

بررسی خواص تراپردی نانونوارهای دسته صندلی گرافدین

قنبری شوهانی، بشرا؛ رضایی رکن آبادی، محمود؛ کمپانی، احمد

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه فردوسی، مشهد

چکیده

در این پژوهش، با استفاده از محاسبات اصول اولیه خواص ساختاری و الکترونیکی نانونوارهای دسته صندلی گرافدین (AGDYNRs) با پهنای متفاوت ($n=1,2,3$) بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهند که همه نمونه‌ها رفتار نیمرسانایی دارند به طوری که با افزایش پهنای نانونوار اندازه گاف نواری کاهش می‌یابد. به علاوه، خواص الکترونیکی نانونوارهای گرافدین که بین دو نانونوار گرافن قرار گرفته‌اند مطالعه شده است. یافته‌های این تحقیق نشان می‌دهند که در زیر ولتاژ آستانه جریان تقریباً صفر است و با افزایش ولتاژ، پنجره بایاس باز شده و در نتیجه جریان افزایش می‌یابد. بین سه ساختار بررسی شده، بیشترین جریان محاسبه شده مربوط به نانونوار با $n=3$ است.

کلید واژه‌ها: نانونوار دسته صندلی گرافدین، خواص الکترونیکی، NEGF، DFT.

Transport investigation of armchair graphdiyne nanoribbons

Ghanbari Shohany, Boshra; Rezaee Rohn Abadi, Mahmood; Kompany, Ahmad

Department of physics, Faculty of science, Ferdowsi university, Mashhad

Abstract

In this study, the structural and electronic properties of armchair graphdiyne nanoribbons (AGDYNRs) with different widths ($n = 1, 2, 3$) were investigated using the first principle calculations. The results indicate that all samples show semiconducting behavior so that the band gap value decreases with the increase of the nanoribbons width. The electrical properties of the graphdiyne sandwiched between two graphene nanoribbons were also investigated. The findings of this study indicate that below a threshold voltage, the current is almost zero and by increasing the bias voltage, the bias window is opened and therefore the current increases. Among three investigated structures, the highest current was obtained for $n=3$.

Keywords: Armchair graphdiyne nanoribbon, Electrical properties, DFT, NEGF.

PACS.No.73

مقدمه

از حدود 20 سال پیش گرافدین به عنوان یک نیمرسانا شناخته شده است [1]. اعتقاد بر این است که گرافدین، با داشتن خواص ساختاری و الکترونیکی منحصر بفرد و قابل کنترل، می‌تواند در ساخت ترانزیستورها و سایر قطعات الکترونیکی مورد استفاده قرار گیرد [2,3]. در مقایسه با گرافن، گرافدین خواص بسیار جالب توجهی دارد از قبیل پیوند π قوی، حفره‌های توزیع شده به صورت یکنواخت، چگالی بسیار کمتر، خواص الکترونیکی قابل کنترل، سختی فوق العاده، مقاومت دمایی بالا و رسانش الکترونیکی بالا که این خواص به خاطر وجود هر دو هیبرید sp و sp^2 و نیز حفره‌های طبیعی است [4,5]. ساختار الکترونیکی گرافدین با استفاده از روش‌های محاسباتی مختلف بررسی و نتایج منتشر شده است.

این یافته‌ها نشان می‌دهند که گرافدین نیمرسانایی با گاف مستقیم در گستره $0.46 - 1.22$ eV در نقطه Γ است. اندازه گاف بستگی به روش محاسبه و تابعی تبدیلی - همبستگی دارد [5]. پس از سنتز موفق گرافدین توسط لی و همکاران [6] بررسی‌هایی در زمینه نانو ساختارهای بر پایه گرافدین توسط پژوهشگران انجام شده است. به عنوان مثال لین و همکاران نشان دادند که گرافدین در دمای اتاق پایدار است و چگالی حامل‌های آن نزدیک به چگالی گرافن می‌باشد [2]. پن و همکاران گزارش کرده‌اند که گاف نواری نانونوارهای گرافدین و گرافین با افزایش پهنای کاهش می‌یابد. به علاوه گاف نواری نانونوارهای گرافدین می‌تواند توسط پهنای نوار یا میدان الکترونیکی کنترل شود [7]. نتایج کار کانگ و همکاران

مشخص کرد که اندازه گاف با افزایش شدت میدان الکتريکی کاهش یافته و گذار فلز-نیمرسانا نزدیک به یک مقدار آستانه رخ می‌دهد [8]. به علاوه کاربرد گرافدین در ذخیره انرژی [9,10] و به عنوان مواد آندی در باتری‌ها [11] نیز گزارش شده است.

تاکنون خواص ساختاری [12]، الکترونیکی [13]، اپتیکی [14]، مکانیکی [15] و مغناطیسی [16] خانواده گرافدین مورد مطالعه قرار گرفته است. به هر حال تا آن جا که بررسی کرده‌ایم مطالعات بسیار کمی روی خواص الکتريکی نانونوارهای گرافدین انجام شده است. در این پژوهش، محاسبات اصول اولیه برای تعیین ساختار اتمی، خواص الکترونیکی و الکتريکی نانونوارهای دسته‌صندلی گرافدین با پهنای متفاوت که با عنوان 1, 2, 3-AGDYNR نامگذاری شده‌اند بکار گرفته شده است و اثر تغییر پهنای روی خواص الکترونیکی و الکتريکی بررسی شده است. نتایج به دست آمده تایید می‌کنند که گاف نواری می‌تواند با پهنای نوار کنترل شود.

روش محاسباتی

بررسی ساختار اتمی و خواص الکترونیکی نانونوارهای گرافدین توسط محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) و به کمک بسته محاسباتی siesta بر پایه روش ترکیب خطی اربیتال‌های اتمی جایگزیده (LCAO) انجام شده است. تقریب شیب تعمیم یافته GGA-PBE برای تابعی همبستگی - تبدلی برهمکنش الکترون - الکترون به کار گرفته شده است.

با تقسیم بندی منطقه بریلوئن به روش مونخورست-پک، تعداد نقاط بهینه شده k برابر $1 \times 1 \times 5$ و انرژی قطع 200 ریذبرگ به دست آمده است. یک لایه خلأ با ضخامت 20 آنگستروم برای بهینه‌سازی ساختار و محاسبه نوارهای انرژی به کار گرفته شده است. تنها نانونوارهای دسته‌صندلی ($n=1,2,3$) با لبه پایانی دی-استیلنی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. هم‌چنین، در این پژوهش پیوندهای آزاد لبه‌ها توسط هیدروژن اشباع شده‌اند. برای واهلش نانونوارها از روش شیب تعمیم یافته (CG) تا جایی که

نیروهای بین اتمی کمتر از $0.01 \text{ eV}/\text{Ang}$ شوند، بهره برده‌ایم. بررسی خواص الکتريکی نمونه‌ها توسط مدل تابع گرین غیرتعدالی با استفاده از کد TranMain در بسته محاسباتی OpenMX انجام شده است. برای یک ولتاژ بایاس اعمال شده به سیستم، جریان توسط تابع گرین و خودانرژی مربوطه توسط فرمول لانداور-بوتیکر محاسبه می‌شود:

$$I(V) = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \{T(E,V)[f_L(E,V) - f_R(E,V)]\} dE$$

که در آن $T(E,V)$ ضریب عبور در انرژی E تحت ولتاژ بایاس V است. f_L و f_R توابع توزیع فرمی - دیراک الکترودهای چپ و راست هستند [17].

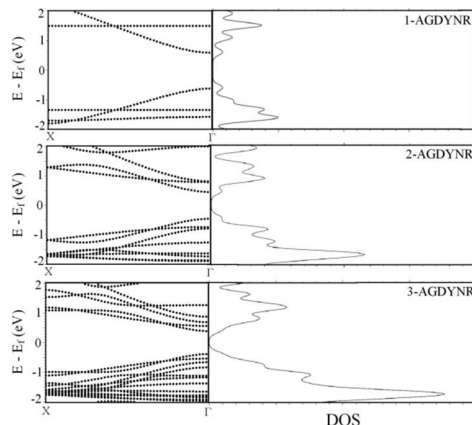
نتایج و بحث

شکل 1 پیکربندی نانونوارهای دسته‌صندلی گرافدین با $n=1, 2, 3$ به کار گرفته شده در این مطالعه را نشان می‌دهد. ثابت شبکه $a = 9.5 \text{ \AA}$ به دست آمد که با مطالعات قبلی ($a=9.48 \text{ \AA}$) سازگار است [12]. طول پیوندهای C-C در هگزاگون و پیوندهای دی‌استیلنی یکسان نیستند که نشان‌دهنده وجود هیبریدهای متفاوت در پیوندهای کربنی گرافدین است. این تفاوت به انعطاف‌پذیری ساختاری بیشتر گرافدین در مقایسه با گرافن منجر می‌شود [5]. طول بهینه شده پیوندهای AGDYNR در جدول 1 آورده شده است. گاف نواری انرژی و چگالی حالت‌های کل 1,2,3-AGDYNR در شکل 2 رسم شده‌اند. تراز فرمی در نقطه صفر انتخاب شده است.

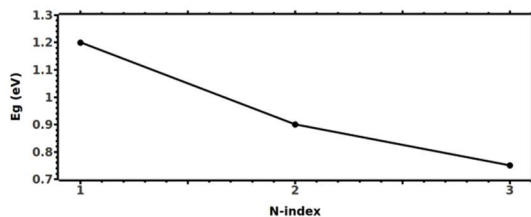
نتایج به دست آمده مشخص کرد که همه نمونه‌ها نیمرساناهایی با گاف مستقیم در نقاط Γ و X منطقه اول بریلوئن هستند. گاف نواری به دست آمده برای 1,2,3-AGDYNR به ترتیب برابر 0.9, 1.2, 0.75 eV است، که متفاوت از مقادیر بدست آمده توسط دیگران $n=2-5: E_g=0.79-0.61$ [2] و $n=2-8: E_g=0.97-0.54$ [7] می‌باشد. گاف AGDYNR در نقطه Γ در منطقه اول بریلوئن است و لذا توسط حالت‌هایی که در نزدیکی نقطه Γ هستند کنترل می‌شود به طوری که حالت‌های مرزی منطقه بریلوئن اثرگذار

نیستند.

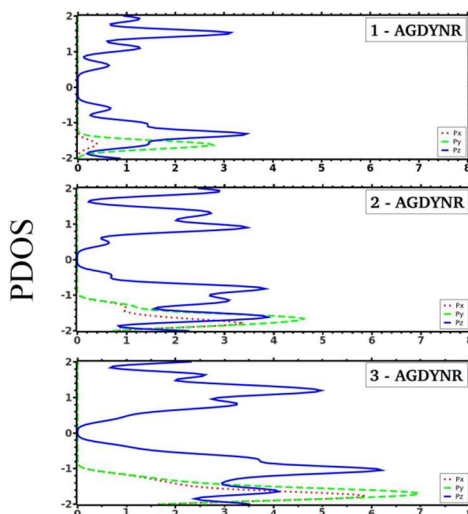
ترابرد الکتریکی نانونوارهای گرافدین می‌بایست مورد بررسی قرار گیرد. در این روش سیستم به سه بخش تقسیم می‌شود: الکتروود چپ، ناحیه مرکزی و الکتروود راست. فرض شده است که الکتروودها تنها با ناحیه مرکزی جفت شده‌اند. الکتروودها از جنس گرافن و به صورت نیمه بینهایت در نظر گرفته شده‌اند. شکل 5 جریان محاسبه شده به ازای ولتاژ بایاس صفر تا 2 ولت را نشان می‌دهد به طوری که در زیر مقدار آستانه جریان تقریباً صفر



شکل 2. ساختار نواری و چگالی حالت‌های کل نانونوارهای دسته صندلی گرافدین.



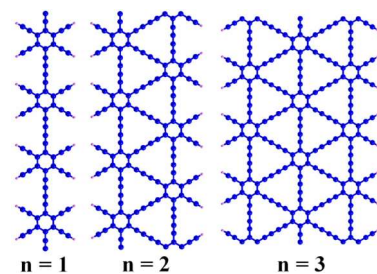
شکل 3. تغییرات گاف انرژی نواری بر حسب اندیس N در نانونوارهای دسته صندلی گرافدین.



شکل 4. چگالی حالت‌های تصویر شده نانونوارهای دسته صندلی گرافدین.

همان طور که در شکل 3 نشان داده شده است گاف نواری نانونوارهای گرافدین به وضوح وابسته به پهنا می‌باشد و با افزایش پهنای گرافدین مقدار گاف کاهش می‌یابد که در توافق با گزارش های دیگران است [7].

مطابق شکل 2، ساختار نواری و چگالی حالت‌ها با یکدیگر سازگارند. همچنین چگالی حالت‌ها در تراز فرمی صفر است که نشان دهنده رفتار نیم‌رسانایی نانونوارهاست. نتایج محاسبات DFT نشان می‌دهد که چگالی حالت‌های الکترونی حول سطح فرمی با افزایش پهنای نانونوارها افزایش می‌یابد.



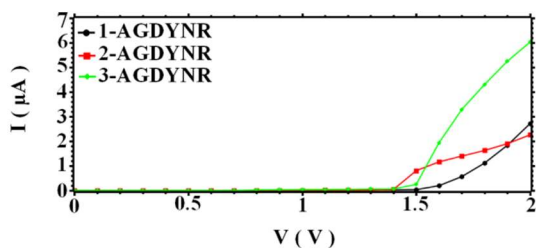
شکل 1. ساختار نانونوارهای دسته صندلی گرافدین (رنگ آبی) اشباع شده با هیدروژن (رنگ بنفش) بعد از بهینه‌سازی.

جدول 1. طول بهینه شده پیوندهای نانونوارهای دسته صندلی گرافدین.

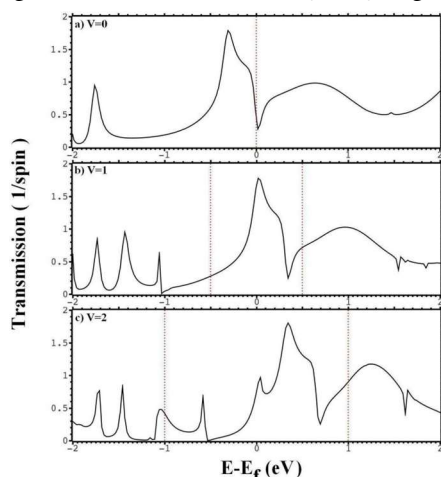
Bonds type	Optimized lengths (Å)
= C = C =	1.43
= C - C ≡	1.40
- C ≡ C -	1.24
≡ C - C ≡	1.35

برای نشان دادن نوع پیوند، چگالی حالت‌ها روی اربیتال‌های اتمی P_x , P_y , P_z تصویر شده است. شکل 4 منحنی PDOS مربوط به نانونوارهای دسته صندلی گرافدین را نشان می‌دهد. مطابق شکل در حالت‌های الکترونیکی نزدیک سطح فرمی اربیتال P_z نقش دارد بنابراین پیوندها از نوع π هستند. طیف گرافدین دارای نوارهای نوع σ بصورت کاملاً جایگزیده است در حالی که نوارهای کم انرژی π (π^*) لبه‌های گاف را تشکیل می‌دهند. این نتایج نیز با محاسبات دیگران در توافق است [2,5,7].

برای ساخت قطعات الکترونیکی مانند ترانزیستور اثر میدان، خواص



شکل 5. منحنی تغییرات جریان - ولتاژ نانونوارهای دسته صندلی گرافدین .



شکل 6. طیف عبوری نانونوار با $n=1$ در ولتاژهای متفاوت .

است و با افزایش ولتاژ جریان افزایش می‌یابد. نانونوار با $n=3$ بیشترین جریان را نشان می‌دهد که در توافق با نتایج بدست آمده در بخش خواص الکترونیکی است. با افزایش پهنای نانونوارها گاف کوچک شده و شدت جریان افزایش می‌یابد.

برای درک بهتر مشخصه جریان - ولتاژ، منحنی عبور نانونوار با $n=1$ در ولتاژ 0, 1, 2 V در شکل 6 نشان داده شده است. با افزایش ولتاژ اعمال شده پنجره بایاس باز شده و قله‌های متفاوتی در ترابرد سهم دارند. در این حالت، نوار ظرفیت (π نوار) الکتروود چپ با نوار رسانش (π^* الکتروود راست در داخل پنجره بایاس همپوشانی می‌کنند. بنابراین الکترون‌ها در نوار ظرفیت الکتروود چپ اجازه پیدا می‌کنند که به نوار رسانش الکتروود راست گذار کنند. بنابراین همان طور که در شکل دیده می‌شود شدت قله حول سطح فرمی افزایش یافته است. ضریب عبور در پنجره بایاس با افزایش ولتاژ بایاس زیاد می‌شود. در نتیجه جریان، که توسط انتگرال $T(E,V)$ حول پنجره بایاس تعیین می‌شود، افزایش پیدا می‌کند.

نتیجه گیری

در این پژوهش، با استفاده از مطالعات اصول اولیه نشان داده شد که نانونوارهای دسته صندلی گرافدین خواص ساختاری، الکترونیکی و الکتریکی قابل توجهی دارند. طول پیوندهای C-C یکسان نیست و لذا در مقایسه با گرافن، گرافدین انعطاف پذیری ساختاری بیشتری دارد. همه این نانونوارها نیمرساناهایی با گاف نواری مستقیم و قابل کنترل در نقطه Γ هستند. چگالی حالت‌ها نشان می‌دهند که در حالت‌های نزدیک سطح فرمی اربیتال P_z سهم دارد بنابراین پیوندها اساساً از نوع π هستند. در زیر مقدار آستانه جریان نزدیک به صفر است و با افزایش ولتاژ، شدت قله در پنجره بایاس افزایش یافته و جریان نیز زیاد می‌شود. به علاوه نتایج نشان می‌دهند که خواص الکترونیکی و الکتریکی نانونوارهای گرافدین متأثر از پهنای نانوریون هستند. با افزایش پهنای گاف نواری کاهش یافته و در نتیجه شدت جریان عبوری افزایش پیدا می‌کند. بنابراین نمونه با $n=3$ بیشترین جریان عبوری را نشان می‌دهد.

مراجع

- [2013] 909.
- [2] Z. Lin, Q. Wei, X. Zhu, *Carbon* **66** (2014) 504.
- [3] Q. Zheng, G. Luo, Q. Liu, R. Quhe, J. Zheng, K. Tang, Z. Gao, S. Nagase, J. Lu, *Nanoscale* **4** (2012) 3990.
- [4] J. He, S. Y. Ma, P. Zhou, C. X. Zhang, C. He, L. Z. Sun, *J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 26313.
- [5] A. L. Ivanovskii, *Progress in Solid State Chemistry* **41** (2013) 1.
- [6] G. Li, Y. Li, H. Liu, Y. Guo, Y. Li, D. Zhu, *Chem. Commun* **46** (2010) 3256.
- [7] L. D. Pan, L. Z. Zhang, B. Q. Song, S. X. Du, H. J. Gao, *Applied Physics Letters* **98** (2011) 173102.
- [8] J. Kang, F. Wu, J. Li, *J. Phys. Condens. Matter* **24** (2012) 165301.
- [9] Y. Jiao, A. Du, M. Hankel, Z. Zhu, V. Rudolph, S. C. Smith, *Chem. Commun.* **47** (2011) 11843.
- [10] J. Drogar, M.R. Roknabadi, M. Behdani, M. Modarresi, A. Kari, *Superlattices and Microstructures* **75** (2014) 340.
- [11] K. Srinivasu, S. K. Ghosh, *J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 5951.
- [12] M. Long, L. Tang, D. Wang, Y. Li, Z. Shuai, *ACS Nano* **5** (2011) 2593.
- [13] D. Malko, C. Neiss, A. Gorling, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 45443.
- [14] G. Luo, Q. Zheng, W. N. Mei, J. Lu, S. Nagase, *J. Phys. Chem. C* **117** (2013) 13072.
- [15] Y. Yang, X. Xu, *Comput. Mater Sci.* **61** (2012) 83.
- [16] J. He, S. Y. Ma, P. Zhou, C. X. Zhang, C. He, L. Z. Sun, *J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 26313.
- [17] Z. Sohbatzadeh, M.R. Roknabadi, N. Shahtahmasebi, M. Behdani, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **65** (2015) 61.

This document was created with Win2PDF available at <http://www.win2pdf.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.
This page will not be added after purchasing Win2PDF.