

هدایت گرمایی دینامیکی گرافین دولایه نوع AB در حضور ولتاژ بایاس و تزریق الکترون: رهیافت تابع گرین

محسن یارمحمدی^۱ | حامد رضانیا^{۲*}

۱- دانشکده فیزیک، مرکز تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان
۲- دانشکده فیزیک، دانشگاه رازی کرمانشاه، کرمانشاه

چکیده

مکانیکی، خواص گرمایی گرافین دولایه در سطح میکروسکوپی اندازه‌گیری نمی‌شوند. خواص الکتریکی گرافین دولایه با تزریق الکترون و ولتاژ بایاس کنترل می‌شوند. در مقاله حاضر، اثر تزریق الکترون و ولتاژ بایاس روی هدایت گرمایی دینامیکی نوع AB گرافین دولایه بررسی شده است. رهیافت تابع گرین برای محاسبه هدایت گرمایی دینامیکی مورد استفاده قرار می‌گیرد. سپس از نظریه پاسخ خطی که رسانش گرمایی را براساس تابع همبستگی جریان-جریان گرمایی می‌نویسد، نتایج عددی این کمیت براساس رفتار پتانسیل شیمیایی، ولتاژ بایاس و دما بدست می‌آید [۴، ۵].

۲ مدل‌سازی

گرافین دولایه که از دو گرافین تک لایه مشابه تشکیل شده است را در نظر می‌گیریم [۶]. به منظور استخراج خواص الکترونی، ابتدا باید ساختار نواری را بررسی و تابع گرین AB گرافین دولایه الکترونی را بدست آوریم طبق ساختار شبکه لانه زنبوری، هر لایه دارای دو اتم مشابه A و B مشخص شده‌اند. این ساختار در شکل ۱ نشان داده شده است. بردار واحد یک تک لایه به صورت زیر می‌باشد: $(\hat{i}$ و \hat{j} به ترتیب بردار یک‌ه در جهت x و y هستند و $a_1 = a_2 = \sqrt{3}a_e = \sqrt{3}a$ که a_e فاصله نزدیکترین کربن‌ها می‌باشد).

$$a_1 = a\hat{j}, \quad a_2 = \frac{a}{2}(-\hat{j} + \sqrt{3}\hat{i}) \quad (1)$$

برای چینش AB یک اتم A(B) در لایه‌ی بالاتر دقیقاً روی مرکز شبکه لانه زنبوری در لایه‌ی پایین‌تر قرار می‌گیرد. در مدل تنگ-بست تحت تقریب پرش بین نزدیکترین همسایگان، هامیلتونی به صورت زیر می‌باشد:

رفتار هدایت گرمایی گرافین دولایه نوع AB که الکترون به آن تزریق شده است و تحت ولتاژ بایاس قرار گرفته است بعنوان تابعی از بسامد فوتونی را با استفاده از مدل هامیلتونی تنگ-بست بررسی کرده‌ایم. در این تحقیق، گرادیان دما وابسته به بسامد در نظر گرفته شده است. هدایت حرارتی این دستگاه با استفاده از رهیافت تابع گرین در تقریب پاسخ خطی کوبو مورد بررسی قرار گرفته است. بسته به نواحی متفاوت بسامد، رفتارهای مختلفی برای هدایت گرمایی دیده می‌شود. همچنین وابستگی هدایت گرمایی دینامیکی به ولتاژ بایاس و دما بررسی شده است. با افزایش پتانسیل شیمیایی، ولتاژ بایاس و دما هدایت گرمایی دینامیکی سیستم کاهش یافته است، در صورتیکه با افزایش بسامد، این کمیت در پتانسیل بایاس و دمای بالا دارای یک افت وخیز نسبی می‌باشد.

واژگان کلیدی: هدایت گرمایی دینامیکی؛ گرافین دولایه؛ تابع گرین.

۱ مقدمه

در گرافین، به دلیل طیف الکترونی منحصربه‌فرد آن، رسانش الکتریکی در نقطه‌ی دیراک^۱ دارای یک کمینه $\frac{4e^2}{h}$ است [۱]. این موضوع استفاده از ماده فوق را در قطعات الکترونیکی دشوار کرده است. به این خاطر از گرافین دولایه که این مشکل را ندارد استفاده می‌شود [۲]. خواص گرمایی گرافین از موضوعات مورد علاقه محققان است و یک بحرانی در کنترل اجرا و پایداری لوازم گرافینی از خود نشان می‌دهد [۲، ۳]. بر خلاف خواص الکتریکی و

1. Dirac

که α و β می‌تواند مقادیر (A_1, B_1, A_2, B_2) را اختیار کند و τ زمان موهومی است. $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$ بسامد ماتسوبارای فرمیونی می‌باشد. تابع گرین در حالت بدون تزریق ناخالصی به صورت زیر بدست می‌آید:

$$G_0(k, i\omega_n) = \frac{1}{(i\omega_n + \mu)I - H_0(k)} \quad (5)$$

با یک تحلیل ساده و استفاده از $i\omega_n \rightarrow \omega + \dot{\nu}^+$ هدایت گرمایی دینامیکی گرافین دولایه در حضور ولتاژ بایاس و تزریق الکترون در چارچوب مدل تنگ-بست به صورت تابعی از بسامد در دماهای مختلف بدست می‌آید.

انرژی و هدایت گرمایی دینامیکی

هدایت گرمایی که به صورت پاسخ جریان گرمایی به یک گرادیان دمایی توصیف می‌شود، از نظریه کوبو محاسبه می‌شود. در این کار گرادیان دمایی، تابعی از بسامد الکترونی می‌باشد که در نهایت هدایت گرمایی دینامیکی بدست می‌آید. به منظور بدست آوردن فرم عملگری جریان گرمایی از معادله پیوستگی به صورت $(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot J^E = 0)$ استفاده می‌شود. برای این منظور از تعریف یک تابع کمکی به صورت زیر بهره می‌گیریم:

$$R_E = \sum_i R_i h_i \quad (6)$$

در رابطه بالا h_i هامیلتونی دستگاه الکترونی مورد نظر می‌باشد که بصورت زیر نمایش داده می‌شود:

$$h_i = \sum_{i,\delta} a_{i+\delta}^\dagger b_{i,\delta} + \gamma \sum_i (a_{i,\delta}^\dagger b_{2,i} + h.c.) + \gamma + \frac{V}{2} \sum_i (b_{1,i}^\dagger b_{1,i} + a_{1,i}^\dagger a_{1,i}) - \frac{V}{2} \sum_i (b_{2,i}^\dagger b_{2,i} + a_{2,i}^\dagger a_{2,i}) \quad (7)$$

و δ بردارهای اتصال دهنده اتم‌های همسایه نزدیک می‌باشد.

$$\delta_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \mathbf{j}, \quad \delta_{2,3} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left((+) \frac{1}{2} \mathbf{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{j} \right) \quad (8)$$

بر طبق معادله حرکت، عملگر جریان انرژی به صورت زیر بدست می‌آید:

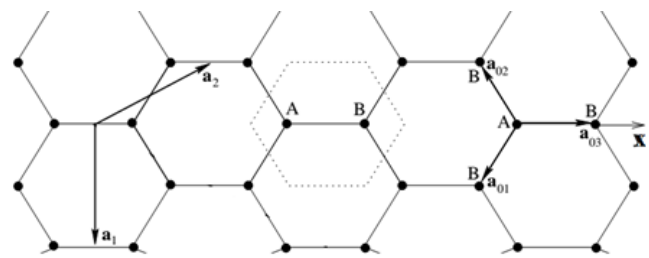
$$\mathbf{J}^E = \frac{d\mathbf{R}_E}{dt} = i[H, \mathbf{R}_E] = i \sum_{i,l} \mathbf{R}_i [h_l, h_i] \quad (9)$$

پس از جاگذاری (۷) و (۸) در معادله (۹) به رابطه زیر برای چگالی جریان گرمایی بر حسب تبدیل فوریه عملگرهای خلق و فنا به صورت زیر در می‌آید:

(۲)

$$H = -t_1 \sum_{i,\delta} (b_{i+\delta}^\dagger a_{i,\delta} + h.c.) + \gamma \sum_i (a_{1,i}^\dagger b_{2,i} + h.c.) + \frac{V}{2} \sum_i (b_{1,i}^\dagger b_{1,i} + a_{1,i}^\dagger a_{1,i}) - \frac{V}{2} \sum_i (b_{2,i}^\dagger b_{2,i} + a_{2,i}^\dagger a_{2,i})$$

در این حالت دو صفحه با ۱ و ۲ مشخص می‌شوند. در رابطه‌ی بالا I شماره‌ی صفحه و t_{\parallel} دامنه‌ی پرش درون لایه‌ای می‌باشد. یک الکترون را در سایت ایجاد (نابود) می‌کند. δ یکی از سه بردار (a_0, a_0, a_0) که در شکل ۱ نشان داده شده است، می‌باشد. دامنه‌ی پرش بین لایه‌ای از اتم A(B) یک لایه به نزدیکترین اتم A(B) لایه دیگر $\gamma = 0.4eV$ می‌باشد V نیز اختلاف انرژی پتانسیل بین دولایه ناشی از اعمال ولتاژ بایاس می‌باشد.



شکل ۱ شبکه گرافین تک لایه

با استفاده از تبدیل فوریه و در نظرگرفتن بردار آفریننده‌ی فرمیونی به صورت $\phi_k^\dagger = (a_{1,k}^\dagger, b_{2,k}^\dagger, a_{2,k}^\dagger, b_{1,k}^\dagger)$ شکل ماتریسی تبدیل فوریه هامیلتونی معادله (۲) به صورت زیر می‌باشد:

$$H_0(k) = \begin{pmatrix} \frac{V}{2} & f(\mathbf{k}) & \gamma & 0 \\ f^*(\mathbf{k}) & \frac{V}{2} & 0 & \gamma \\ 0 & 0 & -\frac{V}{2} & f(\mathbf{k}) \\ \gamma & 0 & f^*(\mathbf{k}) & -\frac{V}{2} \end{pmatrix} \quad (3)$$

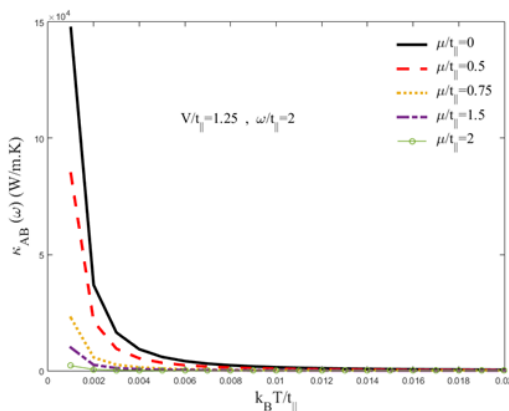
که $f(\mathbf{k}) = -t_{\parallel}(1 + e^{ik \cdot a_1} + e^{ik \cdot a_2})$ است. با توجه به اینکه سلول واحد گرافین دولایه چهاراتمی است، تابع گرین به صورت یک ماتریس 4×4 نوشته می‌شود. در نمایش ماتسوبارا هر عنصر تابع گرین و تبدیل فوریه‌ی آن به صورت زیر می‌باشد [۹]:

$$G_{\beta} (k, \tau) = \langle T_{\tau} c_{k,\alpha} (\tau) c_{k,\beta}^{\dagger} (\tau) \rangle$$

$$G_{\beta} (k, i\omega_n) = \int_0^{\beta} e^{i\omega_n \tau} G_{\beta} (k, \tau) \quad (4)$$

۳ نتایج و بحث

در نتایج بدست آمده با استفاده از حل عددی، پارامتر پرش بین نزدیکترین همسایه ها ۱ در نظر گرفته شده است، بنابراین پارامترهای دیگر در مدل هامیلتونی به صورت $\gamma_{a(b)}/t_1, V/t_1, \mu/t_1, k_B T/t_1, \omega/t_1$ در نظر گرفته شده است. در شکل ۲ هدایت گرمایی درون صفحه ای بر حسب پتانسیل شیمیایی برای مقادیر متفاوت ولتاژ بایاس ($V/t_1 = 0, 0.5, 0.3$) در بسامد ثابت $\omega/t_1 = 2$ رسم شده است. این شکل نشان می دهد که هدایت گرمایی با افزایش تعداد الکترون ناشی از تزریق الکترون برای همه مقادیر ولتاژ بایاس کاهش می یابد. در نزدیکی نقطه دیراک $\mu/t_1 = 0$ دوباره مشخصه های یک نیم رسانا نمایان می شود، همچنین این شکل نشان می دهد که برای $\mu/t_1 > 1$ هدایت گرمایی صفر می شود که پراکندگی ناشی از افزایش جمعیت الکترونی دلیل اصلی آن می باشد. در شکل ۳ هدایت گرمایی بر حسب دما برای مقادیر متفاوت ولتاژ بایاس ($\mu/t_1 = 0, 0.5, 0.3, 1.5, 2$) در بسامد ثابت $\omega/t_1 = 2$ رسم شده است که یک وابستگی ضعیف به پتانسیل شیمیایی در $k_B T/t_1 > 0.016$ دارد و برای $\mu/t_1 > 1$ صفر می شود که افزایش جمعیت الکترونی همراه با افزایش نرخ پراکندگی با افزایش پتانسیل شیمیایی موجب کاهش هدایت گرمایی می شود. این نتایج با کار نظری انجام شده در [۶] همخوانی دارد و از طرفی به دلیل اینکه در دمای بالا کار می کنیم، اثرات کوانتومی تقریباً حذف می شوند و کاهش داریم. اثر بسامد ناشی از گرادیان دمایی روی هدایت گرمایی گرافین دولایه نوع AB در حضور پتانسیل شیمیایی $\mu/t_1 = 1$ در شکل (۴) بررسی شده است. از آنجاییکه با افزایش انرژی الکترون ها، دامنه افت وخیز نسبی ذرات هنگام ترابرد تغییر می کند، هدایت گرمایی کاهش می یابد و در بسامدهای خیلی بالا عملاً هدایت گرمایی متاثر نمی شود.



شکل ۳ | هدایت گرمایی دینامیکی گرافین دولایه نوع AB بر حسب دما برای مقادیر متفاوت تزریق الکترون در ولتاژ بایاس و بسامد ثابت.

(۱۰)

$$\mathbf{J}_x^E = \mathbf{i} \sum_{k,\sigma} \mathbf{i} \mathbf{R}_i b_{k,\sigma}^{\dagger} b_{k,\sigma} e^{k \cdot \mathbf{R}_i} - \mathbf{i} \sum_{k,\Delta} \mathbf{i} \Delta' (e^{k \cdot \Delta'} a_{1,k}^{\dagger} a_{2,k} - e^{-k \cdot \Delta'} a_{2,k}^{\dagger} a_{1,k} + e^{k \cdot \Delta'} b_{2,k}^{\dagger} b_{1,k} - e^{-k \cdot \Delta'} b_{1,k}^{\dagger} b_{2,k})$$

بطوریکه R_i به عنوان چهار بردار اصل به نزدیکترین همسایگان سلول واحدی به صورت $R_{i=1,2,3,4} = \pm(\pm\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{i} + \frac{1}{2}\mathbf{j})$ می باشد. با استفاده از قانون پیوستگی بار نیز رابطه ای برای شکل عملگری چگالی جریان باری بدست می آوریم. نتیجه نهایی برای جریان الکتریکی به صورت زیر در می آید:

$$\mathbf{J}_x^e = -\mathbf{i} \sum_{i,\sigma,\delta} \mathbf{i} \cdot \delta (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta} a_{k,\sigma}^{\dagger} b_{k,\sigma} - e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta} b_{k,\sigma}^{\dagger} b_{k,\sigma}) \quad (11)$$

جریان گرمایی با استفاده از روابط (۱۰) و (۱۱) از رابطه $\mathbf{J}^Q = \mathbf{J}^E + \mu \mathbf{J}^e$ بدست می آید. نظریه خطی کوبو ضرایب ترابری را بصورت زیر نتیجه می دهد:

$$L_b(\omega) = \frac{1}{\beta} \lim_{i\omega_n \rightarrow \omega + b^+} \int_0^{\infty} d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau (J_x^a(\tau) J_x^b(0)) \rangle \quad (12)$$

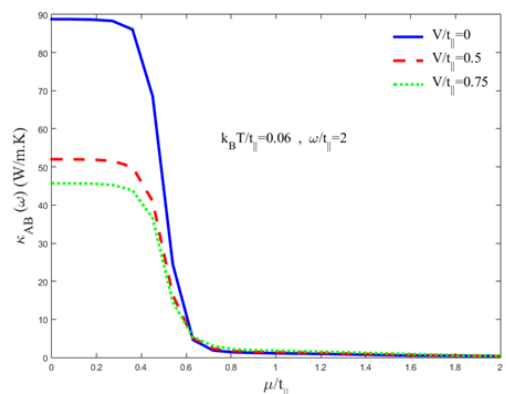
با استفاده از روابط عملگری، چگالی جریان ها و قضیه لهن و همچنین بهره گیری از قضیه ویک، نتایج زیر برای عناصر ماتریس ترابری بدست می آید [۹، ۱۰]:

- در حضور گرادیان دمایی غیریکنواخت $\nabla T(\omega)$ و در وضعیت مداری باز، جریان گرمایی به گرادیان دما از طریق $J(\omega) = -\kappa(\omega) \nabla T(\omega)$ وابسته می شود.

- ضریب هدایت گرمایی از طریق عبارت زیر به عناصر ماتریس ترابری وابسته می شود.

$$\kappa(\omega) = \frac{1}{T^2} (L_2 - \frac{L_1^2}{L_1}) \quad (13)$$

در بخش بعد، نتایج عددی هدایت گرمایی دینامیکی برای گرافین دولایه نوع AB بیان می شود.

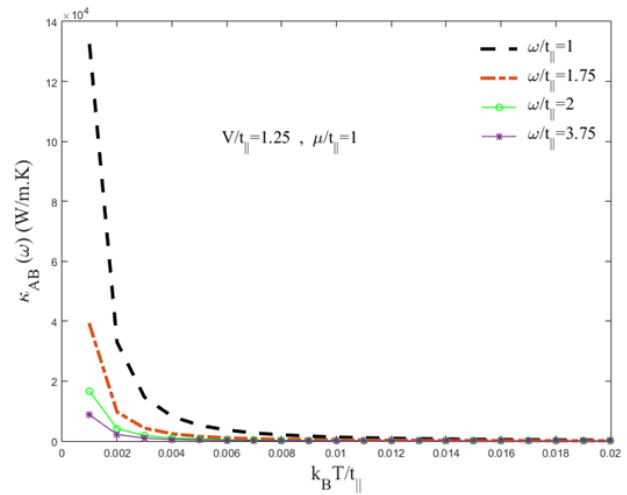


شکل ۴ | هدایت گرمایی دینامیکی گرافین دولایه نوع AB بر حسب پتانسیل شیمیایی برای مقادیر متفاوت ولتاژ بایاس در دما و بسامد ثابت.

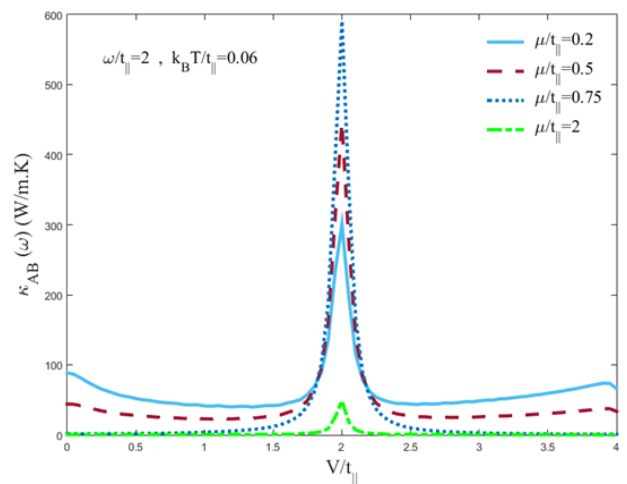
۴ نتیجه‌گیری

در این مقاله هدایت گرمایی دینامیکی گرافین دو لایه نوع AB در حضور ولتاژ بایاس و تزریق الکترون در راستای x بررسی شده‌است که از رهیافت تابع گرین با محاسبه تابع جریان-جریان و مدل تنگ-بست استفاده کردیم. به عبارتی تأثیر جذب انرژی فوتون فرودی توسط الکترون‌های تراپردی در هدایت گرمایی سیستم بررسی شد. وابستگی هدایت گرمایی دینامیکی به ولتاژ بایاس اعمالی ناشی از گیت و دمای ناشی از دو منبع دمای سرد و گرم مورد بررسی قرار گرفت. با افزایش پتانسیل شیمیایی، ولتاژ بایاس و دما، هدایت گرمایی دینامیکی سیستم کاهش یافته است، در صورتیکه با افزایش بسامد این کمیت در پتانسیل بایاس بالا و دمای بالا دارای یک افت وخیز نسبی می‌باشد.

در دماهای پایین، دما به برانگیختگی الکترون‌ها از نوار ظرفیت به رسانش کمک می‌کند و به عنوان یک پارامتر مؤثر بخاطر کاهش پراکندگی الکترونی، در افزایش هدایت گرمایی مطرح می‌شود. همانطور که دیده می‌شود، اثر پراکندگی الکترون‌ها در اثر تزریق الکترون منجر به کاهش هدایت گرمایی در همه‌ی دماها می‌شود. ویژگی دیگر منحنی‌ها تفاوت بین رفتار هدایت گرمایی با افزایش مقدار ولتاژ بایاس می‌باشد. شکل ۵ نشان می‌دهد که هدایت گرمایی با افزایش ولتاژ بایاس کاهش می‌یابد و در $V/t_{\parallel} = 2$ شاهد یک قله هستیم، این نتیجه از این حقیقت ناشی می‌شود که اعمال ولتاژ بایاس و میدان الکتریکی باعث ایجاد گاف در طیف و برانگیختگی سیستم می‌شود.



شکل ۴ | هدایت گرمایی دینامیکی گرافین دولایه نوع AB بر حسب دما برای مقادیر متفاوت تزریق الکترون در ولتاژ بایاس و پتانسیل شیمیایی ثابت.



شکل ۵ | هدایت گرمایی دینامیکی گرافین دولایه نوع AB بر حسب ولتاژ بایاس برای مقادیر متفاوت تزریق الکترون در دما و بسامد ثابت.

مراجع

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. and Dubonos, I. V Grigorieva, and A. A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films," *Science* (80)., vol. 306, no. 5696, pp. 666–669, 2004.
- [2] E. McCann and V. I. Fal'ko, "Landau-level degeneracy and quantum Hall effect in a graphite bilayer," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, no. 8, p. 86805, 2006.
- [3] E. McCann, "Asymmetry gap in the electronic band structure of bilayer graphene," *Phys. Rev. B*, vol. 74, no. 16, p. 161403, 2006.
- [4] M. I. Katsnelson, "Scattering of charge carriers by point defects in bilayer graphene," *Phys. Rev. B*, vol. 76, no. 7, p. 73411, 2007.
- [5] L. Hao and T. K. Lee, "Thermopower of gapped bilayer graphene," *Phys. Rev. B*, vol. 81, no. 16, p. 165445, 2010.
- [6] J. Nilsson, A. H. C. Neto, F. Guinea, and N. M. R. Peres, "Transmission through a biased graphene bilayer barrier," *Phys. Rev. B*, vol. 76, no. 16, p. 165416, 2007.
- [7] Y. Xu, X. Li, and J. Dong, "Infrared and Raman spectra of AA-stacking bilayer graphene," *Nanotechnology*, vol. 21, no. 6, p. 65711, 2010.
- [8] I. Lobato and B. Partoens, "Multiple Dirac particles in AA-stacked graphite and multilayers of graphene," *Phys. Rev. B*, vol. 83, no. 16, p. 165429, 2011.
- [9] G. D. Mahan, *Many-particle physics*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [10] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems*. Courier Corporation, 2003.

Dynamical Thermal Conductivity of Biased and Doped AB-Stacked Bilayer Graphene: Green's Function Approach

M. Yarmohammadi¹ | H. Rezania^{2*}

1. Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan

2. Department of Physics, Razi University, Kermanshah

Abstract

We have investigated the behavior of dynamical thermal conductivity of doped biased bilayer graphene for AB-stacking as a function of frequency in the context of tight-binding model Hamiltonian. In this work, it has considered frequency dependence of temperature gradient. Green's function approach has been implemented to find the behavior of thermal conductivity of bilayer graphene within Kubo linear response theory. Different behaviors have been seen for thermal conductivity due to different frequency. Also thermal conductivity versus bias and temperature has investigated. Dynamical thermal conductivity decreases with chemical potential, bias voltage and temperature, while it has a relative fluctuation with frequency at high bias voltage and high temperature.

Keywords

Dynamical thermal conductivity; Bilayer graphene; Green's function.