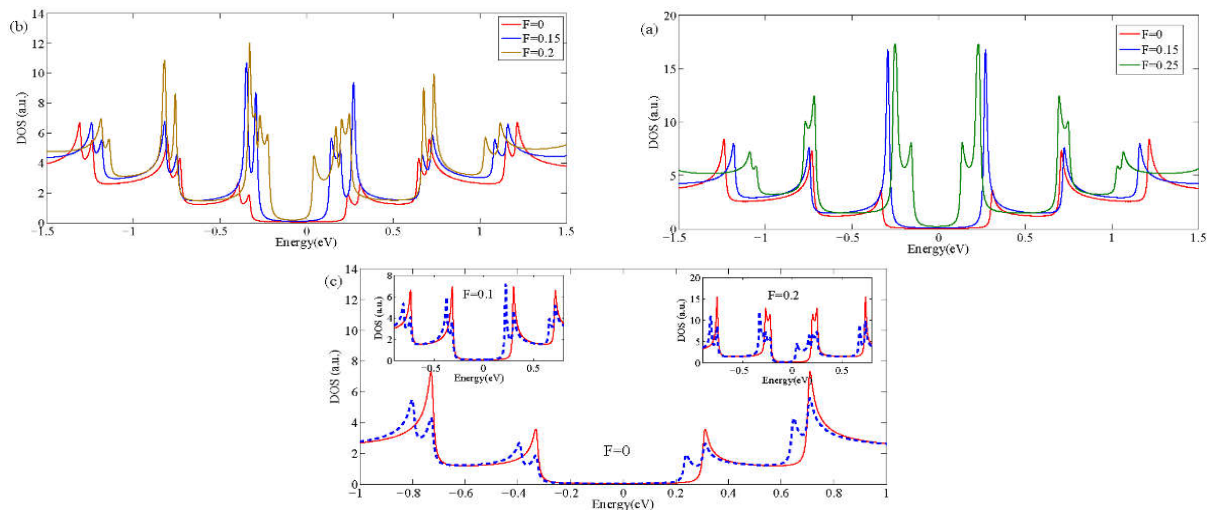
ایجاد تفاوت‌هایی در نزدیکی انرژی فرمی برای دو حالت خالص و آلاینده می‌شود به طوری که برخلاف حالت خالص، تقارن طیف چگالی حالت‌ها در دو سوی تراز فرمی برای حالت آلاینده  $C_{63}N_1-NT$  از بین می‌رود.

با افزایش تعداد اتم‌های ناخالصی نیتروژن تا ۲۵ و ۵۰ درصد، نانوتیوب‌های  $NC_3$  ( $C_{71}N_1-NT$ ) و  $NC$  ( $C_{71}N_{21}-NT$ ) ایجاد می‌شوند که در این حالت از نمایش نوشتاری  $Z_n-NC_rNT$  و  $Z_n-NCNT$  استفاده شده است. در شکل‌های ۳(a-b) چگالی حالت‌های (DOS) این نانوتیوب‌ها در حضور میدان الکتریکی نشان داده شده است. در غیاب میدان، این نانوتیوب‌ها غیرسانا بوده و دارای گاف انرژی مستقیم هستند. تمام قله‌ها در طیف چگالی حالت‌های این ساختارها، ناشی از ترازهای دارای تبهگنی دوگانه هستند.

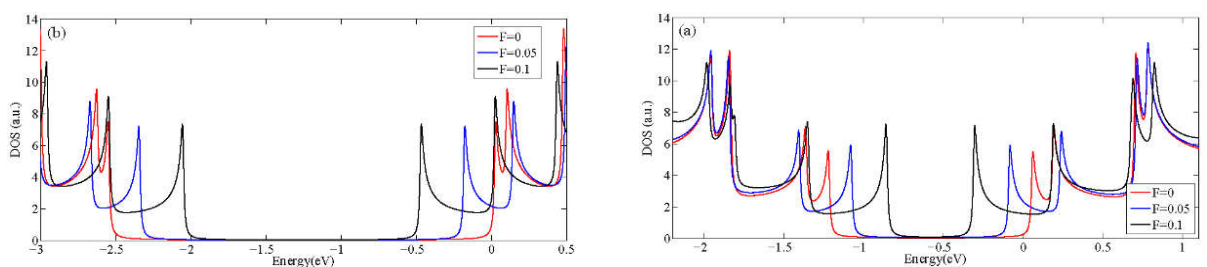
همان‌طور که در شکل‌های ۳(a-b) نشان داده شده است، اعمال میدان الکتریکی با شدت  $F < 0.1 \text{ eV/\AA}$ ، گاف انرژی را کاهش داده و فاصله بین قله‌های متوالی در طیف چگالی حالت‌ها را افزایش می‌دهد اما باعث شکافتگی این قله‌ها نمی‌شود. لازم به ذکر است که اعمال میدان با شدت دلخواه، باعث شکافتگی قله‌ها در انرژی‌های دورتر از سطح فرمی می‌شود. با مقایسه بین دو نانوتیوب فوق می‌توان دید که در میدان‌هایی با شدت یکسان، حساسیت نانوتیوب  $NC_3$  بیشتر از نانوتیوب‌های  $NC$  است.

شکل ۴ تابع JDOS نانوتیوب کربن (۰، ۱۶) در حالت خالص

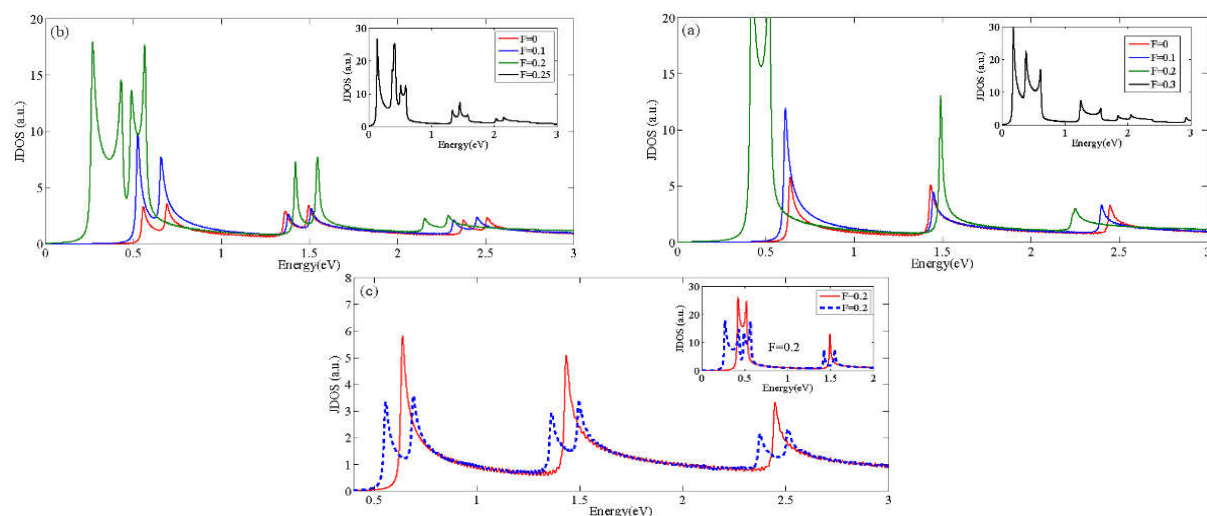
از دست می‌دهند (نسبت به  $k$  مسطح می‌شوند). افزایش میدان الکتریکی تا  $F = 0.25 \text{ eV/\AA}$ ، باعث شکافتگی قله‌ها و کاهش ملموس گاف انرژی می‌شود. از بین رفتن تبهگنی دوگانه ترازهای انرژی در ساختار نواری، عامل شکافتگی قله‌ها است. همان‌طور که در شکل ۲(b) برای  $C_{63}N_1-NT$  نشان داده شده است، در غیاب میدان الکتریکی با تزریق یک اتم نیتروژن، تعدادی از قله‌های طیف چگالی حالت‌ها شکافته شده و گاف انرژی برابر با مقدار  $0.57 \text{ eV}$  می‌شود. در این حالت با توجه به انرژی جایگاهی اتم نیتروژن نسبت به اتم کربن، یک قله در انرژی بالاتر از تراز فرمی در باند رسانش شکل می‌گیرد. در این حالت، با اعمال میدان الکتریکی  $0.15 \text{ eV/\AA}$ ، تقارن نزدیک‌ترین قله‌های واقع در اطراف تراز فرمی به هم خورده و شدت آنها افزایش می‌یابد. در این میدان، سایر قله‌ها جابه‌جایی ناچیزی را نشان می‌دهند. هنگامی که شدت میدان الکتریکی افزایش یافته و به مقدار  $0.25 \text{ eV/\AA}$  می‌رسد، تغییرات در اطراف تراز فرمی بیشتر از سایر نواحی خواهد شد (شکل ۲(b)). شکل ۲(c) اثرات میدان الکتریکی را در نانوتیوب‌های خالص و آلاینده  $C_{63}N_1-NT$  و  $C_{63}NT$  نشان می‌دهد. همان‌طور که مشخص است در غیاب میدان الکتریکی، تزریق نیتروژن باعث شکافتگی قله‌ها و ایجاد یک قله در باند رسانش در انرژی  $0.24 \text{ eV}$  می‌شود که با مطالعات قبلی با استفاده از روش‌های چگالی تابعی در توافق است [۱۶]. اعمال میدان باعث



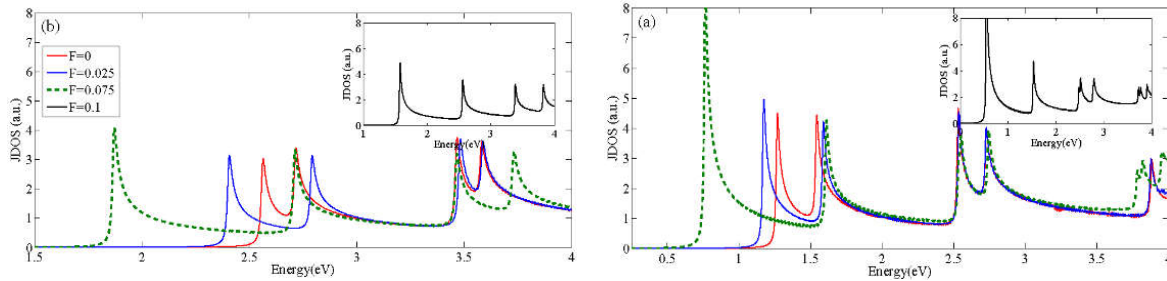
شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) چگالی حالت‌ها برای نانوتیوب  $C_{64}$ -NT در حالت‌های (a) خالص، (b) با یک ناخالصی نیتروژن و (c) مقایسه دو حالت در میدان‌های الکتریکی متفاوت.



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) چگالی حالت‌ها برای نانوتیوب‌های  $ZrO$ -NC-NT (a) و  $ZrO$ -NC-NT (b) در میدان‌های الکتریکی متفاوت.



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تابع JDOS برای نانوتیوب  $C_{64}$ -NT در حالت‌های (a) خالص، (b) با یک ناخالصی نیتروژن و (c) مقایسه دو حالت در میدان‌های الکتریکی متفاوت.



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تابع JDOS برای نانوتیوب‌های (a)  $ZrO-NC-NT$  و (b)  $ZrO-NC-NT$  در میدان‌های الکتریکی متفاوت.

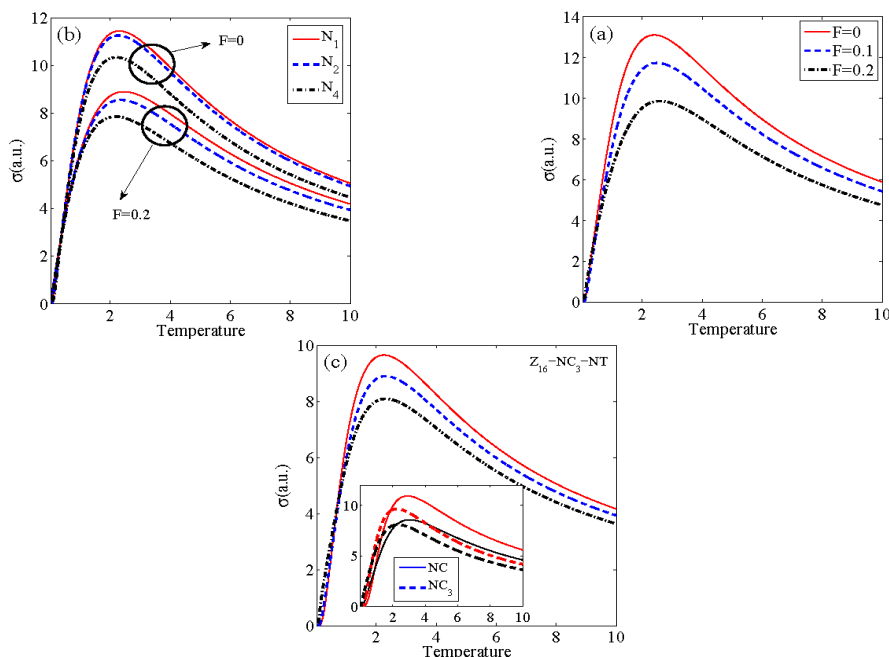
میدان الکتریکی ضعیف با شدت  $0.25 \text{ eV}/\text{\AA}$  باعث افزایش فاصله دو قله اول تابع JDOS می‌شود و تأثیری بر روی قله‌های ناحیه انرژی‌های بالاتر ندارد. افزایش شدت میدان تا  $1 \text{ eV}/\text{\AA}$  باعث شکافتگی قله‌های در بازه انرژی  $E > 2.5 \text{ eV}$  شده، اما در بازه انرژی  $E < 2 \text{ eV}$  باعث افزایش فاصله بین قله‌های همسایه می‌شود به طوری که یک قله در انرژی  $0.53 \text{ eV}$  قرار می‌گیرد که ناشی از کاهش گاف انرژی نواری در این نانوتیوب است. رفتار نانوتیوب  $ZrO-NC-NT$  در حضور میدان الکتریکی مشابه با نانوتیوب  $ZrO-NC-NT$  است با این تفاوت که برای جابه‌جا شدن قله‌های طیف JDOS شدت میدان‌های متفاوتی نیاز است. در غیاب میدان الکتریکی، در نانوتیوب  $ZrO-NC-NT$  قله اول در انرژی  $2.56 \text{ eV}$  قرار گرفته و با اعمال میدان‌های الکتریکی با شدت  $0.75 \text{ eV}/\text{\AA}$  و  $1 \text{ eV}/\text{\AA}$  مکان این قله به انرژی‌های  $1.87 \text{ eV}$  و  $1.55 \text{ eV}$  جابه‌جا می‌شود. مهم‌ترین مشخصه تأثیر میدان الکتریکی بر این نانوتیوب‌ها، تنظیم گاف انرژی است به طوری که می‌توان با اعمال میدان مناسب، مکان قله‌ها را در بازه‌های انرژی دلخواه قرار داد. در شکل ۴، رفتار گاف انرژی بر حسب میدان الکتریکی برای نانوتیوب‌های مختلف با درصد ناخالصی‌های متفاوت نشان داده شده است.

همان‌طور که در شکل (a) ۶ نشان داده شده است، نانوتیوب خالص ( $0.16$ ) در غیاب ناخالصی و میدان الکتریکی، انرژی گاف  $0.63 \text{ eV}$  دارد. با اعمال میدان الکتریکی اندازه گاف انرژی کاهش یافته به طوری که در حضور میدان الکتریکی با شدت  $0.13 \text{ eV}/\text{\AA}$ ، گاف انرژی با شیب ملایم و تقریباً به اندازه  $0.05 \text{ eV}$  کاهش می‌یابد. اعمال میدان‌های قوی‌تر باعث کاهش گاف انرژی به صورت خطی شده به طوری که در میدان الکتریکی

و تزریق شده را نشان می‌دهد. مشابه با طیف DOS، تأثیر میدان الکتریکی باعث شکافتگی قله‌های تابع JDOS می‌شود به طوری که هر قله (در غیاب میدان الکتریکی) به دو قله مجزا در حضور میدان الکتریکی قوی شکافته می‌شود. نانوتیوب خالص  $C_{60}-NT$  دارای سه قله در انرژی‌های  $0.66$ ،  $1.44$  و  $2.45 \text{ eV}$  است که این قله‌ها ناشی از انتقالات بین ترازهای رسانش و ظرفیت هستند و انرژی قله اول برابر با گاف انرژی این نانوتیوب است.

با اعمال میدان الکتریکی  $0.1 \text{ eV}/\text{\AA}$ ، شدت قله اول افزایش یافته اما مکان آن تغییر چندانی نمی‌کند. شدت این میدان برای شکافتگی قله‌های طیف JDOS کافی نیست. با افزایش شدت میدان الکتریکی تا  $0.2 \text{ eV}/\text{\AA}$ ، با توجه به از بین رفتن تهبگنی ترازها در ساختار نواری، قله اول دچار شکافتگی شده و شدت آن نیز افزایش می‌یابد. در میدان الکتریکی بسیار قوی با شدت  $0.3 \text{ eV}/\text{\AA}$ ، تعداد قله‌ها افزایش یافته و اندازه شکافتگی آنها بیشتر می‌شود. با وارد کردن ناخالصی نیتروژن در ساختار نانوتیوب، هر قله در طیف تابع JDOS به دو قله شکافته می‌شود (شکل (c) ۴) که ناشی از برداشته شدن تهبگنی در ساختار نواری است. با اعمال میدان‌های ضعیف شدت قله‌ها افزایش یافته و با اعمال میدان‌های قوی‌تر میزان شکافتگی و شدت قله‌ها زیاد شده و به طور ملموسی با نانوتیوب خالص متفاوت است. در طیف تابع JDOS اعمال میدان الکتریکی بر قله‌های در محدوده انرژی  $E < 1 \text{ eV}$  تأثیر بیشتری داشته و تعداد، شدت و فاصله بین آنها را افزایش می‌دهد.

در شکل ۵ تابع JDOS برای نانوتیوب‌های  $ZrO-NC-NT$  و  $ZrO-NC-NT$  نشان داده شده است. نانوتیوب  $ZrO-NC-NT$  هیچ قله‌ای در بازه انرژی  $E < 1 \text{ eV}$  ندارد (ناحیه گاف نواری). اعمال



شکل ۷. (رنگی در نسخه الکترونیکی) وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی (۱۶،۰) در حضور (a) میدان الکتریکی و (b) ناخالصی و میدان الکتریکی. (c) وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی نانوتیوب‌های  $Z_{16}\text{-NC}_3\text{-NT}$  و  $Z_{16}\text{-NC}$ -NT

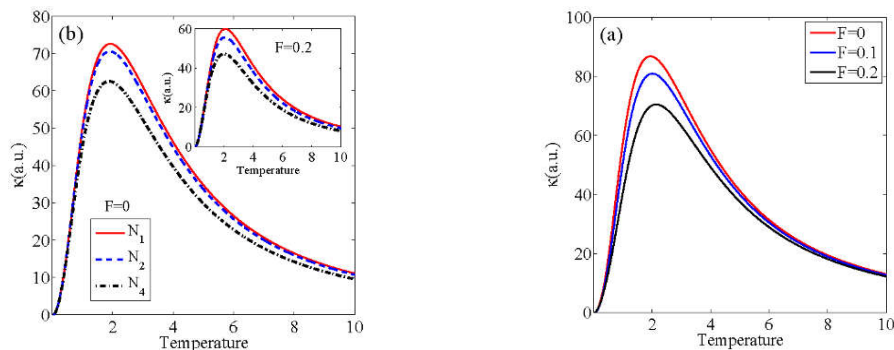
ناچیزی داشته سپس به صورت خطی به سمت صفر میل می‌کند. در غیاب میدان الکتریکی، با افزایش درصد ناخالصی‌ها، اندازه گاف انرژی افزایش یافته به طوری که سیستم‌هایی با ۲۵ و ۵۰ درصد ناخالصی، دارای بیشترین مقادیر گاف نواری هستند. در این سیستم‌ها نیز با اعمال میدان الکتریکی، مقدار گاف به صورت خطی کاهش یافته و در نهایت صفر می‌شود. با وجود ناخالصی، نانوتیوب‌های با شعاع بزرگ‌تر نیاز به میدان الکتریکی کوچک‌تری برای صفر شدن گاف انرژی دارند.

شکل ۷ رسانندگی الکتریکی نانوتیوب کربنی خالص و آلییده (۱۶،۰) در حضور میدان‌های الکتریکی متفاوت را نشان می‌دهد. در صفر کلون هیچ الکترون آزادی در باند رسانش سیستم خالص وجود نداشته و رسانندگی الکتریکی آن برابر با صفر است. با افزایش دما چگالی حامل‌های بار در باند رسانش زیاد شده و رسانندگی الکتریکی افزایش می‌یابد و به مقدار بیشینه می‌رسد. در دماهای خیلی بالا، سرعت سوق و تحرک پذیری حامل‌های بار به دلیل برخوردها کاهش یافته و باعث کاهش رسانندگی الکتریکی می‌شوند [۳۲]. با اعمال میدان در دمای ثابت، به دلیل افزایش

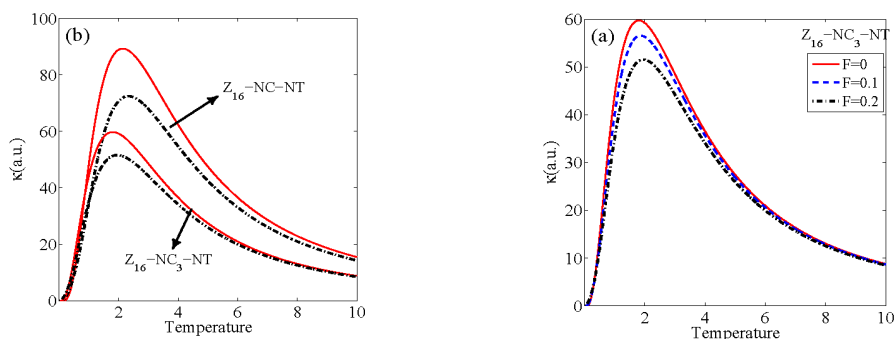
با شدت  $0.41 \text{ eV}/\text{\AA}$ ، گاف انرژی از بین رفته و گذار فاز نیم‌رسانا- فلز اتفاق می‌افتد. در غیاب میدان الکتریکی و در حضور ناخالصی نیتروژن، اندازه گاف انرژی تا  $0.53 \text{ eV}$  کاهش می‌یابد. با اعمال میدان الکتریکی بر سیستم آلییده با یک اتم نیتروژن، مشابه با نانوتیوب خالص، گاف انرژی در حضور میدان‌های ضعیف با شیب ملایم و در حضور میدان‌های قوی‌تر با شیب تند کاهش یافته تا در نهایت صفر شود.

با تغییر مکان ناخالصی نیتروژن نسبت به راستای میدان الکتریکی، رفتار گاف انرژی تغییر می‌کند که این تغییرات در میدان‌های با شدت بیشتر ملموس است (شکل ۶(a)). همان‌طور که برای نانوتیوب (۳۲،۲) نشان داده شده است با افزایش شعاع نانوتیوب، گاف انرژی بر حسب شدت میدان الکتریکی سریع‌تر کاهش می‌یابد.

همان‌طور که در شکل ۶(b) نشان داده شده است افزایش درصد ناخالصی اتم نیتروژن باعث بروز رفتارهای متفاوت با حالت خالص می‌شود. مشابه با سیستم آلییده با یک اتم ناخالصی نیتروژن، در سیستم با دو اتم ناخالصی، گاف انرژی ابتدا کاهش



شکل ۸. (رنگی در نسخه الکترونیکی) وابستگی دمایی هدایت گرمایی نانوتیوب (۱۶،۰) در حضور (a) میدان الکتریکی و (b) ناخالصی و میدان الکتریکی.



شکل ۹. (رنگی در نسخه الکترونیکی) وابستگی دمایی هدایت گرمایی  $Z_{16-NC_3-NT}$  در حضور (a) میدان الکتریکی و (b) مقایسه نانوتیوب‌های  $Z_{16-NC-NT}$  و  $Z_{16-NC_3-NT}$  در میدان‌های مختلف.

(۱۶،۰) در حضور میدان‌های الکتریکی متفاوت را نشان می‌دهد. مشابه با حالت رسانندگی الکتریکی، در دمای صفر کلومین، هدایت گرمایی برابر با صفر است و مقدار آن با دما افزایش می‌یابد تا به مقدار بیشینه خود برسد و در نهایت در محدوده دماهای خیلی بالا، اندازه هدایت گرمایی کاهش می‌یابد. با اعمال میدان الکتریکی در محدوده دمایی ثابت، به دلیل افزایش سرعت سوق و برخورد حامل‌های بار، هدایت گرمایی کاهش می‌یابد. با وارد کردن ناخالصی در ساختار نانوتیوب با توجه به این که ناخالصی باعث پراکندگی حامل‌های بار می‌شود، مقدار هدایت گرمایی کاهش می‌یابد. برای سیستم با ناخالصی بیشتر اندازه هدایت گرمایی در هر میدان و دمای دلخواه کمتر از سیستم با ناخالصی کمتر است (شکل ۸(b)).

همان طور که در شکل ۹(a) مشاهده می‌شود با افزایش ناخالصی تا ۲۵ درصد، مقدار هدایت گرمایی نسبت به حالت خالص کاهش می‌یابد و این رفتار کلی برای همه سیستم‌های مورد مطالعه مشابه

سرعت سوق و برخورد حامل‌های بار، رسانندگی الکتریکی کاهش می‌یابد. این رفتارها در حضور ناخالصی‌ها نیز به رخ می‌دهد.

در هر میدان الکتریکی دلخواه، با وارد کردن ناخالصی نیتروژن و افزایش درصد ناخالصی، مقدار رسانندگی الکتریکی کاهش می‌یابد چون که ناخالصی همانند یک مانع عمل کرده و باعث پراکندگی حامل‌های بار می‌شود [۳۳]. کاهش رسانندگی الکتریکی در حضور ناخالصی، در بازه دماهای بالا ملموس است (شکل ۷(a)). با افزایش درصد ناخالصی، مقدار رسانندگی الکتریکی کاهش یافته به طوری که در هر حضور میدان الکتریکی دلخواه و در بازه دمایی دلخواه، رسانندگی الکتریکی برای سیستم خالص بزرگ‌تر از حالت مشابه در حضور ناخالصی است (شکل ۷(c)). در نهایت رسانندگی الکتریکی نانوتیوب NC در حالت مشابه بیشتر از نانوتیوب  $NC_3$  است و دلیل آن تقارن موجود در ساختار نانوتیوب NC است.

شکل ۸ هدایت گرمایی نانوتیوب کربنی خالص و آلیسده



بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که وارد کردن ناخالصی در ساختار کربن نانوتیوب، باعث شکافتگی قله‌ها در طیف چگالی حالت‌ها شده و این تغییرات مستقیماً در خواص اپتیکی نانوتیوب منعکس می‌شود. مشخصه‌ترین اثر میدان الکتریکی بر ساختارهای نانوتیوب خالص و آلاییده، تنظیم گاف انرژی است که مقادیر آن برای حالت‌های خالص و آلاییده شده متفاوت است. در نهایت رسانندگی الکتریکی و هدایت گرمایی برای نانوتیوب‌های کربن خالص و آلاییده بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهند که میدان الکتریکی و حضور ناخالصی باعث کاهش این پارامترها می‌شوند.

است و تنها تفاوت مشاهده شده در اندازه هدایت گرمایی و محل قلهٔ بیشینه آنها است. با مقایسهٔ نانوتیوب‌های NC و NC<sub>2</sub> می‌توان مشاهده کرد که هدایت گرمایی نانوتیوب‌های NC بیشتر از نانوتیوب‌ها NC<sub>2</sub> با شعاع مشابه است. با اعمال میدان الکتریکی دلخواه، شدت هدایت گرمایی برای هر دو حالت کاهش می‌یابد.

#### ۴. بحث و نتیجه‌گیری

در این مقاله خواص الکتریکی، اپتیکی و رسانندگی الکتریکی و هدایت گرمایی کربن نانوتیوب‌ها در حضور ناخالصی و میدان الکتریکی با استفاده از رهیافت تابع گرین و مدل تنگ بست مورد

#### مراجع

1. R Moradian, R Chegel, and S Behzad, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **42** (2010) 1850.
2. R Saito, M Fujita, G Dresselhaus, and M S Dresselhaus, *Applied Physics Letters* **60** (1992) 2204.
3. S Reich, J Maultzsch, C Thomsen, and P Ordejón, *Physical Review B* **66** (2002) 035412.
4. A Zarifi, T G Pedersen, *Physical Review B* **77** (2008) 085409.
5. A Zarifi, T G Pedersen, *Physical Review B* **80** (2009) 195422.
6. A Zarifi and T G Pedersen, *Physical Review B* **74** (2006) 155434.
7. S H Lim, R Li, W Ji, and J Lin, *Physical Review B* **76** (2007) 195406.
8. L Wirtz and A Rubio, *AIP Conference Proceedings*, **685** (2003) 402.
9. J Ye, Q Shao, X Wang, and T Wang, *Chemical Physics Letters* **646** (2016) 95.
10. T Koretsune, S Saito, *Physical Review B* **77** (2008) 165417.
11. R A Espejel-Morales, S López-Moreno, A G Calles, J L Morán-López, *European Physical Journal D* **67** (2013).
12. S Bao, J Zheng, G Yang, and J Chen, *Physica B: Condensed Matter* **404** (2009) 4090.
13. H S Ahn, K R Lee, D Y Kim, S Han, *Applied Physics Letters* **88** (2006).
14. J Wei, H Hu, H Zeng, Z Zhou, W Yang, P Peng, *Physica E Low-Dimensional Systems and Nanostructures* **40** (2008) 462.
15. H Mousavi and R Moradian, *Solid State Sciences*, **13** (2011) 1459.
16. P Ayala, R Arenal, M Rummeli, A Rubio, and T Pichler, *Carbon* **48** (2010) 575.
17. R Chegel and S Behzad, *Journal of Physics and Chemistry B* **11** (2007) 10450.
18. T H Cho, W S Su, T C Leung, W Ren, and C T Chan, *Physical Review B* **79** (2009) 235123.
19. Y R Chen and C I Weng, *Carbon* **45** (2007) 1636.
20. C Shao, J Xia, J Zhang, Q Shao, *Physica E Low-Dimensional Systems and Nanostructures* **59** (2014) 88.
21. R Chegel, *Physica B: Condensed Matter* **499** (2016) 1.
22. R Chegel, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **84** (2016) 223.
23. M Esrafil, H Behzadi, and A DFT, *Struct. Chem.* **24** (2013) 573.
24. S B Fagan, R Mota, A J R da Silva, and A Fazzio, *Nano Letters* **4** (2004) 975.
25. H Khalfoun, P Hermet, L Henrard, S B Latil, and N Codoping, *Physical Review B* **81** (2010) 193411.
26. M Terrones, P M Ajayan, F Banhart, X Blase, D L Carroll, J C Charlier, R Czerw, B Foley, N Grobert, R Kamalakaran, P Kohler-Redlich, x000Fc, M hle, T Seeger, and H Terrones, *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, **74** (2002) 355.
27. R Moradian, R Chegel, and S Behzad, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **43** (2010) 312.
28. A C M Carvalho, C G Bezerra, J A Lawlor, and M S *Journal of Physics: Condensed Matter* **26** (2014) 015303.
29. H Milani Moghaddam, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **42** (2009) 167.
30. M Rostam, M Yawar, and G Nader, *Journal of Physics: Condensed Matter* **20** (2008) 425211.
31. G G G P Parravicini, "Solid State Physics", Academic Press (2000).
32. A Feyzi and R Chegel, *The European Physical Journal B* **89** (2016) 193.

- Theory in Condensed Matter Physics: an introduction*, Oxford Univ. Press, Oxford, (2012).
35. A V Joura, D O Demchenko, and J K Freericks, *Physical Review B* **69** (2004) 165105.
33. H Mousavi and J Khodadadi, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures* **50**(2013) 11.
34. H Bruus and K Flensberg, “*Many-body Quantum*