نشریه علوم دانشگاه خوارزمی
جلد ۱۲، شماره ۴
تاریخ چاپ پاییز ۱۳۹۲

تأثیر نوع نانونوار زیگزاگ و دسته صندلی گرافن بر ضریب عبور و گاف انرژی

*حسن ربانی، آزاده مظلوم شهرکی؛ دانشگاه شهرکرد، دانشکده علوم

چکیده

در این مقاله با اتصال دو زنجیرهٔ اتمی یک‌نواخت به اتم‌های دو جای‌گاه متقابل نانونوارهای گرافن به بررسی رسانش الکترونی و گاف انرژی آن می‌پردازیم. محاسبات به‌کمک روش تابع گرین و رهیافت بستگی قوی در تقریب همسایهٔ اول انجام می‌شود. بررسی منحنی‌های رسانش بر حسب انرژی الکترون ورودی نشان می‌دهد که برای یک نانونوار زیگزاگ گرافن به عرض یک حلقهٔ بنزنی هیچ گافی در نوار انرژی سامانه وجود ندارد، در حالی‌که در مورد دسته صندلی همواره یک گاف حول انرژی فرمی مشاهده می‌شود که مقدار آن به اندازهٔ نانونوار بستگی دارد. در پایان از مقایسهٔ نتایج به‌دست آمده با پژوهش‌های قبلی، می‌توان نتیجه گرفت که رفتار رسانش الکترونی نانونوارهای گرافنی شدیداً به‌نحوهٔ اتصال الکترودها و کیفیت اتصال‌ها وابسته است.

مقدمه

گرافن ماده‌ای منحصربه‌فرد با پایهٔ کربنی و دانسیتهٔ اتمی بالاست. خواص غیرادی آن نظیر سختی و استحکام مکانیکی زیاد، رسانایی الکتریکی و حرارتی زیاد و قابل تنظیم از جمله خصوصیات عالی نوری و سطحی آن است که مورد توجه خاص محققان قرار گرفته است [۱]، [۲]، [۳]. با توجه به بزرگ بودن مسیر آزاد میانگین الکترون در گرافن که از مرتبهٔ میکرومتر است، گرافن گزینهٔ خوبی برای ساخت وسایل الکترونی است [۴]. پراکندگی انرژی دیراک در دو بعد نشان می‌دهد که گرافن نیمه‌رسانایی است که چگالی حالت‌های آن با رسیدن به انرژی فرمی، به‌طور خطی کم می‌شود. بنا بر این گرافن یک پل جدا کنندهٔ جهان نیمه‌رساناها- با یک گاف انرژی بین نوارهای ظرفیت و رسانش- و فلزات- چگالی حالت‌های الکترونی محدود در انرژی فرمی- است. گاف انرژی در یک نمونهٔ گرافنی می‌تواند به‌کمک ناخالصی یا محدود شدن اندازهٔ آن بزرگ شود [۵]، [۶]. با توجه به این ویژگی‌های غیرعادی، از گرافن می‌توان به‌عنوان ماده‌ای جدید در تحقیقات حوزه‌های الکترونیک، الکترومکانیک و شیمی یاد کرد [۷]، [۸]. از این‌رو درک و شناخت ویژگی‌های گرافن در گسترش و اصلاح کاربردهای آن سودمند است.

واژه‌های کلیدی: نانونوار، رسانش الکترونی، گاف انرژی، تابع گرین، بستگی قوی
دریافت ۹۱/۵/۴ پذیرش ۹۲/۴/۹
*نویسنده مسئول hasan.rabani@gmail.com

[Downloaded from isharat.khu.ac.ir on 2026-10-28]

در مقالات مختلفی رسانندگی گرافن با اندازه‌های محدود یا بی‌نهایت، بررسی شده است [۳]، [۹]. که البته این کمیت به نوع دست‌گردی لبه‌ها، بعد نانونوار گرافن مرکزی و جنس هادی‌های ورودی و خروجی الکترون وابسته است. در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت بستگی قوی در تقریب همسایهٔ اول به بررسی خواص ترابردی نانونوارهای گرافن که از دو جای‌گاه در سمت چپ و راست به دو زنجیرهٔ اتمی نیمه‌متناهی متصل شده است، می‌پردازیم، سپس وابستگی رسانش الکترونی سامانه را به طول و عرض نانونوار به‌دست می‌آوریم. بررسی مشابهی در منبع [۱۰] انجام شده است با این تفاوت که زنجیره‌های اتمی به چند جای‌گاه در سمت چپ و چند جای‌گاه در سمت راست از نانونوار گرافن متصل شده‌اند. در واقع ما در این مقاله با تغییر نحوهٔ اتصال هادی‌ها به نانونوار گرافن مرکزی، به‌بررسی اثر آن بر رسانندگی گرافن و تغییر رفتار تونل‌زنی الکترون می‌پردازیم. در بخش بعد فرمول‌بندی لازم برای محاسبات عددی را ارائه می‌کنیم، سپس در بخش نتایج با ارائهٔ نتیجهٔ محاسبات، به بررسی وابستگی ضریب عبور به اندازهٔ نانونوار پرداخته و پس از تحلیل نتایج به مقایسهٔ آن‌ها با نتایج تحقیقات انجام شده می‌پردازیم. در آخر نیز خلاصهٔ نتایج به‌دست آمده در این پژوهش را بیان می‌کنیم.

مبانی نظری

مانند شکل ۱، یک نانونوار گرافن که از دو جای‌گاه متقابل در سمت چپ و راست به دو زنجیرهٔ اتمی یک‌نواخت متصل شده است، در نظر می‌گیریم. هامیلتونی نانونوار مرکزی (C) منزوی در رهیافت بستگی قوی و با در نظر گرفتن تقریب همسایه اول بدین‌صورت نوشته می‌شود [۱۱]، [۱۲]:

$$H_C = \sum_{i=1}^{N}\left(\varepsilon_{\mathrm{C}}|i\rangle\langle i| + \beta_{\mathrm{CC}}\sum_{j}|i\rangle\langle j|\right) + h.c., \qquad (۱)$$

که در آن ε_{C} انرژی جای‌گاهی هر اتم کربن، β_{CC} انرژی پرش بین اتم‌های کربن مجاور و N تعداد اتم‌های کربن در نانونوار گرافن است. در این‌جا j شمارهٔ جای‌گاه نزدیک‌ترین همسایه‌های اتم iام است که حداکثر سه مقدار را اختیار می‌کند. هامیلتونی زنجیره فلزی چپ (راست) نیز به این شکل نوشته می‌شود:

$$H_{L(R)} = \sum_{i}\left(\varepsilon_{L(R)}|i\rangle\langle i| + \beta_{L(R)}|i\rangle\langle i+1|\right) + h.c., \qquad (۲)$$

که در آن $\varepsilon_{L(R)}$ انرژی جای‌گاهی اتم‌ها و $\beta_{L(R)}$ انرژی پرش بین همسای‌گان اول هستند. هم‌چنین در جمع‌ها مقدار i برای هادی چپ از مقدار $-\infty$ تا صفر و برای هادی راست از $N+1$ تا $+\infty$ تغییر می‌کند. هامیلتونی برهم‌کنش بین نانونوار گرافن با هادی سمت چپ و راست نیز به‌ترتیب با این رابطهٔ داده می‌شود:

$$\begin{aligned} H_{LC} &= H_{CL} = \beta_{CL}|0\rangle\langle 1| + h.c., \\ H_{RC} &= H_{CR} = \beta_{CR}|N+1\rangle\langle N| + h.c., \end{aligned} \qquad (۳)$$

که در آن 1 و N جای‌گاه‌هایی از نانونوار هستند که به‌ترتیب به زنجیره‌های چپ و راست متصل شده‌اند و $\beta_{CL(R)}$ انرژی پرش بین نانونوار گرافن و زنجیرهٔ چپ (راست) است. وارون تابع گرین نانونوار مرکزی در حضور هادی‌ها را می‌توان به این شکل به‌دست آورد:

[Downloaded from isharat.khu.ac.ir on 2026-10-28]

$$G_C^{-1} = G_{0C}^{-1} - H_{LC} G_L H_{CL} - H_{RC} G_R H_{CR}, \qquad (۴)$$

که در آن $G_{0C} = (\varepsilon - H_C)^{-1}$ و $G_{L(R)} = (\varepsilon - H_{L(R)})^{-1}$ به‌ترتیب توابع گرین نانونوار منزوی و هادی چپ (راست) هستند و ε انرژی الکترون ورودی است. در رابطهٔ (۴) جملات دوم و سوم به‌ترتیب خود انرژی‌های نانونوار در حضور هادی‌های سمت چپ و راست هستند. با توجه به نوار انرژی یک زنجیرهٔ خطی خود انرژی چپ (راست) به این شکل محاسبه می‌شود [۱۲]:

$$\Sigma_{L(R)} = \frac{\beta_{CL(CR)}^2}{\beta_{L(R)}} \exp(ik_{L(R)} a_{L(R)}), \qquad ; \qquad k_{L(R)} a_{L(R)} = \cos^{-1}\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_{L(R)}}{2\beta_{L(R)}}\right), \qquad (۵)$$

که در آن $k_{L(R)}$ عدد موج الکترون، $a_{L(R)}$ ثابت شبکه، $\varepsilon_{L(R)}$ انرژی جای‌گاهی اتم‌ها و $\beta_{L(R)}$ انرژی پرش بین اتم‌ها در زنجیرهٔ خطی چپ (راست) است. با محاسبهٔ ماتریس تابع گرین از رابطهٔ (۴)، ضریب عبور نانونوار گرافن متصل به دو زنجیرهٔ خطی از این رابطه محاسبه می‌شود [۱۱]:

$$T(\varepsilon) = 4\,\mathrm{Im}\Sigma_L\ \mathrm{Im}\Sigma_R \left|G_{C(1N)}\right|^2, \qquad (۶)$$

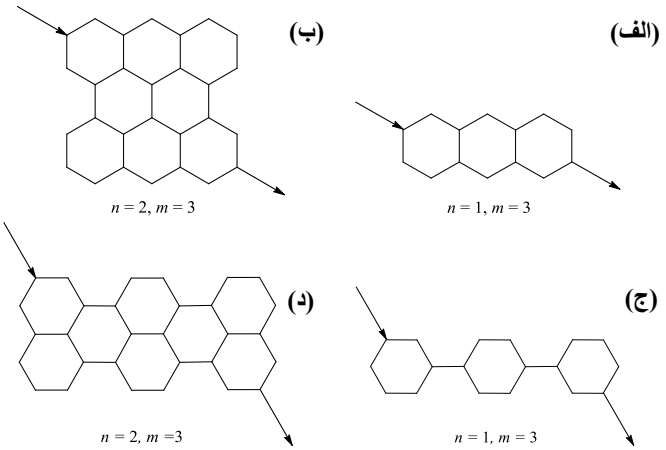
که در آن $G_{C(1N)}$ عنصر سطر اول و ستون Nام تابع گرین نانونوار متصل است. در بخش بعد بر پایهٔ این فرمول‌بندی نتایج محاسبات عددی در خصوص خواص ترابردی یک نانونوار متناهی متصل به دو زنجیرهٔ اتمی ساده را ارائه می‌کنیم و اثر اندازهٔ نانونوار را بر این خواص بررسی می‌کنیم.

نتایج و بحث

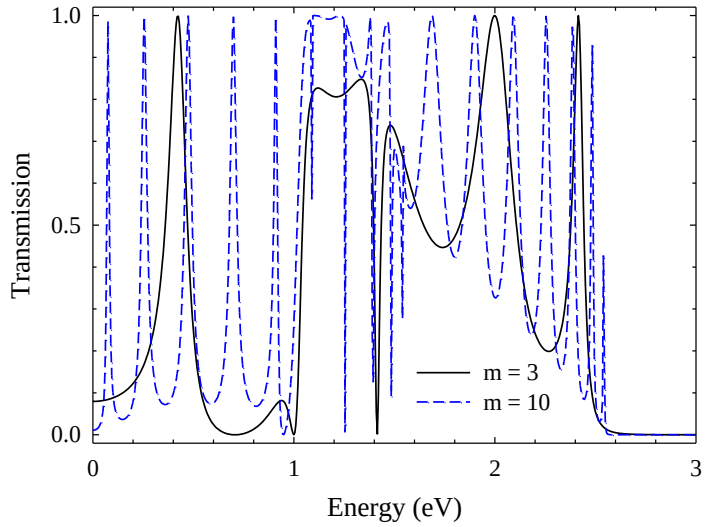
در این بخش نتایج عددی برای چند نانونوار گرافنی با اندازه‌های مختلف را ارائه می‌کنیم که از دو جای‌گاه متقابل در سمت چپ و راست به دو زنجیرهٔ خطی یک‌نواخت متصل شده‌اند (شکل ۱). همچنین در این مقاله، مقدار انرژی جای‌گاهی تمام اتم‌های کربن و اتم‌های زنجیره‌ها را برابر با صفر، ($\varepsilon_C = \varepsilon_{L(R)} = 0$) و انرژی‌های پرش بین اتم‌های کربن در نانونوار و بین اتم‌ها در هادی‌ها را به‌ترتیب برابر با $\beta_C = 1\mathrm{eV}$ و $\beta_{L(R)} = 2.5\mathrm{eV}$ انتخاب می‌کنیم. انرژی پرش اتصال بین هادی‌ها و نانونوار نیز برابر با $\beta_{CL(R)} = 1.2\mathrm{eV}$ در نظر گرفته شده است. با توجه به این مقادیر انتخاب شده، بازهٔ مجاز انرژی نانونوار بین $-2.5\mathrm{eV}$ و $2.5\mathrm{eV}$ خواهد بود، در حالی‌که بازهٔ مجاز برای هادی‌ها بین $-5\mathrm{eV}$ و $5\mathrm{eV}$ است [۱۲]. به‌دلیل وجود تقارن در طیف رسانش نسبت به انرژی صفر، اغلب نمودارها در ناحیهٔ مثبت رسم شده است. در حالی‌که برای گرافنی که از چند جای‌گاه در سمت چپ و چند جای‌گاه در سمت راست به دو زنجیرهٔ فلزی متصل است، فقط در دستگردی دستهٔ صندلی نمودار ضریب عبور حول انرژی صفر متقارن است [۱۳]؛ و برای لبه‌ای با دستگردی زیگزاگ در صورت وجود اتصال‌های چندگانه بین هادی‌های ورودی و خروجی با نانونوار، هم نمودار ضریب عبور و هم گاف ایجاد شده (برای گرافنی با اندازهٔ بزرگ) حول انرژی صفر نامتقارن هستند [۱۰]. حال به‌کمک روابط ذکر شده در

[Downloaded from isharat.khu.ac.ir on 2026-10-28]

بخش قبل، رسانش یک نانونوار شامل m حلقه در طول و n ردیفِ m حلقه‌ای در عرض (شکل ۱ را ببینید) را برای دو مورد زیگزاگ و دسته صندلی بررسی می‌کنیم.



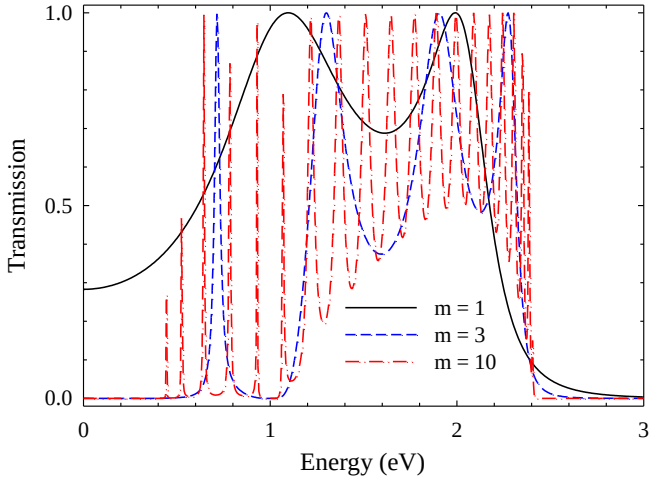
شکل ۱. چند مورد از نانونوارهای گرافن که از یک جای‌گاه در سمت چپ و از جای‌گاه متقابل در سمت راست به دو زنجیرهٔ اتمی متصل شده‌اند. الف) و ب) موارد زیگزاگ و ج) و د) موارد دسته صندلی را نشان می‌دهند. m و n به‌ترتیب نشان‌دهندهٔ طول و عرض نانونوار هستند



شکل ۲. نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی الکترون ورودی برای دو نانونوار زیگزاگ با عرض $n=1$ و طول‌های $m=3,10$

وابستگی ضریب عبور به‌طول نوار در نمودارهای ضریب عبور برای دو نانونوار زیگزاگ با عرض‌های یکسان $(n=1)$ و طول‌های متفاوت $(m=3,10)$ بر حسب انرژی الکترون ورودی در شکل ۲ رسم شده است. همچنین وابستگی ضریب عبور به‌طول نانونوار برای مورد دستهٔ صندلی نیز در شکل ۳ آمده است. چنان‌که در این شکل‌ها مشاهده می‌شود، با افزایش طول نانونوار در هر دو مورد زیگزاگ و دسته صندلی، تعداد نوسان‌ها در منحنی ضریب عبور در ناحیهٔ تشدیدی بیش‌تر و پدیدهٔ تونل‌زنی الکترون در خارج از نوار انرژی قوی‌تر می‌گردد.

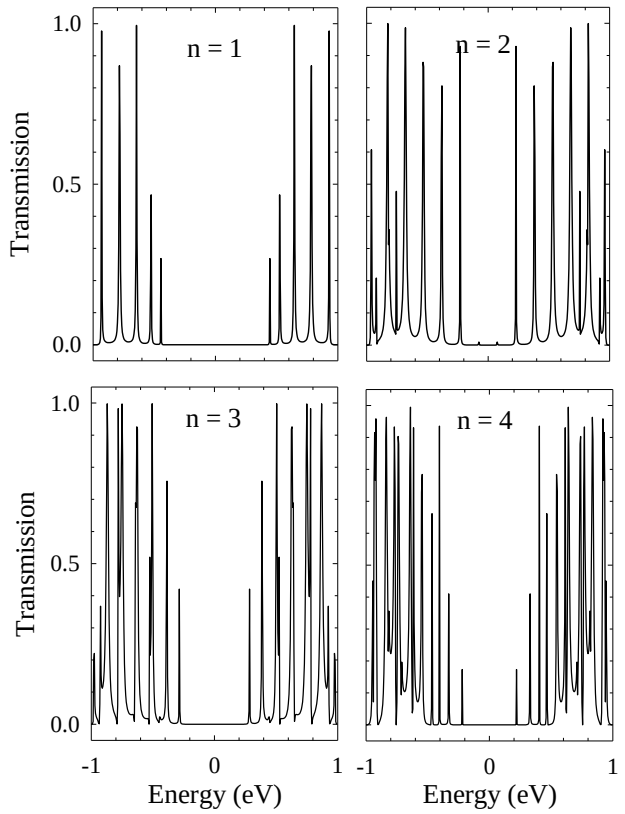
[Downloaded from isharat.khu.ac.ir on 2026-10-28]



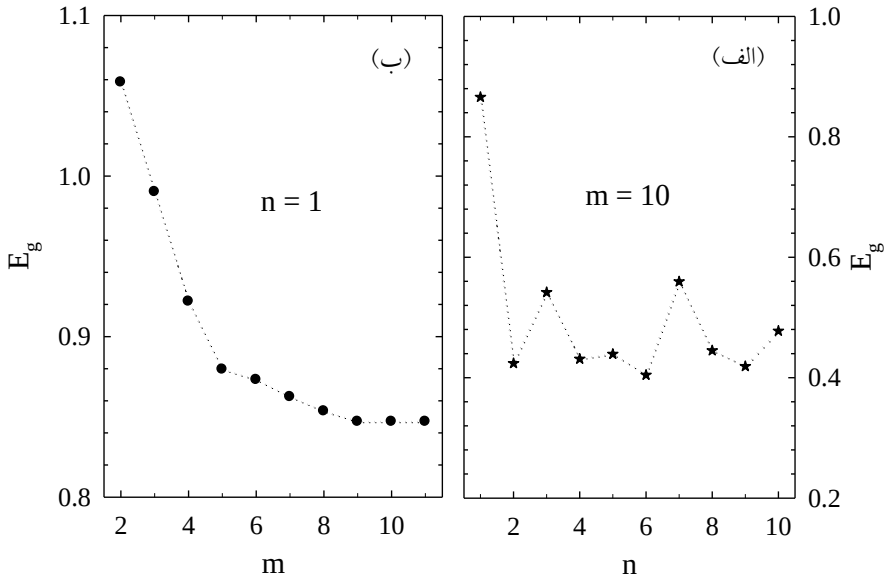
شکل ۳. نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای دو نانونوار دسته صندلی با عرض $n=1$ **و طول‌های** $m=1,3,10$

در نانونوار زیگزاگ با عرض $n=1$ برای هیچ یک از طول‌ها گافی حول انرژی صفر دیده نمی‌شود و فاصلهٔ بین دو قلهٔ ایجاد شده حول انرژی صفر با افزایش طول کاهش پیدا کرده به‌طوری‌که برای طول‌های خیلی بزرگ این دو قله در انرژی صفر به‌هم می‌پیوندند. در حالی‌که برای مورد دسته صندلی با همین عرض وبرای طول‌های بلند حول انرژی صفر یک گاف انرژی مشاهده می‌شود. با مقایسهٔ این نمودارها و نمودارهای مراجع [۱۰]، [۱۳] دیده می‌شود که اتصال زنجیره‌های اتمی به‌صورت چندگانه منجر به افزایش ضریب عبور و کاهش تعداد نوسانات ضریب عبور می‌گردد. با توجه به شکل‌های ۲ و۳ دیده می‌شود که برای نانونوار زیگزاگ با عرض $n=1$ هیچ گاف انرژی‌یی حول انرژی صفر وجود ندارد. این نتیجه با نتیجهٔ مرجع [۱۴] سازگار است. در حالی‌که در مورد دسته صندلی یک گاف انرژی از مرتبهٔ یک دهم الکترون-ولت حول انرژی فرمی مشاهده می‌شود. از این‌رو در شکل ۴ ضریب عبور الکترونی را برای چند نوار دسته صندلی به عرض‌های مختلف و طول $m=10$ بررسی کردیم. می‌توان گفت که با افزایش عرض نانونوار تعداد نوسانات ضریب عبور زیادتر می‌شود. همچنین مقدار گاف ایجاد شده حول انرژی صفر بسته به مقدار عرض نانونوار تغییر می‌کند. می‌توانیم برای همین طول، نمودار گاف انرژی حول انرژی فرمی (E_g) را بر حسب عرض نانونوار دستهٔ صندلی ترسیم کنیم. نتیجهٔ چنین کاری در شکل ۵ الف آمده است. این گاف نسبت به افزایش عرض نوار (n) دارای رفتاری افت و خیز گونه است که دلیل آن محدود بودن طول و عرض نانونوار است. در شکل ۵ ب نیز برای یک نانونوار با عرض ثابت $n=1$، انرژی گاف حول انرژی فرمی بر حسب طول رسم شده است که رفتاری نزولی را نشان می‌دهد و با افزایش طول به عددی ثابت میل می‌کند. در اتصال چندگانهٔ زنجیره‌های اتمی به نانونوار دستهٔ صندلی، گاف ایجاد شده حول انرژی اتم‌های کربن با افزایش عرض رفتاری افت و خیز گونه و با افزایش طول رفتاری صعودی از خود نشان می‌دهد [۱۳]. این نتیجه با مرجع [۱۵] به‌صورت کیفی کاملاً در توافق است.

[Downloaded from isharat.khu.ac.ir on 2026-10-28]



شکل۴. نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای نانونوارهای دسته صندلی و طول $m=10$ که به دو زنجیرهٔ سادهٔ اتمی از دوجای‌گاه متقابل در سمت چپ و راست متصل شده‌اند



شکل ۵. نمودار گاف انرژی حول انرژی فرمی برای یک نانونوار دسته صندلی الف) بر حسب عرض با طول ثابت $m=10$ و ب) بر حسب طول با عرض ثابت

[Downloaded from isharat.khu.ac.ir on 2026-10-28]

نتیجه‌گیری

در این تحقیق به‌کمک روش تابع گرین به بررسی اثر اندازهٔ یک نانونوار گرافن- که از دو جای‌گاه متقابلش به دو هادی یک بعدی متصل است- بر ضریب عبور الکترونی پرداخته شده است. نتایج به‌دست آمده بیان می‌کند که با افزایش طول نانونوار برای هر دو مورد زیگزاگ و دستهٔ صندلی، تعداد نوسان‌ها در منحنی ضریب عبور بیش‌تر می‌شود. در نانونوار زیگزاگ با عرض $n=1$ گافی حول انرژی صفر دیده نمی‌شود و فاصلهٔ بین دو قلهٔ ایجاد شده حول انرژی صفر با افزایش طول کاهش پیدا کرده به‌طوری‌که برای طول‌های بزرگ این دو قله در انرژی فرمی به‌هم می‌پیوندند. در حالی‌که برای مورد دستهٔ صندلی حول انرژی فرمی یک گاف انرژی مشاهده می‌شود. در ادامهٔ کار با ثابت در نظر گرفتن یک طول ثابت، وابستگی ضریب عبور به عرض نانونوار دسته صندلی را بررسی کردیم و مشاهده شد که گاف ایجاد شده حول انرژی فرمی نسبت به افزایش عرض، رفتاری افت و خیز گونه دارد که دلیل آن محدود بودن طول و عرض نانونوار است. برای یک نانونوار تک حلقه‌ای رفتار گاف مرکزی تابع طول نزولی است و برای طول‌های بلند به سمت یک عدد ثابت میل می‌کند. با مقایسهٔ نتایج به‌دست آمده در این تحقیق و پژوهش‌های انجام شدهٔ قبلی می‌توان گفت که در بررسی رفتار رسانش الکترونی یک نانونوار گرافن، علاوه بر مشخصات فیزیکی و شیمیایی خود نانونوار، نحوهٔ اتصال الکترودها به آن نیز بر تغییر رفتار و میزان رسانش آن تأثیرگذار است.

منابع

1. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, Rev., Modern Phys., 81 (2009).
2. K. Novoselov, A. Geim, S. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. Dubonos, I. Grigorieva and A. Firsov, Science, 306 (2004).
3. S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang and E. Rossi, Rev. Mod. Phys., 83 (2011).
4. A. V. Rozhkov, G. Giavaras, Y. P. Bliokh, V. Freilikher and F. Nori, Phys. Rep. 351, 0198 (2011).
5. M. H. F. Sluiter and Y. Kawazoe, Phys. Rev. B 68 (2003).
6. M. Y. Han, B. ozyilmaz, Y. Zhang and P. Kim, Phys. Rev. Lett. 98 (2007).
7. Y. M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K. A. Jenkins, D.B. Farmer, H. Y. Chiu, A. Grill and P. "Avouris", Science 327 (2010).
8. T. O. Wehling, K. S. Novoselov, S. V. Morozov, E. E. Vdovin, M. I. Katsnelson, A. K. Geim and A. I. Lichtenstein, Nano Lett. 8 (2008).

[Downloaded from isharat.khu.ac.ir on 2026-10-28]

9. Q. Yan, B. Huang, J. Yu, F. Zheng, J. Zang, J. Wu, B. Lin Gu, F. Liu and W. Duan, Nano. Lett., 7 (2007).

۱۰. حسن ربانی، محمد مردانی، آزاده مظلوم شهرکی، *بررسی اثر طول و عرض بر ضریب عبور الکترونی نانو روبان‌های گرافن زیگزاگ*، مجموعه مقالات پنجمین همایش ملی فیزیک پیام نور، دانشگاه تبریز (۱۳۹۰).

11. S. Datta; *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*; Cambridge, University Press, Cambridge (1997).

12. M. Mardaani, H. Rabani and A. Esmaeili, Solid State Commun. 151(2011) 928.

۱۳. حسن ربانی، محمد مردانی، آزاده مظلوم شهرکی، *ترابرد الکترونی نانونوارهای گرافنی دسته صندلی متصل به دو زنجیرهٔ اتمی*، مجموعه مقالات هجدهمین کنفرانس فیزیک ماده چگال، مرکز تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، (۱۳۹۱).

14. B. Biel1, X. Blase, F. Triozon1 and S. Roche, Phys. Rev. Lett., 102 (2009) 096803.

15. V. Barone, O. Hod and G.E. Scuseria, Nano Lett. 6 (2006).

[Downloaded from isharat.khu.ac.ir on 2026-10-28]