

# SID



سرویس های ویژه



سرویس ترجمه تخصصی



کارگاه های آموزشی



بلاگ مرکز اطلاعات علمی



سامانه ویراستاری STES



فیلم های آموزشی

## کارگاه های آموزشی مرکز اطلاعات علمی



مقاله نویسی علوم انسانی



اصول تنظیم قراردادها



آموزش مهارت های کاربردی در تدوین و چاپ مقاله

## ترابرد الکترونی نانو نوار گرافین با ناخالصی اتم بور

سعیدفیروزه<sup>۱</sup>، هما<sup>۱</sup>؛ شفیعی خانی<sup>۲</sup>، عزیزاله<sup>۳</sup>

<sup>۱</sup> دانشگاه آزاد اسلامی، واحد تهران شمال، باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان، تهران، ایران

<sup>۲</sup> گروه فیزیک، دانشگاه الزهراء، تهران

<sup>۳</sup> پژوهشکده فیزیک، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی، تهران

### چکیده

در این پژوهش به بررسی خواص ترابرد الکترونی نانو نوارهای گرافینی با لبه‌ی آرمچیر (AGNRs) با ایجاد ناخالصی اتم بور در جایگاه‌های متفاوت با استفاده از روش تابع گرین غیر تعادلی همراه با محاسبات اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی پرداخته شده است. در ساختار نواری تمامی حالات، گاف موجود در سطح فرمی نانو نوار گرافینی لبه آرمچیر اولیه از بین رفته و تراز ناخالصی در سطح فرمی قابل مشاهده است. بعلاوه کوانتیزه بودن تابع ترابرد الکترونی برای حالات دارای ناخالصی نسبت به حالت اولیه کمتر است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد برای نانو نوار گرافینی دارای ناخالصی در تمامی جایگاه‌های مورد بررسی در ولتاژهای کمتر از  $1.6V$  رسانش بیشتر است.

## Electron transfer on boron atom doped Graphene Nanoribbon

SaeidFirozeh, Homa<sup>1</sup>; Shafiekhani, Azizollah<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> Young Researchers and Elites Club, North Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.

<sup>2</sup> Physics Dept., Alzahra University, Tehran, 19938-91167, Iran.

<sup>3</sup> School of Physics, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), P.O.Box: 19395-5531, Tehran, Iran.

### Abstract

*In this research we performed electronic transport properties in armchair shaped edges graphene nanoribbons (AGNRs) doped boron impurities in various position have been simulated by the non-equilibrium green's function approach combined with the first principle calculation based on the density functional theory. In the band structure for all various position, gap exists in the initial armchair graphene nanoribbons disappears and impurity levels in the Fermi surface observed. Furthermore quantization of transmission function is moderated for doped ANGRs. The result shows that AGNRs doped impurities at voltage less than 1.6V have higher conductance than the non-doped one.*

PACS No. 72.00

فلزی است، حال آنکه نانو نوارهای گرافینی بسته شکل لبه‌ی آنها می‌توانند خاصیت فلزی یا نیمه رسانا داشته باشند [۱-۳]. خواص الکترونی نانو نوارهای گرافینی به وسیله پهنا و شکل لبه‌ها کنترل می‌شود [۲، ۳]. در لایه گرافین شکاف انرژی وجود ندارد بنابراین در سطح فرمی نوارهای انرژی والانس و رسانش حضور دارند. از سوی دیگر، در نانو نوارهای گرافینی با لبه‌ی آرمچیر شکل (AGNR) به علت وجود اثر حبس کوانتومی در راستای عرض، شکاف انرژی به وجود می‌آید و در نتیجه خاصیت نیمه رسانا از خود نشان می‌دهد. شکاف انرژی در نانو نوارها با لبه‌ی آرمچیر

### مقدمه

در دهه‌ی گذشته مطالعات گسترده‌ای در زمینه گرافین به علت خواص فیزیکی منحصر به فرد آن، که ناشی از ساختار دو بعدی لانه زنبوری شکل آن، صورت گرفته است [۱]. نانو نوارهای گرافینی (GNRs) در رأس مطالعات به عنوان یک تک لایه گرافینی با اندازه و پهنای نانومتری و لبه‌های آرمچیر<sup>۱</sup> و زیگزاگ<sup>۲</sup> شکل قرار دارند. لایه گرافین به صورت ذاتی دارای خاصیت نیمه

<sup>1</sup> Armchair shaped edges (AGNR)

<sup>2</sup> Zigzag shaped edges (ZGNR)

همانطور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود برای جلوگیری از اثرات الکترون‌های آویزان<sup>۶</sup>، لبه نوارها با اتم هیدروژن پوشانده شده است. به منظور ایجاد حالت پایدار در نرم افزار سی استا از الگوریتم گرادیان مزدوج<sup>۷</sup> که معیار همگرایی انرژی است استفاده می‌کنیم به گونه‌ای که از امواج تخت با انرژی کمتر از 400 eV صرف نظر و مقدار کل فشار وارد بر هر اتم کمتر از 0.04 eV/Å باشد. همچنین برای قسمت الکترودها نیز در هر دو سمت نوارهای گرافینی با لبه آرمچیر در نظر گرفته شده است. سپس برای محاسبه ترابرد الکترونی از نرم افزار ترنسی استا<sup>۸</sup> که مبتنی بر روش تابع گرین غیر تعادلی همراه با محاسبات اصول اولیه تابعی چگالی، استفاده شده است. برای محاسبات تابع گرین غیر تعادلی سه ناحیه، الکترودهای راست و چپ و ناحیه اتصال در نظر گرفته می‌شود.

در تقریب تابع گرین غیر تعادلی، تابع گرین در انرژی E بعد از بدست آمدن هامیلتونی (H) توسط نرم افزار سی استا به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$G(E) = (E - H)^{-1} \quad (1)$$

با در نظر گرفتن قسمت غیر تعادلی، ولتاژ به صورت اختلاف پتانسیل شیمیایی الکترودهای چپ و راست ( $V(V) = \mu_L - \mu_R$ ) تعریف می‌شود. ترابرد از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$T(E) = \text{tr} [t^\dagger t] (E) \quad (2)$$

$$= \text{tr} [\Gamma_L(E) G^\dagger(E) \Gamma_R(E) G(E)]$$

که ماتریس دامنه انتقال آن به صورت

$$t(E) = \Gamma_R(E)^{1/2} G(E) \Gamma_L(E)^{1/2} \quad (3)$$

$$\Gamma_{L,R} \equiv i \left[ \Sigma_{L,R}(E) - \Sigma_{L,R}^\dagger(E) \right] / 2 \quad (4)$$

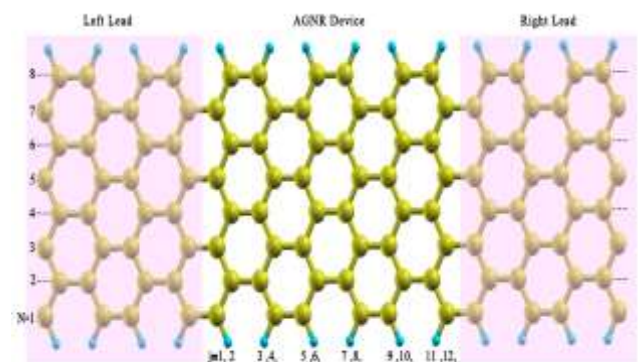
در اینجا  $\Sigma_{L,R}(E)$  خود انرژی الکترودهای چپ و راست است. در آخر جریان برحسب ترابرد به صورت زیر بدست می‌آید.

$$I = \frac{2e^2}{h} \int_{\mu_L}^{\mu_R} d\varepsilon [n_F(\varepsilon - \mu_L) - n_F(\varepsilon - \mu_R)] T(\varepsilon) \quad (5)$$

شکل می‌تواند توسط پهنای نوار کنترل شود. اگر تعداد اتم‌های کربن موجود در پهنای نانو نوارهای آرمچیر را با N نشان دهیم برحسب اندازه شکاف انرژی به سه دسته کلی تقسیم می‌شوند. دسته اول که شکاف انرژی کوچکی دارند و به صورت  $N=3m-1$  نمایش داده می‌شوند، دسته دوم  $N=3m$  شکاف متوسط دارند، و دسته آخر  $N=3m+1$  که بزرگترین شکاف را دارا می‌باشند (در اینجا m عدد صحیح است). شکاف انرژی هر دسته با افزایش m کاهش پیدا می‌کند و در آخر زمانی که  $m \rightarrow \infty$  به صفر میل می‌کند. برای کاربرد در وسایل گوناگون ایجاد ناخالصی در نیمه رساناها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. انتظار می‌رود که ایجاد ناخالصی عملکردهای گوناگون و خواص فیزیکی جالبی را برای کاربرد در دستگاه‌های جدید ساخته شده از مواد مبتنی بر کربن داشته باشد [۴، ۵].

## روش شبیه سازی

محاسبات ساختار الکترونی توسط روش اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی انجام شده است. برای این منظور از بسته نرم افزاری سی استا<sup>۳</sup> [۶] استفاده شده است. برای پتانسیل تبدیلی-همبستگی از پارامتر PBE<sup>۴</sup> استفاده شد [۷، ۸]. هسته‌های اتمی توسط شبه پتانسیل‌های بقای نرم<sup>۵</sup> ترولیر-مارتینز که توابع غیر موضعی هستند در فرم کلینمن-بایلندر [۹] در نظر گرفته می‌شوند.



شکل ۱: مدل ساختاری بهینه شده حالت اولیه دستگاه نانو نوارهای آرمچیر با ۸ اتم کربن در عرض (به ترتیب الکترودهای راست، ناحیه پراکندگی و الکترودهای چپ).

<sup>6</sup> Dangling bonds

<sup>7</sup> CG ( Conjugate gradient)

<sup>8</sup> TRANSIESTA

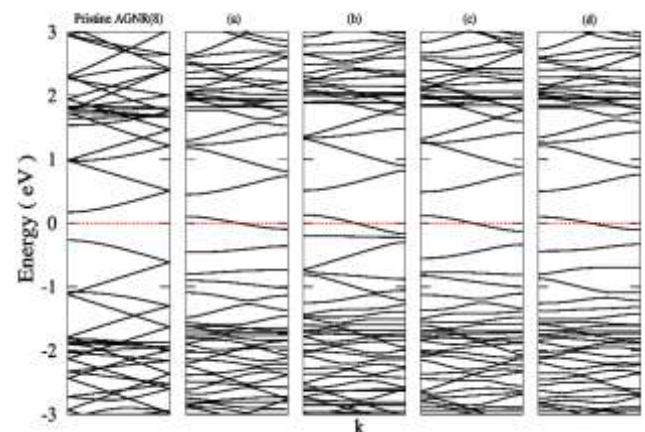
<sup>3</sup> SIESTA

<sup>4</sup> PBE ( Perdew, Burke and Ernzerhof)

<sup>5</sup> Norm-conserving

## محاسبات و بررسی نتایج

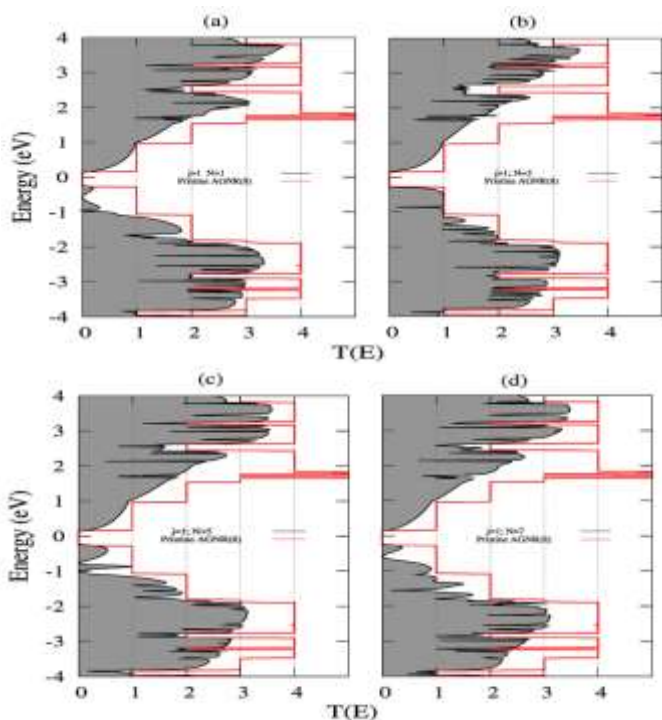
در این شبیه سازی برای قسمت الکتروود دو سلول اولیه نانو نوار گرافینی با لبهی آرمچیر شکل با ۸ اتم کربن در عرض (یعنی  $N=8$ ) در نظر گرفته شده است. الکتروودها به صورت نیمه نامحدود<sup>۹</sup> هستند و از یک طرف به ناحیهی پراکندگی محدود مرکزی اتصال دارند. در قسمت پراکندگی نیز ۳ سلول اولیه در نظر گرفته شده است که ناخالصی‌های بور همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده در ستون  $j=1$  و ردیف‌های  $N=1,3,5,7$  جانشین شده‌اند. به این ترتیب اثر جانشینی اتم بور در جایگاه‌های متفاوت را در ترابرد مورد بررسی قرار می‌دهیم. در شکل ۲ برای حالت اولیه (Pristine ANGR(8)) پایین‌ترین نوار رسانش و بالاترین نوار ظرفیت که به ترتیب ناشی از حالت‌های  $\pi^*$  و  $\pi$ ، نشان داده شده است.



شکل ۲: نمودار ساختار نواری نانو نوارهای گرافینی با لبهی آرمچیر شکل در حالت اولیه ایده‌آل و به ترتیب با جانشینی اتم بور در جایگاه‌های ۱، ۳، ۵ و ۷.

برخلاف گرافین ایده‌آل دویعدی که نوارهای  $\pi^*$  و  $\pi$ ، در مرز نواحی بریلوئن یکدیگر را قطع می‌کنند، نانو نوارهای گرافینی با لبهی آرمچیر شکل ( $N=8$ ) از جمله مواد با گاف مستقیم با انرژی گاف  $0.2\text{eV}$  هستند [۱۱]. در نمودار ترابرد برای ولتاژ صفر حالت اولیه، نیز که با رنگ قرمز در شکل ۳ مشخص شده است یک گاف با اندازه  $0.2\text{eV}$  در سطح فرمی دیده می‌شود که مطابق گاف موجود در نمودار نوارهای انرژی است.

<sup>۹</sup> Semi-infinite



شکل ۳: نمودار ترابرد الکترونی بر حسب انرژی در ولتاژ صفر. خطوط مشخص شده با رنگ قرمز بیانگر ترابرد الکترونی نانو نوارهای گرافینی آرمچیر اولیه ایده‌آل است و خطوط سیاه مربوط حالت‌های جانشینی ناخالصی اتم بور به طوری که (a) ناخالصی در  $j=7$  و  $N=1$ ، (b) ناخالصی در  $j=7$  و  $N=3$ ، (c) ناخالصی در  $j=7$  و  $N=5$ ، (d) ناخالصی در  $j=7$  و  $N=7$ .

همانطور که در شکل ۲ (a-d) دیده می‌شود ترازهای ناخالصی که توسط الکترون‌های والانس اتم بور جانشین شده در شبکه ایجاد می‌شوند، برای تمامی جایگاه‌های متفاوت ایجاد ناخالصی در سطح فرمی وجود دارد. انرژی فرمی برای حالت ایده‌آل اولیه  $0.9405\text{eV}$  بود حال آنکه با ایجاد ناخالصی بور در ساختار آن اندکی کاهش می‌یابد. در سه جایگاه  $N=1,5,7$  در سطح فرمی رفتار مشابهی را مشاهده می‌کنیم (شکل ۲) و اختلاف انرژی فرمی از مرتبه  $0.01\text{eV}$  است. اما در جایگاه  $N=3$  در سطح فرمی مشاهده می‌کنیم تراز ناخالصی ایجاد شده در مرز ناحیه بریلوئن به نوار  $\pi$ ، بسیار نزدیک شده است و از طرفی انرژی فرمی ( $-6.2898\text{eV}$ ) نیز در این حالت نسبت به حالت ایده‌آل اولیه کاهش بیشتری را نشان می‌دهد.

در نمودار ترابرد بر حسب انرژی برای حالت نانو نوار گرافینی ایده‌آل اولیه یک حالت پله‌ای مشاهده می‌شود که به علت وجود

$N=3$  شاهد افزایش رسانش نسبت به حالت اولیه هستیم. که این خود با افزایشی که در نمودار ترابرد این جایگاه دیده می شود مطابقت دارد.

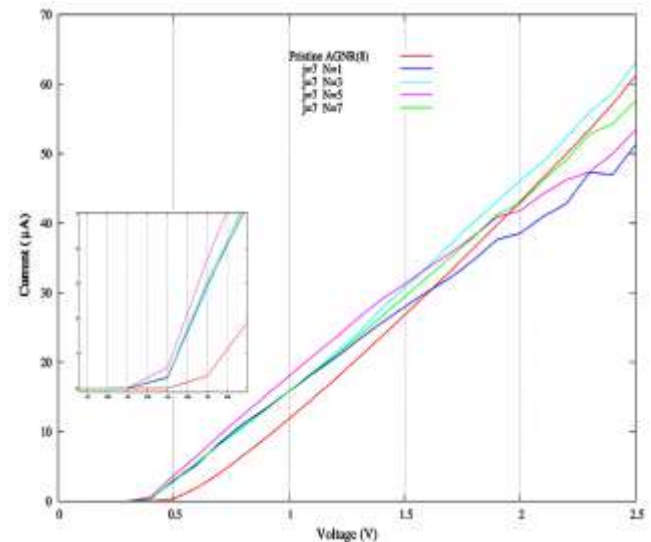
### نتیجه گیری

در این پژوهش به بررسی خواص ترابرد نانو نوارهای گرافینی با لبه ی آرمچیر شکل و ۸ اتم کربن در عرض با ایجاد اتم ناخالصی بور در جایگاه های متفاوت با استفاده از روش تابع گرین غیر تعادلی به همراه محاسبات اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی می پردازیم. در ساختار نواری تمامی جایگاه ها تراز اتم ناخالصی جانشین شده مشاهده می شود. به علاوه با ایجاد ناخالصی نمودار ترابرد حالت پله ای اولیه خود را از دست می دهد و رفتار ملایم تری از خود نشان می دهد. در نمودار جریان بر حسب ولتاژ نیز برای تمامی جایگاه های مختلف در ولتاژ کمتر از  $1.6V$  افزایش قابل توجه رسانش مشاهده می شود.

### مرجع ها

- [۱] A.C. Neto, F. Guinea, N. Peres, K. Novoselov, and A. Geim; "The electronic properties of graphene"; *Reviews of Modern Physics*. **81**, No 1 (2009) 109-162.
- [۲] S. Yu, Q. Wen, W. Zheng, and Q. Jiang; "Electronic properties of graphene nanoribbons with armchair-shaped edges"; *Molecular Simulation*. **34**, No 10-15 (2008) 1085-1090.
- [۳] Y.-W. Son, M.L. Cohen, and S.G. Louie; "Energy gaps in graphene nanoribbons"; *Physical review letters*. **97**, No 21 (2006) 216803.
- [۴] S.-S. Yu and W.-T. Zheng; "Effect of N/B doping on the electronic and field emission properties for carbon nanotubes, carbon nanocones, and graphene nanoribbons"; *Nanoscale*. **2**, No 7 (2010) 1069-1082.
- [۵] F. Khoeini, A. Shokri, and F. Khoeini; "Electronic transport through superlattice-graphene nanoribbons"; *The European Physical Journal B*. **75**, No 4 (2010) 505-509.
- [۶] J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, and D. Sánchez-Portal; "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation"; *Journal of Physics: Condensed Matter*. **14**, No 11 (2002) 2745.
- [۷] J.P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof; "Generalized gradient approximation made simple"; *Physical review letters*. **77**, No 18 (1996) 3865-3868.
- [۸] J.P. Perdew, P. Ziesche, and H. Eschrig; "Electronic structure of solids' 91"; *Akademie-Verlag, Berlin*. **91**, (1991) 11-20.
- [۹] L. Kleinman and D. Bylander; "Efficacious form for model pseudopotentials"; *Physical review letters*. **48**, (1982) 1425-1428.
- [۱۰] M. Brandbyge, J.-L. Mozos, P. Ordejón, J. Taylor, and K. Stokbro; "Density-functional method for nonequilibrium electron transport"; *Physical Review B*. **65**, No 16 (2002) 165401.
- [۱۱] M. Topsakal, V. Bagci, and S. Ciraci; "Current-voltage (IV) characteristics of armchair graphene nanoribbons under uniaxial strain"; *Physical Review B*. **81**, No 20 (2010) 205437.

کانال های رسانش ناشی از نوارها انرژی است. در صورتی که با ایجاد ناخالصی اتم بور در شبکه این رفتار پله ای روند ملایم تری را طی می کند. همانطور که در شکل (b) ۳ مشاهده می شود برای مکان  $N=3$  و  $j=7$  نسبت به سایر مکان های ایجاد ناخالصی ترابرد بیشتری بدست می آید.



شکل ۴ : نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای حالت ایده آل اولیه و حالت های جانشین شده با اتم بور که خط قرمز معرف حالت اولیه و خطوط آبی تیره، آبی روشن، بنفش و سبز به ترتیب بیانگر جانشینی ناخالصی در جایگاه ها با  $N=1,3,5,7$  می باشند.

نمودار جریان بر حسب ولتاژ برای حالت ایده آل اولیه و حالت های جانشین شده با اتم بور با استفاده از تابع ترابرد در ولتاژ محدود محاسبه شده است. بازه ای که برای ولتاژ در نظر گرفته شده از صفر تا  $2.5$  ولت است. از آنجایی که نانو نوارهای گرافینی با لبه ی آرمچیر شکل و ۸ اتم کربن در پهنا از جمله مواد نیمه رسانا محسوب می شوند آستانه ایجاد جریان برای آن در حدود  $0.4V$  قرار دارد. همانطور که در قسمت بزرگ شده شکل ۴ دیده می شود با ایجاد ناخالصی بور در جایگاه های متفاوت در ساختار ایده آل اولیه مقدار جریان در پتانسیل آستانه افزایش می یابد. از طرفی این افزایش جریان آستانه برای مکان  $j=7$  و  $N=5$  که با رنگ صورتی در شکل مشخص شده است بیشترین مقدار را دارا می باشد. از طرف دیگر مشاهده می شود با ایجاد ناخالصی اتم بور در تمام جایگاه های ذکر شده در ولتاژهای کمتر از  $1.6V$  رسانش همواره افزایش می یابد و برای پتانسیل های بیشتر فقط در جایگاه  $j=7$  و

# SID



سرویس های ویژه



سرویس ترجمه تخصصی



کارگاه های آموزشی



بلاگ مرکز اطلاعات علمی



سامانه ویراستاری STES



فیلم های آموزشی

## کارگاه های آموزشی مرکز اطلاعات علمی



مقاله نویسی علوم انسانی



اصول تنظیم قراردادها



آموزش مهارت های کاربردی در تدوین و چاپ مقاله