



ویژگی الکترونی نانو نوارهای گرافن لبه دسته مبلی ناقص شده با اشکال متفاوت پادنقطه‌های کوانتومی

رضا کلامی و سید احمد کتابی*

دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان، ایران

چکیده: در این مقاله، خواص الکترونی نانونوارهای گرافن لبه دسته مبلی ناقص شده با اشکال مختلفی از پادنقطه‌های کوانتومی مورد مطالعه قرار گرفته است. نقص نانونوارها با مدل‌های هندسی خطی، مورب، مثلث، شش ضلعی و لوزی متقارن و نامتقارن در وسط نانو نوارها و الکترودها صورت گرفته است. با ایجاد نواقص، محدودیت‌های کوانتومی جدیدی در آرایش الکترونی نانونوار به وجود می‌آید، در نتیجه خواص الکترونی نانونوارها مانند ساختار نواری و تابع گسیل در حضور نواقص کامل تغییر می‌کند. مشاهده می‌شود که دو عامل مهم بر روی خواص الکترونی نانو نوارهای گرافن تأثیر می‌گذارد، یکی تعداد اتم‌های استخراج شده و دیگری وجود تقارن یا عدم تقارن در آرایه‌های پادنقطه کوانتومی. نتایج نشان می‌دهند که در ساختار نواری نانونوارهای گرافن ناقص شده با پادنقطه‌های کوانتومی، نوارهای انرژی مسطح در ساختار نواری ظاهر می‌شود که نشان از افزایش حالت‌های تبهگن الکترونی و حالت‌های قابل دسترس الکترونی در ساختار نواری سامانه دارد. خواص الکترونی نانونوارهایی که ساختار پادنقطه کوانتومی در آنها به صورت متقارن است شباهت بیشتری به خواص الکترونی نانو نوارهای ساده دارند. بنابراین، با انتخاب تعداد اتم‌های استخراج شده و همچنین، تقارن یا عدم تقارن در توزیع پادنقطه‌های کوانتومی، می‌توان خواص الکترونی سامانه را تغییر داد. همچنین، خواص الکترونی نانو نوارها با پارامتر فاصله بین دو پادنقطه کوانتومی مجاور نیز بررسی می‌شود. می‌توان نتیجه گرفت با افزایش فاصله بین پادنقطه‌های کوانتومی، خواص الکترونی نانونوارهای گرافن لبه دسته مبلی دارای نواقص به خواص الکترونی نانونوارهای گرافن ساده نزدیک می‌شود. محاسبات با استفاده از تقریب تنگ بست به همراه فرمولبندی تابع گرین غیرتعدالی انجام می‌شود.

واژگان کلیدی: گرافن، پادنقطه کوانتومی، محدودیت کوانتومی، ساختار نواری، تابع گسیل

*saketabi@du.ac.ir

نانولوله های کربنی و دو بعدی مانند گرافن تقسیم کرد [۲]. گرافن نخستین ماده دو بعدی، یکی از اشکال متفاوت ساختارهای کربنی است که دارای ویژگی و ویژگی‌های منحصر به فردی مانند هدایت و تحرک بالا می باشد [۳]. روشهای ساخت گرافن بسیار است که عبارتند از: روش رسوبدهی شیمیایی فاز بخار، لایه لایه کردن میکرومکانیکی گرافیت، استفاده از اکسید گرافیت، استفاده از کاهش شیمیایی، روش کاهش گرمایی، روش احیای

۱- مقدمه

در سالهای اخیر، با به کارگیری فناوری نانو و نانو ساختارهای کربنی، جهان انقلابی صنعتی را شاهد بوده است [۱]. نانو ساختارهای کربنی را می‌توان به لحاظ ابعادی و بسته به گستره نانومقیاس (کمتر از صد نانومتر) در جهت های متفاوت، از صفر بعدی مانند فولرین، به یک بعدی و شبه یک بعدی نظیر

الکتريکی، استفاده از پرتوهای ليزری، استفاده از لایه برداری شیمیایی، روش تولید نانو نوارهای گرافنی درون نانولوله های کربنی و روش رشد همبافته [۴]. گرافن به علت داشتن ویژگی فوق العاده الکتريکی، گرمایی، نوری و مکانیکی به ماده ای منحصر به فرد تبدیل شده است [۵]. گرافن به دلیل ویژگی های خاص تراپردی، مورد پژوهش های اخیر قرار گرفته است [۶]. صفحه های گرافن با کنار هم قرار گرفتن اتم های کربن تشکیل می شوند. در یک صفحه گرافن، هر اتم کربن با سه اتم کربن دیگر پیوند دارند. این سه پیوند در یک صفحه قرار دارند و زاویه های بین آنها با یکدیگر مساوی و برابر با ۱۲۰ درجه است [۷]. پیوند کربن- کربن درون صفحه ای گرافن از نوع هیبرید sp^2 است که سه تا از الکترونهای ظرفیت کربن را به خود اختصاص می دهد [۸]. این پیوندهای کوالانسی کربن- کربن از نظر قدرت شبیه به پیوندهای کربن- کربن در الماس است [۹]. الکترون چهارم در نوار ظرفیت در پیوندهای کوالانسی شرکت نمی کند. این الکترون در اوربیتال $2p_z$ (اوربیتال در خارج از صفحه) قرار دارد که به صورت عمود بر صفحه ای گرافن و تشکیل دهنده پیوندهای رسانی π است [۱۰]. با این حال گرافن هنوز مشکلاتی برای پژوهشگرها به وجود آورده است. برای مثال حرکت الکترون در آن را نمی توان متوقف کرد [۱۱]. عدم توقف حرکت الکترون به تک لایه ای بودن گرافن مربوط می شود که موجب می شود تا این ماده فاقد گاف نواری باشد [۱۲]. بدون گاف نواری نمی توان هیچ کنترلی روی جریان الکترون داشت و در نتیجه نمی توان از پتانسیلهای گرافن در صنعت الکترونیک و فونونیک استفاده کرد [۱۳]. گرافن دوبعدی نیم رسانایی بدون گاف است. نیاز به معرفی یک گاف نواری برای استفاده از گرافن به عنوان عنصری فعال در دستگاه های الکترونیک وجود دارد. از این رو ورق گرافن را به نوارهایی با عرض و پهنای محدود که رفتاری شبه یک بعدی دارند برش می دهند و به آنها نانو نوارهای گرافن می گویند [۱۴]. با توجه به جهت برش گرافن دو نوع نانونوار گرافن زیگزاگ و دسته میلی به وجود می آیند [۱۵]. ویژگی های الکترونی نانونوار گرافن با لبه دسته میلی به شدت به پهنای نوار وابسته است و با توجه به پهنایشان ممکن است

نیم رسانا یا فلز باشند [۱۶]. اگر n عددی صحیح باشد و پهنای نانو نوار دسته میلی n یا $3n+1$ باشد، نیم رسانا و اگر $3n+2$ باشد فلزی است. نانو نوارهای گرافن با لبه زیگزاگی، همواره فلز هستند [۱۷].

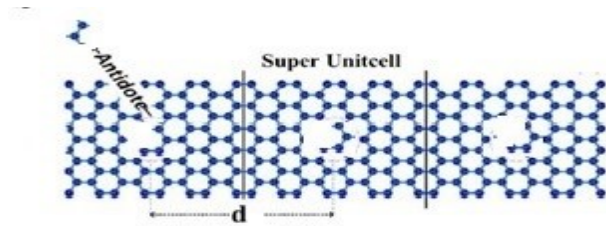
از معادله ی شرودینگر معمولاً برای توصیف ویژگی الکترونی مواد استفاده می شود. اما از آنجایی که حامل های بار در صفحه های گرافنی رفتار شبه نسبیتی از خود نشان می دهند، دیگر نمی توان از معادله ی شرودینگر استفاده کرد [۱۸]. در واقع، با استفاده از «مدل تنگ بست»^۱ که اساس آن معادله ی شرودینگر است، با در نظر گرفتن رفتار همه الکترونهای ظرفیت (غیرنسبیتی) گرافن، معادلات استخراج می شوند [۱۹]. تقریب تنگ بست روشی برای محاسبه ساختار نواری الکترونی با استفاده از مجموعه تقریبی توابع موج بر اساس برهم نهی توابع موج برای اتم های جدا شده واقع در هر صفحه اتمی است [۲۰].

با اعمال نواقص ساختاریافته در ساختار نانو نوار گرافن ساده، ویژگی متفاوتی از گرافن شکل می گیرد. اخیراً کارهای نظری و تجربی زیادی بر روی ایجاد یک یا چند نانو حفره روی نانو نوارهای گرافن انجام شده است. این حفره ها را پادنقطه کوانتومی می نامند [۲۱]. با ایجاد پادنقطه های کوانتومی در نانو نوار گرافن و با انجام محاسبات با استفاده از نظریه تابعی چگالی، مشخص شد که نوارهای انرژی جدیدی در ساختار نواری نانو نوار گرافن شکل گرفته و اندازه گاف نواری با ایجاد پادنقطه های کوانتومی با اشکال خطی، مورب، مثلثی، شش ضلعی، لوزی متقارن و لوزی نامتقارن تغییرات معناداری پیدا می کند [۲۲]. همچنین، ویژگی تراپردی نانو نوارهای گرافن مثل رسانندگی با ایجاد پادنقطه های کوانتومی با اشکال شش ضلعی و لوزی نامتقارن دستخوش تغییر می شود. این تغییر به علت ایجاد محدودیت های کوانتومی به واسطه وجود پادنقطه های کوانتومی در نانو نوار اعمال می شود [۲۳].

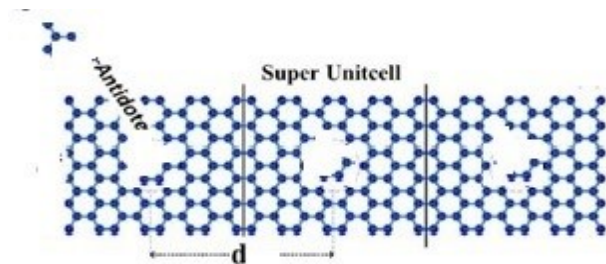
محاسباتی که تا به حال در خصوص ویژگی الکترونی نانو نوارهای گرافن ناقص شده با پادنقطه های کوانتومی انجام گرفته است، بیشتر با روش نظریه تابعی چگالی بوده است که در مقاله حاضر برای استخراج نتایج دقیق مبتنی بر رویدادهای فیزیکی سامانه از تقریب تنگ بست و روش تابع گرین غیرتعدالی استفاده

¹ Tight binding Model

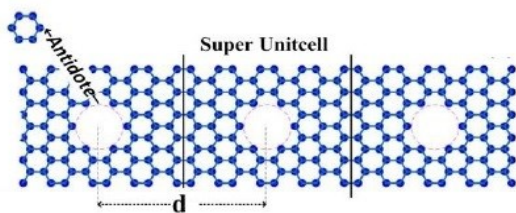
شکل ۲: ساختار نانو نوار گرافن لبه دسته مبلی ناقص شده با شبکه ای از پادنقطه های کوانتومی به شکل خطی



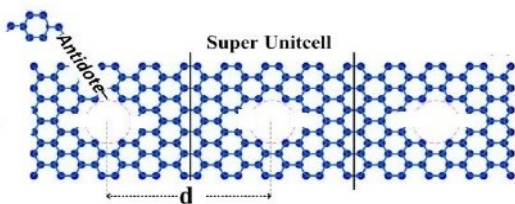
شکل ۳: ساختار نانو نوار گرافن لبه دسته مبلی ناقص شده با شبکه ای از پادنقطه های کوانتومی به شکل مورب



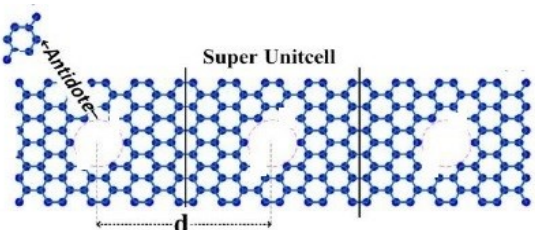
شکل ۴: ساختار نانو نوار گرافن لبه دسته مبلی ناقص شده با شبکه ای از پادنقطه های کوانتومی به شکل مثلث



شکل ۵: ساختار نانو نوار گرافن لبه دسته مبلی ناقص شده با شبکه ای از پادنقطه های کوانتومی به شکل شش ضلعی



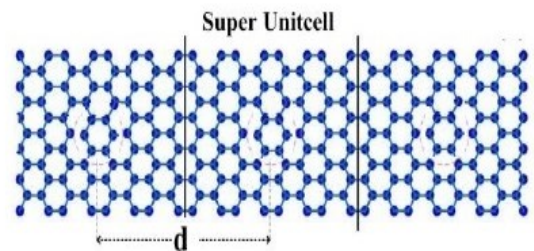
شکل ۶: ساختار نانو نوار گرافن لبه دسته مبلی ناقص شده با شبکه ای از پادنقطه های کوانتومی به شکل لوزی متقارن



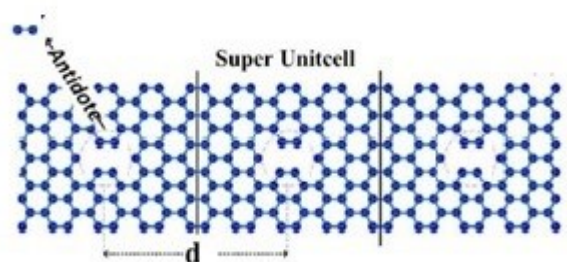
شکل ۷: ساختار نانو نوار گرافن لبه دسته مبلی ناقص شده با شبکه ای از پادنقطه های کوانتومی به شکل لوزی نامتقارن

شده است. همچنین، در مقالات پیشین نقش همه اشکال متفاوت بر ویژگی الکترونی مثل تابع گسیل بررسی نشده است و در مقاله حاضر نقش شش نوع از مهمترین انواع پادنقطه های کوانتومی در تغییر ویژگی الکترونی نانو نوارهای گرافن مثل ساختار نواری و تابع گسیل با جزئیات مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین، در کار حاضر، نقش فاصله بین دو پادنقطه نیز بر ویژگی الکترونی بررسی شده است.

در مقاله حاضر، ویژگی الکترونی و تراپردی نانو نوارهای گرافن لبه دسته مبلی با عرض $N=11$ ناقص شده با پاد نقطه های کوانتومی به شکلهای خطی، مورب، مثلث، شش ضلعی، لوزی متقارن و لوزی نامتقارن مورد مطالعه قرار می گیرند. نانو نوار گرافن لبه دسته مبلی با عرض $N=11$ فاقد گاف نواری است و با ایجاد پادنقطه های کوانتومی به اشکال متفاوت، گاف نواری با اندازه های متفاوت به نانو نوار اعمال می شود. شکل ۱ نانونوار گرافن لبه دسته مبلی با عرض $N=11$ که به دو الکتروود از جنس خودش متصل است را نشان می دهد. اشکال ۲ الی ۷ نیز همین نانونوار را نشان می دهد که ناحیه مرکزی و الکتروودهای چپ و راست در آن با اشکال متفاوت پادنقطه های کوانتومی ناقص شده است. ساختار نواری در حضور پادنقطه های کوانتومی، ظهور گاف انرژی و حالت های الکترونی قابل دسترس جدیدی را نشان می دهد. همچنین، می توان ویژگی الکترونی نانونوارهای گرافن دارای پاد نقطه های کوانتومی را با پارامترهایی مثل فاصله بین دو نقص مجاور (d) مورد بررسی قرار داد.



شکل ۱: ساختار نانو نوار گرافن لبه دسته مبلی ساده بدون نواقص



۲- مدل و روش محاسبه

در این بخش با استفاده از رهیافت تابع گرین غیر تعادلی و تقریب تنگ بست، مدل محاسباتی و فرمولبندی مورد نظر ارائه می‌شود. ماتریس هامیلتونی سامانه با در نظر گرفتن تقریب نزدیکترین همسایه‌ها و با استفاده از تقریب تنگ بست به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = \epsilon_0 \sum_i c_i^\dagger c_i + t \sum_{i,j} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) \quad (1)$$

که در آن c_i^\dagger (c_i) عملگر خلق (نابودی) الکترون در جایگاه i ام است. i و j اشاره به برهم‌کنش نزدیکترین همسایه‌ها دارد. $\epsilon_0 = 0 \text{ eV}$ انرژی جایگاهی و $t = -2.7 \text{ eV}$ پارامتر پرش الکترون بین جایگاه‌های همسایه است.

هامیلتونی الکترودهای راست و چپ و نیز هامیلتونی ناشی از برهم‌کنش الکترودها با ناحیه مرکزی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$H_\beta = \epsilon_0 \sum_i c_i^\dagger c_i + t \sum_{i,j} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) \quad (2)$$

$$H_{c\beta} = t \sum_{i,j} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) \quad (3)$$

تابع گرین سطحی تأخیری و نیز خود-انرژی الکترودها به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$g_\beta^r(E) = [(E + i\eta)I - H_\beta]^{-1} \quad (4)$$

$$\Sigma_\beta^r(E) = H_{c\beta} g_\beta^r(E) H_{\beta c} \quad (5)$$

که در این روابط $\beta = L, R$ و η یک مقدار بسیار کوچک و I ماتریس یکه ای در ابعاد هامیلتونی است. با توجه به پارامترها و معادلات معرفی شده، می‌توان تابع گرین تأخیری و تابع پهن

شدگی Γ را تعریف و در محاسبات تابع گسیل مورد استفاده قرار داد:

$$G^r(E) = [(E + i\eta)I - H_c - \Sigma_L^r(E) - \Sigma_R^r(E)]^{-1} \quad (6)$$

$$\Gamma_\beta(E) = i[\Sigma_\beta^r(E) - (\Sigma_\beta^r(E))^\dagger] \quad (7)$$

تابع گسیل که احتمال ترابرد در نمونه ای که میان دو الکترودها قرار گرفته است را نشان می‌دهد و همچنین، چگالی حالت‌های الکترونی به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$T(E) = \text{Re}\{\text{Tr}[\Gamma_L \cdot G^r \cdot \Gamma_R \cdot (G^r)^\dagger]\} \quad (8)$$

$$\text{DOS}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{\text{Tr}[G^r]\} \quad (9)$$

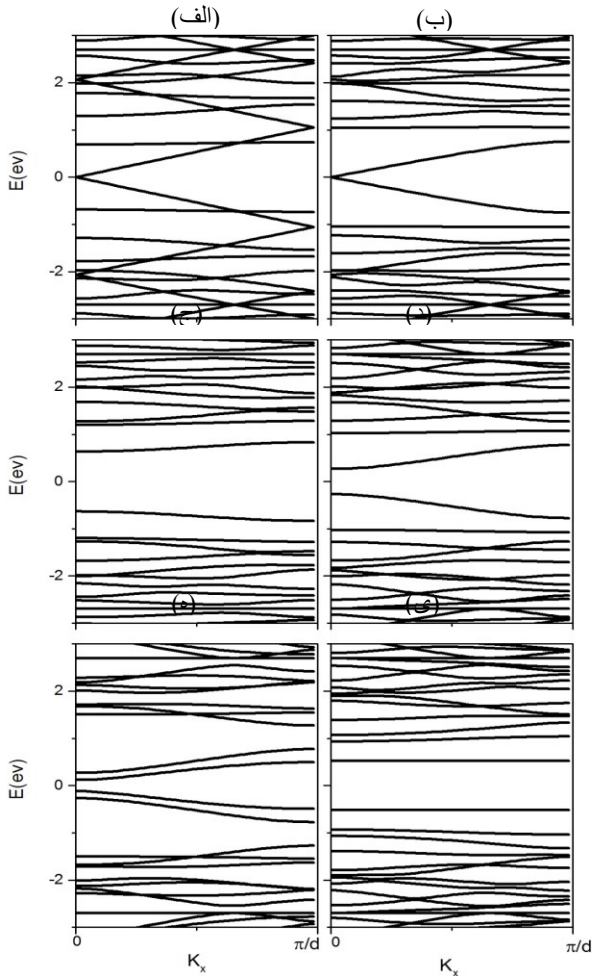
۳- نتایج و بحث

ساختار نواری، چگالی حالت‌های الکترونی و تابع گسیل نانو نوارهای گرافن لبه دسته مبلی ساده با $N = 11$ در شکل ۸ نشان داده شده است. همانطور که در شکل مشخص است ساختار نانو نوار گرافن ساده لبه دسته مبلی با عرض $N = 11$ در تقریب تنگ بست دارای گاف نواری صفر است ($E_g = 0 \text{ eV}$) و چگالی حالت‌های الکترونی آن در اطراف انرژی فرمی به صورت یکنواخت است. با افزایش انرژی، چگالی حالت‌های الکترونی افزایش می‌یابد. همچنین، تابع گسیل که نشان دهنده احتمال گذار است، برای الکترون‌های نزدیک انرژی فرمی برابر ۱ است و با افزایش انرژی الکترون، احتمال گسیل به صورت پلکانی افزایش می‌یابد.

در حضور پادنقطه‌های کوانتومی به اشکال خطی، مورب، مثلثی، شش ضلعی و لوزی متقارن و نامتقارن ساختار نواری تغییر می‌کند. همانطور که در شکل ۹ نشان داده شده است، در حضور

پادنقطه‌های کوانتومی به صورت خطی و مورب در گرافن، ساختار نواری دچار تغییر شده و ترازهای انرژی جدیدی در اطراف انرژی فرمی به وجود می‌آید، ولی کماکان گاف نواری تغییر نکرده و برابر صفر است. همچنین، نوارهای مسطح در اطراف انرژی فرمی افزایش یافته است. در حضور پادنقطه‌های به شکل مثلثی و لوزی نامتقارن، گاف نواری تقریباً بزرگی (1.4ev برای مثلثی و 1.04ev برای لوزی نامتقارن) در ساختار نواری گرافن به وجود می‌آید. در حضور شبکه‌ای از پادنقطه‌های کوانتومی به شکل شش ضلعی و لوزی متقارن گاف نواری نه چندان بزرگی (0.54ev برای شش ضلعی و 0.24ev برای لوزی متقارن) در ساختار نواری گرافن به وجود می‌آید. در حضور پادنقطه‌های کوانتومی، آرایش الکترونی سامانه دستخوش تغییر می‌شود، بطوریکه پراکندگی و برهم کنش‌های الکترونی و حالت‌های قابل دسترس افزایش می‌یابد. چنانکه ملاحظه می‌شود علاوه بر تولید نوارهای انرژی جدید، در مقایسه با ساختار نواری ایده‌آل، شاهد ظهور نوارهای انرژی مسطح در حوالی انرژی فرمی نیز هستیم. وجود این نوارهای مسطح نشان از افزایش تبهگنی حالت‌های الکترونی در ساختار نواری سامانه دارد.

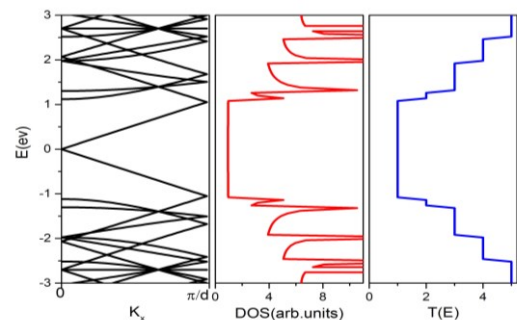
جدول ۱، مقادیر گاف نواری ایجاد شده توسط شبکه ای از پادنقطه‌های کوانتومی به اشکال متفاوت را نشان می‌دهد. در ساختارهایی که بیش از دو اتم از آنها استخراج شده است، با توجه به تقارن پادنقطه کوانتومی، مقدار گاف نواری ایجاد شده در ساختار نواری متفاوت خواهد بود. در حضور پادنقطه‌های متقارن مثل شش ضلعی و لوزی متقارن، گاف نواری بسیار کوچکتر از ساختاری با حضور پادنقطه‌های به شکل مثلثی و لوزی نامتقارن است.



شکل ۹: ساختار نواری گرافن لبه دسته میلی ناقص شده با پادنقطه‌های کوانتومی به شکلهای (الف) خطی (ب) مورب (ج) مثلثی (د) شش ضلعی (ه) لوزی متقارن (ی) لوزی نامتقارن

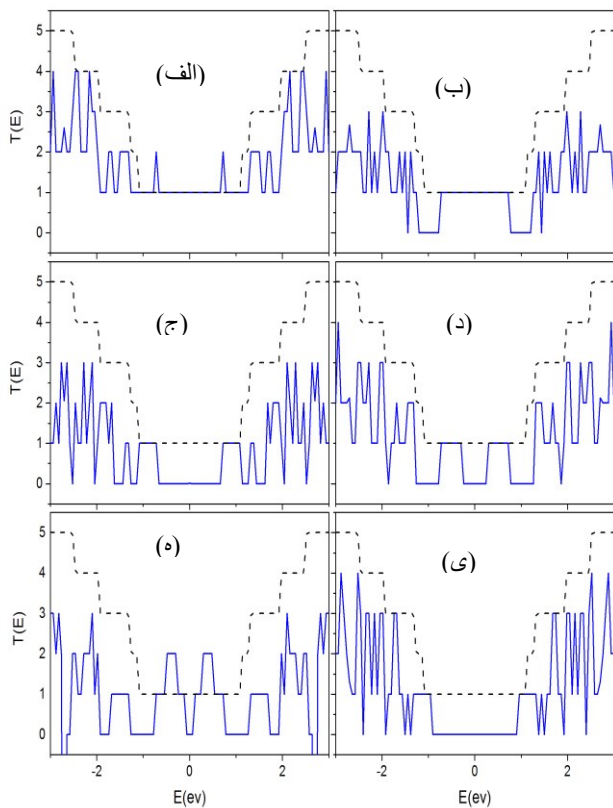
نوع پادنقطه	خطی	مورب	مثلثی	شش ضلعی	لوزی متقارن	لوزی نامتقارن
تعداد اتم‌های استخراج شده	2	2	4	6	8	8
گاف نواری	0ev	0ev	1.4ev	0.54ev	0.24ev	1.04ev

جدول ۱: مقادیر عددی گاف نواری برای ساختار نانو نوار گرافن لبه دسته میلی ناقص شده با پادنقطه‌های کوانتومی به اشکال متفاوت



شکل ۸: نمودارهای ساختار نواری، چگالی حالت‌های الکترونی و تابع گسیل برای ساختار گرافن لبه دسته میلی ساده

شکل ۱۰، تابع گسیل نانونوارهای گرافن لبه دسته میلی ناقص شده با شبکه‌ای از پادنقطه‌های کوانتومی به اشکال متفاوت را



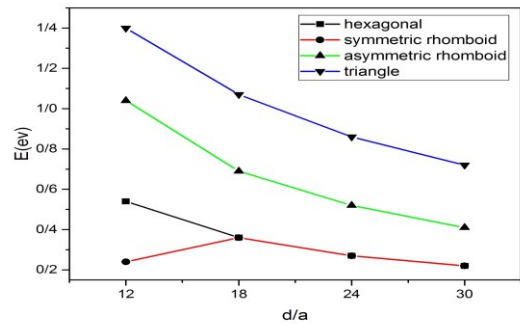
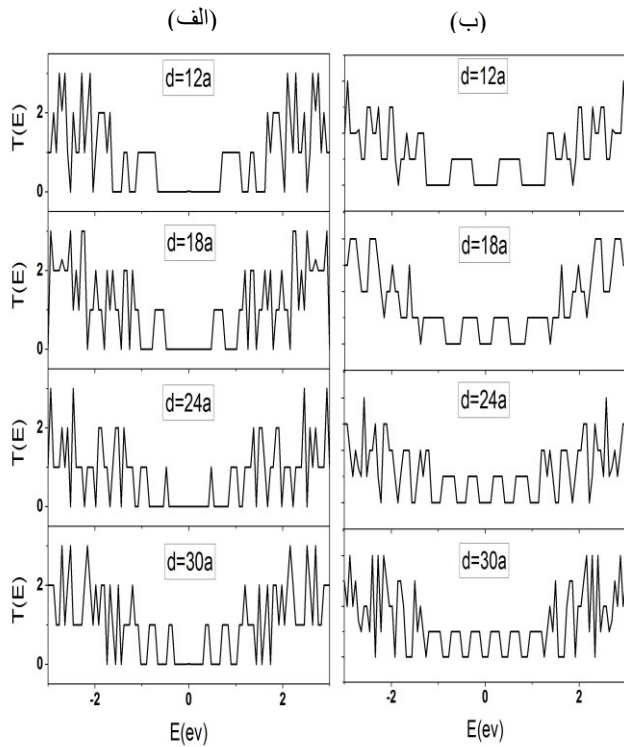
شکل ۱۰: نمودارهای تابع گسیل برای ساختارهای گرافن لبه دسته مبلی ناقص شده با پادنقطه‌های کوانتومی به شکل (الف) خطی (ب) مورب (ج) مثلثی (د) شش ضلعی (ه) لوزی متقارن (ی) لوزی نامتقارن (نمودار تابع گسیل نانو نوار گرافن ساده به صورت خط چین مشخص شده است).

فاصله بین نواقص، یک پارامتر بسیار مهم است که بر روی ویژگی الکترونی نانو نوارهای گرافن لبه دسته مبلی دارای نواقص تأثیر می‌گذارد. شکل ۱۱ نمودار گاف انرژی نانو نوار گرافن در حضور شبکه ای از پادنقطه‌های کوانتومی به اشکال متفاوت بر حسب فاصله بین نواقص نشان می‌دهد. همانطور که از شکل ملاحظه می‌شود، افزایش فاصله بین نواقص، باعث کاهش گاف نواری می‌شود. وقتی فاصله بین نواقص افزایش می‌یابد، محدودیت کوانتومی ساختارهای دارای نواقص به محدودیت کوانتومی ساختار گرافن ساده نزدیک می‌شود. در نتیجه اگر فاصله بین نواقص شبکه افزایش یابد، اثرات نواقص پادنقطه‌های کوانتومی بر روی ویژگی الکترونی نانو نوار کاهش می‌یابد.

نشان می‌دهد که هر کدام از آنها با تابع گسیل نانو نوار گرافن ساده مقایسه شده است. برای نانو نوارهای گرافن دسته مبلی ناقص شده با شبکه ای از پادنقطه‌های کوانتومی به شکل خطی، تابع گسیل اختلاف چندانی با تابع گسیل نانو نوار گرافن لبه دسته مبلی ساده ندارد. با وجود پادنقطه‌های کوانتومی به شکل مورب، در نواحی نزدیک انرژی فرمی، تابع گسیل برابر با تابع گسیل نانو نوار گرافن لبه دسته مبلی ساده است. در نواقص با اشکال متقارن که بیش از دو اتم از آنها استخراج شده است (شش ضلعی و لوزی متقارن)، تابع گسیل در نواحی نزدیک انرژی فرمی تقریباً مشابه با تابع گسیل نانو نوار گرافن لبه دسته مبلی ساده است، ولی در نواقص به اشکال غیر متقارن که بیش از دو اتم از آنها استخراج شده است (مثلثی و لوزی نامتقارن)، تابع گسیل در نواحی نزدیک انرژی فرمی، صفر است و این یعنی احتمال گسیل در این نوع نواقص، در نزدیک انرژی فرمی برابر با صفر است. در واقع افزایش گاف نواری باعث کاهش احتمال گسیل الکترونی در سامانه شده است و در نانو نوارهای ناقص شده که گاف نواری کوچکتری دارند، احتمال گسیل بیشتر و در نانونوارهایی که گاف نواری بزرگتری دارند، احتمال گسیل کمتر خواهد بود.

در حقیقت، در حضور شبکه‌ای از پادنقطه‌های کوانتومی، الگوی زیرنوارها بازسازی شده و پادنقطه‌های کوانتومی می‌توانند به عنوان سد پتانسیل دوره‌ای عمل کنند. بنابراین در حضور آنها، محدودیت کوانتومی جدیدی در سر تا سر نانو نوار به وجود می‌آید. رفتار تراپردی این سامانه‌های پیچیده توسط حالت‌های انرژی الکترونی جدید و نواحی انرژی ممنوعه تعریف می‌شود که این نواحی به سبب محدودیت‌های کوانتومی و انواع جدید تقارن ایجاد شده به وسیله نواقص در ساختار، ایجاد می‌شود.

پس دو عامل مهم در تغییر ویژگی تراپردی نانو نوار گرافن دسته مبلی ناقص شده با شبکه‌ای از پادنقطه‌های کوانتومی نقش دارد، یکی از آنها تعداد اتم‌های استخراج شده و دیگری تقارن نواقص (پادنقطه‌های کوانتومی) می‌باشند.

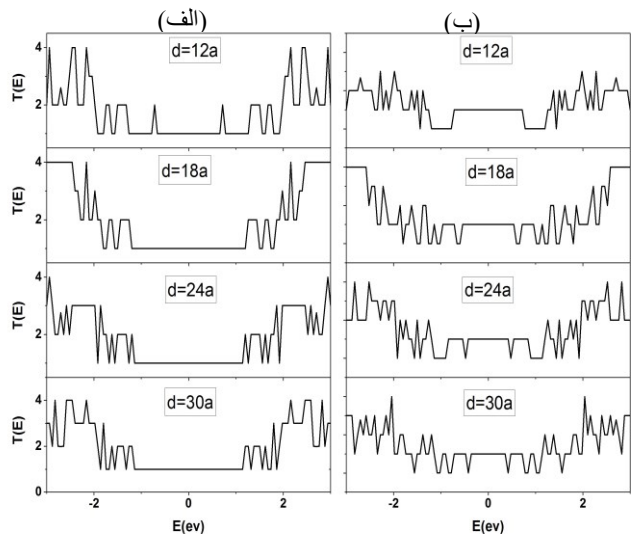
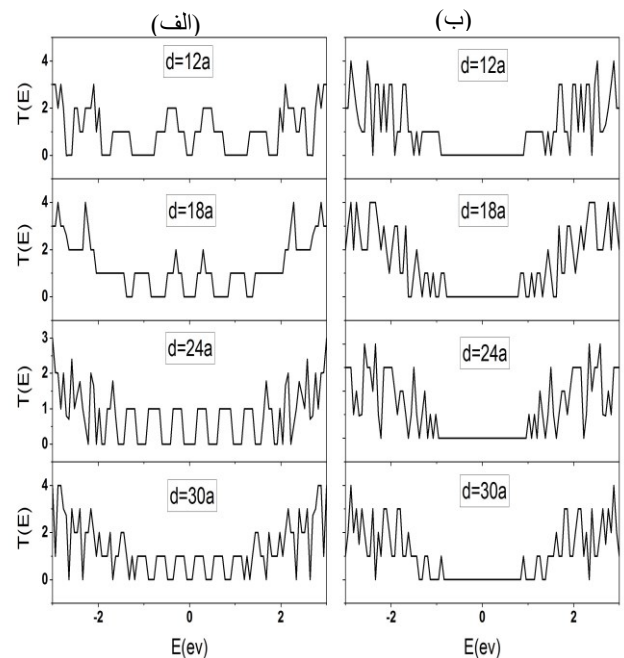


شکل ۱۱: نمودار تغییرات گاف انرژی بر حسب فاصله بین دو نقص مجاور برای چهار نوع ساختار گرافن لبه دسته میلی ناقص شده با پادنقطه‌های کوانتومی به شکل مثلثی، شش ضلعی، لوزی متقارن و نامتقارن

شکل ۱۳: نمودارهای تابع گسیل برای ساختارهای گرافن لبه دسته میلی ناقص شده با پادنقطه‌های کوانتومی به شکل (الف) مثلثی و (ب) شش ضلعی در فواصل مختلف بین نواقص

شکل‌های ۱۲ تا ۱۴، تابع گسیل ساختارهای معرفی شده در فواصل متفاوت بین نواقص را نشان می‌دهد. افزایش فواصل بین نواقص، باعث بزرگتر شدن سلول واحد شده و همانطور که در انرژی‌های پایین ($|E_f| < 1\text{eV}$) مشاهده می‌شود زیرنوارها با افزایش فاصله بین نواقص، افزایش می‌یابد. برای انرژی‌های بالاتر ($|E_f| > 1\text{eV}$) تابع گسیل ساختار پیچیده‌تری را به سبب افزایش تعداد کانال‌های مجاز رسانایی نشان می‌دهد.

اگر فاصله بین نواقص شبکه افزایش یابد، تابع گسیل نوارهای ناقص شده به تابع گسیل ساختار نوار نوار گرافن لبه دسته میلی ساده نزدیک خواهد شد.



شکل ۱۴: نمودارهای تابع گسیل برای ساختارهای گرافن لبه دسته میلی ناقص شده با پادنقطه‌های کوانتومی به شکل (الف) لوزی متقارن و (ب) لوزی نامتقارن در فواصل مختلف بین نواقص

شکل ۱۲: نمودارهای تابع گسیل برای ساختارهای گرافن لبه دسته میلی ناقص شده با پادنقطه‌های کوانتومی به شکل (الف) خطی و (ب) مورب در فواصل مختلف بین نواقص

۴- نتیجه گیری

در این پژوهش وابستگی ویژگی تراپردی و الکترونی نانو نوارهای گرافن لبه دسته میلی ناقص شده با شبکه ای از پادنقطه‌های کوانتومی با اشکال متفاوت خطی، مورب، مثلثی، شش ضلعی، لوزی متقارن و لوزی نامتقارن مورد بررسی قرار گرفت.

نشان داده شد که ساختار نوری نانو نوارهای گرافن با تغییر الگوی دوره ای نواقص تغییر می‌کند، به طوری که به علت پراکندگی ایجاد شده توسط پادنقطه‌های کوانتومی، حالت‌های قابل دسترس و ترازهای انرژی افزایش می‌یابد. همچنین گاف نوری دستخوش تغییر می‌شود که مقدار این گاف به تعداد اتم‌های استخراج شده و تقارن نواقص وابسته است. هر چه تعداد اتم‌های استخراج شده کمتر و ساختار پادنقطه‌کوانتومی تقارن بیشتری داشته باشد، گاف انرژی کوچکتر و هرچه تعداد اتم‌های استخراج شده بیشتر باشد و ساختار پادنقطه کوانتومی نامتقارن باشد، گاف انرژی بزرگتر خواهد بود. همچنین به علت تغییر در ساختار نوری، تابع گسیل چنین سامانه‌هایی هم تغییر خواهد کرد و احتمال گسیل الکترونی در نانونوار گرافن ناقص شده با پادنقطه‌های کوانتومی کاهش خواهد یافت. این نتایج با کارهای پیشین که با روش نظریه تابعی چگالی انجام گرفته بود مطابقت دارد [۲۳، ۲۲].

به علاوه، نقش پارامتر فاصله بین دو نقص مجاور بر روی ویژگی الکترونی نانو نوارهای دارای نواقص بررسی شد. مشخص گردید که وقتی فاصله بین نواقص افزایش می‌یابد، محدودیت کوانتومی ساختارهای دارای نواقص به محدودیت کوانتومی ساختار گرافن ساده نزدیک می‌شود. در نتیجه اگر فاصله بین نواقص شبکه افزایش یابد، اثرات نواقص پادنقطه‌های کوانتومی بر روی ویژگی الکترونی نانو نوار کاهش می‌یابد. به عنوان مثال، گاف انرژی و تابع گسیل نانو نوارهای ناقص شده به گاف انرژی و تابع گسیل ساختار نانو نوار گرافن لبه دسته میلی ساده نزدیک خواهد شد. این نتایج با مقالات پیشین که با روش نظریه تابعی چگالی برای دو نوع از پادنقطه‌های کوانتومی انجام گرفته بود، همخوانی دارد [۲۳].

بر اساس نتایج، اگر ساختار پادنقطه‌های کوانتومی به اشکال متفاوت در وسط نانو نوار و الکترونها با ابعاد مناسب ایجاد شوند،

می‌توان اندازه گاف انرژی و طیف گسیل نانو نوارهای گرافن لبه دسته میلی را تنظیم کرد.

مراجع

- [1] K. S. Anantharaju, Nanomaterials for Fuel Cell and Corrosion Inhibition: A Comprehensive Review. *Current Nanoscience*, 17, 591-611, 2021.
- [2] S. Barua, X. Geng, & B. Chen, Graphene-based nanomaterials for healthcare applications. *Photonanotechnology for Therapeutics and Imaging*, Elsevier, 45-81, 2020.
- [3] K. Khan, A. K. Tareen, M. Aslam, R. Wang, Y. Zhang, A. Mahmood, , ... & Z. Guo, Recent developments in emerging two-dimensional materials and their applications. *Journal of Materials Chemistry C*, 8, 387-440, 2020.
- [4] R. Kumar, S. Sahoo, E. Joanni, R. K. Singh, W. K. Tan, K. K. Kar, & A. Matsuda, Recent progress in the synthesis of graphene and derived materials for next generation electrodes of high performance lithium ion batteries. *Progress in Energy and Combustion Science*, 75, 100786, 2019.
- [5] A. A. Iqbal, N. Sakib, A. P. Iqbal, & D. M. Nuruzzaman, Graphene-based nanocomposites and their fabrication, mechanical properties and applications. *Materialia*, 12, 100815, 2020.
- [6] M. Shakeri, Effect of randomly distributed asymmetric stone-wales defect on electronic and transport properties of armchair graphene nanoribbon. *Superlattices and Microstructures*, 128, 116-126, 2019.
- [7] S. Liu, K. Duan, L. Li, X. Wang, & Y. Hu, A multilayer coarse-grained molecular dynamics model for mechanical analysis of mesoscale graphene structures. *Carbon*, 178, 528-539, 2021.

- [15] S. S. A. Kumar, S. Bashir, K. Ramesh, & S. Ramesh, New perspectives on Graphene/Graphene oxide based polymer nanocomposites for corrosion applications: The relevance of the Graphene/Polymer barrier coatings. *Progress in Organic Coatings*, 154, 106215, 2021.
- [16] P. H. Jacobse, A. Kimouche, T. Gebraad, M. M. Ervasti, J. M. Thijssen, P. Liljeroth, & I. Swart, Electronic components embedded in a single graphene nanoribbon. *Nature communications*, 8, 1-7, 2017.
- [17] Y. Zhou, D. Zhang, J. Zhang, C. Ye, & X. Miao, Negative differential resistance behavior in phosphorus-doped armchair graphene nanoribbon junctions. *Journal of Applied Physics*, 115, 073703, 2014.
- [18] A. Gallerati, Graphene properties from curved space Dirac equation. *The European Physical Journal Plus*, 134, 202, 2019.
- [19] T. N. Do, D. Huang, P. H. Shih, H. Lin, & G. Gumbs, Atomistic Band-Structure Computation for Investigating Coulomb Dephasing and Impurity Scattering Rates of Electrons in Graphene. *Nanomaterials*, 11, 1194, 2021.
- [20] S. Smidstrup, T. Markussen, P. Vancraeyveld, J. Wellendorff, J. Schneider, T. Gunst, ... & K. Stokbro, QuantumATK: an integrated platform of electronic and atomic-scale modelling tools. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 32, 015901, 2019.
- [21] J. W. You, Z. Lan, Q. Bao, & N. C. Panoiu, Valley-Hall topological plasmons in a graphene nanohole plasmonic crystal waveguide. *IEEE*
- [8] T. Zeng, H. Yang, H. Wang, & G. Chen, Acepentalene Membrane Sheet: A Metallic Two-Dimensional Carbon Allotrope with High Carrier Mobility for Lithium Ion Battery Anodes. *The Journal of Physical Chemistry C*, 124, 5999-6011, 2020.
- [9] H. T. Huang, L. Zhu, M. D. Ward, T. Wang, B. Chen, B. L. Chaloux, ... & T. A. Strobel, Nanoarchitecture through Strained molecules: Cubane-derived scaffolds and the smallest carbon nanothreads. *Journal of the American Chemical Society*, 142, 17944-17955, 2020.
- [10] M. Ou, X. Wang, L. Yu, C. Liu, W. Tao, X. Ji, & L. Mei, The Emergence and Evolution of Borophene. *Advanced Science*, 2001801, 2021.
- [11] B. Wang, Y. Sun, H. Ding, X. Zhao, L. Zhang, J. Bai, & K. Liu, Bioelectronics - Related 2D Materials Beyond Graphene: Fundamentals, Properties, and Applications. *Advanced Functional Materials*, 30, 2003732, 2020.
- [12] Z. Li, L. Wang, Y. Li, Y. Feng, & W. Feng, Carbon-based functional nanomaterials: Preparation, properties and applications. *Composites Science and Technology*, 179, 10-40, 2019.
- [13] L. Bai, Y. Zhang, W. Tong, L. Sun, H. Huang, Q. An, ... & P. K. Chu, Graphene for energy storage and conversion: synthesis and interdisciplinary applications. *Electrochemical Energy Reviews*, 3, 395-430, 2020.
- [14] Z. Zhang, Y. Ouyang, Y. Cheng, J. Chen, N. Li, & G. Zhang, Size-dependent phononic thermal transport in low-dimensional nanomaterials. *Physics Reports*, 860, 1-26, 2020.

Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 26, 1-8, 2020.

[22] Z. Jokar, & M. R. Moslemi, Effects of position and shape of atomic defects on the band gap of graphene nano ribbon superlattices. International Journal of Electronics and Communication Engineering, 9, 162-166, 2015.

[23] L. Rosales, M. Pacheco, Z. Barticevic, A. León, A. Latgé, & P. A. Orellana, Transport properties of antidot superlattices of graphene nanoribbons. Physical Review B, 80, 073402, 2009.



The electronic properties of armchair graphene nanoribbons defected by different shapes of quantum antidots

R. Kalami, S.A. Ketabi*

Department of physics, School of physic, Damghan University, Damghan , Iran

Abstract: In this paper, the electronic properties of AGNRs defected by quantum antidots is studied. The defected AGNRs are modeled by imposing linear, diagonal, triangle, hexagonal and symmetric, and asymmetric rhomboid arrays of antidots in the middle of pristine nanoribbons which lead to antidot super-lattice of AGNRs. It can be realized that the quantum confinement of nanoribbons is quite changed by the presence of defects. This quantum confinement results in novel electronic properties like the band structure, and transmission function. It can be realized that two critical factors play important roles in changing the electronic properties of ASiNRs defected by quantum antidot arrays: The first one is the number of atoms extracted, and the other one is the symmetric or asymmetric arrays of the defects. Our results indicate that in the band structure of nanoribbons defected by quantum antidots, the flat bands have been created in the band structure of the system, so the degenerate electronic states and the accessible states increased too. Symmetrical quantum antidot arrays have closer electronic properties to pristine ASiNRs. Therefore, by selecting the number of extracted atoms, as well as the symmetry or asymmetry of the shape, the electronic properties of the system can be changed. In addition, the electronic properties of nanoribbons are investigated by the distance between two adjacent antidots(d). Finally, one can extracted that the electronic properties of armchair graphene nanoribbons can be tuned by changing dimensional parameters. Numerical tight-binding model, coupled with the non-equilibrium Green's function formalism are applied to extract the electronic properties of nanoribbons.

Keywords: Graphene, Quantum antidot, Quantum confinement, Band structure, Transmission function