

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده فیزیک

رشته فیزیک گرایش علوم و فناوری نانو-نانو فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

بررسی خواص تراپردی نانو روبان های گرافنی با استفاده از رهیافت نظریه تابعی چگالی (DFT)

نگارنده

پروین زنگانه

استاد راهنما

دکتر طیبه مولاروی

تیر ۱۳۹۵

ب

تقدیم به

پدر و مادرم

که وجودم برایشان همه رنج بوده و وجودشان برایم همه مهر

با تقدیر و تشکر از

استاد گرامی خانم دکتر طیبه مولاروی که راهنمای اینجانب در تهیه و تدوین این پایان نامه

بودند

و استادان گرامی آقای دکتر محمد ابراهیم قاضی و آقای دکتر حسین اصغر رهنمای علی آباد

که قبول زحمت فرمودند و داوری این پایان نامه را برعهده گرفتند

و تمام کسانی که در انجام این تحقیق مرا یاری نمودند.

چکیده

یکی از مهم ترین مواد برای دستگاه های الکترونیکی و اسپین ترونیکی نانوروبان های گرافنی می باشند که توجهات زیادی را به خود جلب کرده اند. گرافن در مقایسه با نانو لوله های کربنی دارای ساختار ساده تر و همچنین امکان آماده سازی آن بسیار راحت تر است. گرافن به دلیل دارا بودن تحرک الکترونی بالا و همچنین ساختار لایه ای آن در صنعت نیمرساناها بسیار مورد توجه است. در این پایان نامه، خواص الکترونیکی، مغناطیسی و تراپردی نانوروبان های گرافنی آرمچیر و زیگزاگ و همچنین تاثیر افزودن ناخالصی بر روی خواص این نانوروبان ها بررسی شده است. در ابتدا خواص الکترونیکی و مغناطیسی نانوروبان های گرافنی خالص و آلیش یافته با عناصر واسطه (Fe و Mn, Cr) با استفاده از رهیافت نظریه تابعی چگالی (DFT) و تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) توسط کد محاسباتی SIESTA بررسی شده است. نتایج این بررسی ها نشان می دهد نانوروبان های گرافنی آرمچیر در حالت خالص نیمرسانای غیر مغناطیسی و نانوروبان های گرافنی زیگزاگ در حالت خالص فلز مغناطیسی می باشند. بعد از آلیش با اتم های عناصر واسطه بسته به نوع آلیش و مکان قرار گرفتن ناخالصی به نیمرسانای مغناطیسی، نیمرسانای غیر مغناطیسی، فلز مغناطیسی و فلز غیر مغناطیسی تبدیل می شوند. در ادامه کار با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی (NEGF) و تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) توسط کد محاسباتی TRANSIESTA، خواص تراپردی نانوروبان های گرافنی زیگزاگ و آرمچیر بررسی شده است. نتایج این مطالعات نشان می دهد در نانوروبان های گرافنی آرمچیر با تغییر الکترودهای نیمرسانا به الکترودهای فلزی جریان در محدوده میکرو آمپر بدست می آید در حالیکه در نانوروبان های گرافنی زیگزاگ بدون تغییر جنس الکترودهای جریان در محدوده میکرو آمپر می باشد. بهترین مقدار جریان و همچنین بهترین میزان فیلترینگ، در نانوروبان های گرافنی آرمچیر مورد بررسی در ساختار پنج و در نانوروبان های گرافنی زیگزاگ مورد بررسی در ساختار سیزده بدست آمد. همچنین در بعضی از ساختار های مورد بررسی پدیده NDR مشاهده شد.

کلمات کلیدی: نانوروبان گرافنی زیگزاگ، نانوروبان گرافنی آرمچیر، اسپین ترونیک، کد

SIESTA، نظریه تابعی چگالی، کد TRANSIESTA، تابع گرین غیر تعادلی (NEGF)

لیست مقالات استخراج شده

- ۱- زنگانه، پروین؛ مولارووی، طیبه (۱۳۹۴)، "بررسی خواص ساختاری و مغناطیسی نانوروبان های گرافنی آلایش یافته با اتم آهن"، کنفرانس سیستم های بس ذره ای (کپه ای و نانو مقیای)، ۲۱ آبان ماه ۱۳۹۴، دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی، تهران.
- ۲- زنگانه، پروین؛ مولارووی، طیبه (۱۳۹۴)، "بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوروبان های گرافنی آرمچیر آلایش یافته با اتم کروم"، هشتمین کنفرانس فیزیک آماری و سیستم های پیچیده، ۳ دی ماه ۱۳۹۴، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان.
- ۳- زنگانه، پروین؛ مولارووی، طیبه (۱۳۹۵)، "بررسی خواص ساختاری و مغناطیسی نانوروبان های گرافنی آلایش یافته با اتم آهن"، مجله پژوهش سیستم های بس ذره ای، دانشگاه شهید چمران اهواز.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول.....	۱
۱-۱- مقدمه.....	۲
۲-۱- ساختار نوار انرژی گرافن.....	۳
۳-۱- تحرک و چگالی حامل ها.....	۶
۴-۱- خاصیت مغناطیسی در گرافن.....	۶
۵-۱- الکترونیک با سرعت بالا.....	۷
۶-۱- نانو روبان های گرافنی.....	۸
فصل دوم.....	۱۱
۱-۲- مقدمه.....	۱۲
۲-۲- اسپین ترونیک.....	۱۳
۱-۲-۲- مواد برای اسپین ترونیک.....	۱۳
۱-۱-۲-۲- فلزات.....	۱۴
۲-۱-۲-۲- فرومغناطیس های نیم فلزی.....	۱۴
۳-۱-۲-۲- نیمرسانا ها.....	۱۵
۴-۱-۲-۲- مواد مبتنی بر کربن.....	۱۶
۲-۲-۲- کاربردهای اسپین ترونیک.....	۱۶
۱-۲-۲-۲- حسگرهای مغناطیسی.....	۱۶
۲-۲-۲-۲- حافظه های مغناطیسی با دستیابی تصادفی.....	۱۷
۳-۲-۲-۲- دیود اسپینی.....	۱۷
۴-۲-۲-۲- ترانزیستور اسپینی.....	۱۸
۳-۲- مفاهیم بنیادی در دستگاه های اسپین ترونیکی.....	۱۹

۱۹ تزریق اسپینی ۱-۳-۲
۲۰ واهلش و ترابرد اسپینی ۲-۳-۲
۲۰ جفت شدگی اسپین-مدار ۱-۲-۳-۲
۲۰ برهمکنش فوق ریز ۲-۲-۳-۲
۲۰ آشکارسازی اسپینی ۳-۳-۲
۲۱ GMR و TMR ۴-۳-۲
۲۳ فصل سوم
۲۴ مقدمه ۱-۳
۲۵ نظریه تابعی چگالی ۲-۳
۲۵ مسئله بس ذره ای ۱-۲-۳
۲۶ نظریه هوهنبرگ - کوهن ۲-۲-۳
۲۷ معادلات کوهن-شم ۳-۲-۳
۲۸ تابعی های تبادلی-همبستگی ۴-۲-۳
۲۸ تقریب چگالی موضعی (LDA) ۱-۴-۲-۳
۲۹ تقریب شیب تعمیم یافته GGA ۲-۴-۲-۳
۳۰ روش های حل معادلات تک ذره ای کوهن-شم ۳-۳
۳۱ SIESTA کد ۱-۳-۳
۳۱ مجموعه پایه جایگزیده اوربیتال اتمی ۱-۱-۳-۳
۳۳ شبه پتانسیل ۲-۱-۳-۳
۳۶ مقدمه بر تابع گرین غیر تعادلی (NEGF) ۴-۳
۳۷ مدل ساده برای ترابرد غیر تعادلی ۱-۴-۳
۴۱ روش نظری در کد TRANSIESTA ۲-۴-۳
۴۲ برپایی سیستم ۳-۴-۳
۴۵ محاسبه جریان ۴-۴-۳

فصل چهارم ۴۷

۴۸-۱-۴ مقدمه

۴۹-۲-۴ بهینه سازی پارامترها

۴۹-۱-۲-۴ انرژی قطع

۵۱-۲-۲-۴ بردار شبکه بندی و تعداد نقاط K در فضای وارون

۵۲-۳-۲-۴ مجموعه پایه ها

۵۳-۳-۴ بهینه سازی ساختار

۵۴-۴-۴ بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوروبان های گرافنی خالص (زیگزاگ و آرمچیر)

۵۴-۱-۴-۴ چگالی حالت ها (DOS)

۵۹-۵-۴ بررسی خواص الکترونی و مغناطیس نانوروبان های گرافنی آرایش یافته

۶۰-۱-۵-۴ نانوروبان 7-AGNR آرایش یافته با اتم های بورون و نیتروژن

۶۲-۲-۵-۴ نانوروبان گرافنی 7-AGNR-H و آرایش یافته با اتم های بورون و نیتروژن

۶۵-۳-۵-۴ نانوروبان گرافنی آرمچیر آرایش یافته با عناصر واسطه

۶۹-۴-۵-۴ نانوروبان گرافنی زیگزاگ آرایش یافته با عناصر واسطه

۸۳-۶-۴ جمع بندی

فصل پنجم ۸۵

۸۶-۱-۵ مقدمه

۸۶-۲-۵ اثر اسپین فیلترینگ و پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR)

۸۷-۳-۵ ساختار های مورد بررسی

۸۹-۱-۳-۵ ابرسلول 7-AGNR-H با طول پنج سلول واحد (ساختار یک)

۸۹-۲-۳-۵ ابرسلول 7-AGNR-H با طول پنج سلول واحد و اتم کروم جایگزین شده در میانه ناحیه

۹۱ پراکندگی (ساختار دو)

۸۹-۳-۳-۵ ابرسلول 7-AGNR-H با طول پنج سلول واحد و اتم کروم جایگزین شده در لبه ناحیه

۹۳ پراکندگی (ساختار سه)

- ۹۴-۴-۳-۵- ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد (ساختار چهار).....
- ۹۵-۳-۵- ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد واتم بورون جایگزین شده در لبه الکتروود و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (I) (ساختار پنج).....
- ۹۸-۳-۵- ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد واتم بورون جایگزین شده در لبه الکتروود و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (II) (ساختار شش).....
- ۱۰۰-۳-۵- ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد و نیتروژن جایگزین شده در لبه الکتروود و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (I) (ساختار هفت).....
- ۱۰۳-۳-۵- ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد و اتم نیتروژن جایگزین شده در لبه الکتروود و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (II) (ساختار هشت).....
- ۱۰۶-۳-۵- 4-ZGNR-H با طول هشت سلول واحد (ساختار نه).....
- ۱۰۹-۳-۵- 4-ZGNR-H با طول هشت سلول واحد و دو اتم ناخالصی قرار گرفته در مکان های A و B
۱۱۲.....
- ۱۱۳-۳-۵- 4-ZGNR-H با طول هشت سلول واحد و دو اتم ناخالصی قرار گرفته در مکان های C و D
۱۱۷.....
- ۱۲۲-۴-۵- جمع بندی.....
- ۱۲۳.....پیشنهادات.....
- ۱۲۴.....منابع.....

فهرست اشکال

عنوان صفحه

فصل اول

- شکل ۱-۱: آلوتروپ های مختلف کربن که می توانند با گرافن ساخته شوند [۱]..... ۳
- شکل ۲-۱: شبکه لانه زنبوری و منطقه بریلوئن آن. A_1 و A_2 بردار های واحد شبکه و Δ_I که $I=2, 1, 3$ است بردارهای همسایه های نزدیک هستند [۷]..... ۵
- شکل ۳-۱: پراکندگی انرژی در شبکه لانه زنبوری. واحد انرژی T است که $T=2/7 \text{ eV}$ است [۷]..... ۵
- شکل ۴-۱: انواع مختلف نانو روبان گرافنی (GNR)، الف) نانو روبان گرافنی زیگزاگ با پهنای N (N-ZGNR) و ب) نانو روبان گرافنی آرمچیر با پهنای N (N-AGNR) [۱]..... ۹

فصل دوم

- شکل ۱-۲: پراکندگی اسپینی در GMR با مجموعه ای از لایه ها با قطبش الف) موازی و ب) پاد موازی [۱۵]..... ۲۲

فصل سوم

- شکل ۱-۳: الف) شکل طرحوار دو پراب جریان / ولتاژ که از طریق یک سیستم تک تراز انرژی ϵ به هم متصل شده اند $\mu_1 < \epsilon < \mu_2$. ب) تراز انرژی ϵ در اثر جفت شدگی با الکترودها طبق اصل عدم قطعیت به اندازه γ پهن می شود [۳۴]..... ۳۷
- شکل ۲-۳: مدلی برای ترابرد الکترونی برای یک مولکول یا یک نانو سیم کوتاه [۳۸]..... ۴۲
- شکل ۳-۳: طرح واره ای از خود انرژی های به جای الکترودهای نامتناهی در ترابرد الکترونی در یک مولکول [۳۸]..... ۴۴
- شکل ۴-۳: طرح شماتیک روش خودسازگار برای مدل NEGF+DFT [۳۸]..... ۴۵

فصل چهارم

- شکل ۱-۴: نمودار انرژی قطع برای الف) AGNR-H و ب) ZGNR-H..... ۵۱
- شکل ۲-۴: نمودار K-POINT برای الف) AGNR-H و ب) ZGNR-H..... ۵۲
- شکل ۳-۴: چگالی حالت ها برای نانوروبان های AGNR-H با پهنای مختلف..... ۵۵

- شکل ۴-۴: الف) چگالی حالت ها برای نانوروبان های ZGNR-H با پهناهای مختلف. ب) ساختار نواری برای نانوروبان های ZGNR-H با پهناهای مختلف ۵۶
- شکل ۵-۴: تغییرات گاف نواری برحسب پهناهای روبان در نانوروبان های AGNR-H الف) مقادیر این پژوهش، ب) نتایج مرجع ۴۸ ۵۸
- شکل ۶-۴: نانوروبان 7-AGNR و مکان های انتخاب شده برای آرایش آن ۶۰
- شکل ۷-۴: نمودار های چگالی حالت برای 7-AGNR الف) خالص، و آرایش یافته با اتم بورون در مکان (ب) A و ج) B ۶۱
- شکل ۸-۴: نمودار چگالی حالت ها برای 7-AGNR محدود نشده و آرایش یافته با اتم نیتروژن در مکان الف) A و ب) B ۶۲
- شکل ۹-۴: نانوروبان 7-AGNR-H و مکان های انتخاب شده برای آرایش آن ۶۳
- شکل ۱۰-۴: چگالی حالت ها برای نانوروبان 7-AGNR-H الف) خالص، و آرایش یافته با اتم بورون در مکان ب) A و در مکان های ج) A و B ۶۴
- شکل ۱۱-۴: چگالی حالت ها برای نانوروبان 7-AGNR-H آرایش یافته با اتم نیتروژن در مکان های الف) A و ب) A و ۶۵
- شکل ۱۲-۴: نانوروبان 7-AGNR-H با طول دو سلول واحد و مکان های انتخاب شده برای آرایش آن ۶۶
- شکل ۱۳-۴: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 7-AGNR-H آرایش یافته با اتم های الف) CR ، ب) MN و ج) FE در مکان A ۶۶
- شکل ۱۴-۴: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 7-AGNR-H آرایش یافته با اتم های الف) CR ، ب) MN و ج) FE در مکان B ۶۷
- شکل ۱۵-۴: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 7-AGNR-H آرایش یافته با اتم های الف) CR ، ب) MN و ج) FE در مکان C ۶۸
- شکل ۱۶-۴: ابرسلول نانوروبان گرافنی 4-ZGNR-H و محل های انتخاب شده برای آرایش آن با اتم های عناصر واسطه ۷۰
- شکل ۱۷-۴: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته با اتم های الف) CR ، ب) MN و ج) FE در مکان A ۷۱

- شکل ۴-۱۸: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آلاینش یافته با اتم الف (CR، ب) MN و ج (FE) در مکان B ۷۲
- شکل ۴-۱۹: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR آلاینش یافته با اتم الف (CR، ب) MN و ج (FE) در مکان C ۷۲
- شکل ۴-۲۰: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آلاینش یافته با اتم الف (MN و ب) FE در مکان D ۷۳
- شکل ۴-۲۱: ابرسلول 4-ZGNR-H و مکان های انتخاب شده برای آلاینش آن که با حروف الفبای لاتین مشخص شده اند. ۷۵
- شکل ۴-۲۲: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آلاینش یافته با دو اتم CR در مکان های A و C در وضعیت الف) فرومغناطیس و ب) پاد فرومغناطیس ۷۶
- شکل ۴-۲۳: نمودار چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آلاینش یافته با اتم آهن در مکان های B و C در وضعیت فرومغناطیس ۷۷
- شکل ۴-۲۴: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آلاینش یافته در مکان های D و E با، الف) دو اتم CR در فاز فرومغناطیس، دو اتم MN در فاز ب) فرومغناطیس، ج) پاد فرومغناطیس و دو اتم FE در فاز د) فرومغناطیس و ه) پاد فرومغناطیس ۷۹
- شکل ۴-۲۵: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آلاینش یافته در مکان های D و F برای دو اتم CR در فاز الف) فرو، ب) پاد فرو، دو اتم MN در فاز ج) فرو، د) پاد فرو، و دو اتم FE در فاز ه) فرو و و) پاد فرو ۸۱
- شکل ۴-۲۶: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آلاینش یافته با، دو اتم MN در فاز الف) فرومغناطیس، ب) پاد فرومغناطیس، و دو اتم FE در وضعیت ج) فرومغناطیس و د) پاد فرومغناطیس در مکان های H و G ۸۳

فصل پنجم

- شکل ۵-۱: شکل ساختار یک، اتم های هیدروژن با رنگ آبی و اتم های کربن با رنگ زرد نشان داده شده اند. ۸۹
- شکل ۵-۲: نمودارهای ضریب عبور بر حسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار یک ۹۰
- شکل ۵-۳: ابرسلول 7-AGNR-H با طول پنج سلول واحد و اتم CR جایگزین شده در میانه ناحیه پراکندگی (ساختار دو)، اتم کروم با رنگ خاکستری مشخص شده است. ۹۱

- شکل ۴-۵: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار دو ۹۲
- شکل ۵-۵: ابرسلول 7-AGNR-H با اتم کروم جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (ساختار سه) ۹۳
- شکل ۶-۵: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار سه ۹۴
- شکل ۷-۵: نمودارهای جریان-ولتاژ برای اسپین های بالا و پایین در ساختارهای یک، دو و سه ۹۵
- شکل ۸-۵: ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد (ساختار چهار) ۹۶
- شکل ۹-۵: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار چهار ۹۷
- شکل ۱۰-۵: ساختار پنج. اتم های بورون با رنگ آبی تیره و اتم آهن با رنگ قرمز نشان داده شده اند. ۹۸
- شکل ۱۱-۵: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار پنج ۱۰۰
- شکل ۱۲-۵: ساختار شش. ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد و اتم بورون جایگزین شده در لبه الکتروود و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (II) ۱۰۱
- شکل ۱۳-۵: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار شش ۱۰۲
- شکل ۱۴-۵: نمودارهای I-V برای اسپین های بالا و پایین در دو ساختار پنج و شش ۱۰۳
- شکل ۱۵-۵: ساختار هفت. اتم آهن با رنگ قرمز و اتم نیتروژن با رنگ سبز نشان داده شده اند. ۱۰۴
- شکل ۱۶-۵: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار هفت ۱۰۵
- شکل ۱۷-۵: ساختار هشت. ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد و اتم نیتروژن جایگزین شده در لبه الکتروود و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (II) ۱۰۶
- شکل ۱۸-۵: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار هشت ۱۰۷
- شکل ۱۹-۵: نمودارهای I-V برای اسپین های بالا و پایین در ساختارهای هفت و هشت ۱۰۸
- شکل ۲۰-۵: نمودارهای I-V برای اسپین های بالا و پایین در ساختارهای پنج تا هشت ۱۰۹
- شکل ۲۱-۵: 4-ZGNR-H با طول هشت سلول واحد (ساختار نه)، حروف الفبای لاتین مکان های انتخاب شده برای جایگذاری اتم های آهن و منگنز را در ساختار نشان می دهند. ۱۱۰
- شکل ۲۲-۵: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار نه ۱۱۱
- شکل ۲۳-۵: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار ده ۱۱۳
- شکل ۲۴-۵: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار یازده ۱۱۴
- شکل ۲۵-۵: نمودارهای I-V برای اسپین بالا و پایین در ساختارهای نه، ده و یازده ۱۱۵

- شکل ۵-۲۶: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار دوازده..... ۱۱۶
- شکل ۵-۲۷: نمودارهای I-V در ساختارهای یازده و دوازده..... ۱۱۷
- شکل ۵-۲۸: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار سیزده..... ۱۱۹
- شکل ۵-۲۹: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار چهارده..... ۱۲۰
- شکل ۵-۳۰: نمودارهای I-V در ساختارهای الف (۱۲ و ۱۴، و ب) ۱۳ و ۱۴..... ۱۲۱

فهرست جداول

صفحه

عنوان

فصل چهارم

- جدول ۴-۱: مقادیر بدست آمده برای انرژی کل برحسب انرژی قطع برای ZGNR-H و AGNR-H ۵۰
- جدول ۴-۲: انرژی کل برحسب تعداد نقاط K، برای نانوروبان AGNR-H و ZGNR-H ۵۲
- جدول ۴-۳: پارامترهای ورودی محاسبات برای نانوروبان های گرافنی (زیگزاگ و آرمچیر) ۵۳
- جدول ۴-۴: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی برای نانوروبان های AGNR-H خالص با پهناهای مختلف ۵۹
- جدول ۴-۵: مقدار گشتاور مغناطیسی برحسب مگنتون بوهر (M_B) برای نانوروبان های ZGNR-H با پهناهای مختلف ۵۹
- جدول ۴-۶: مقادیر محاسبه شده برای اندازه گاف نواری، گشتاور مغناطیسی و رفتار الکتریکی برای ابرسلول 7-AGNR ۶۸
- H آرایش یافته با عناصر واسطه CR، MN و FE در مکان های A، B و C ۶۸
- جدول ۴-۷: مقادیر بدست آمده برای برای اندازه گاف نواری، نوع آن و مقدار گشتاور مغناطیسی در ابرسلول 4-ZGNR ۷۴
- H آرایش یافته با عناصر واسطه در مکان های A و D ۷۴

فصل پنجم

- جدول ۵-۱: پارامترهای ورودی برای محاسبه خواص تراپردی نانوروبان های گرافنی زیگزاگ و آرمچیر ۸۹
- جدول ۵-۲: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار یک ۹۱
- جدول ۵-۳: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار دو ۹۳
- جدول ۵-۴: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار سه ۹۴
- جدول ۵-۵: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین بالا و پایین در ولتاژهای مختلف در ساختار چهار ۹۷
- جدول ۵-۶: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار پنج ۱۰۰
- جدول ۵-۷: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار شش ۱۰۲
- جدول ۵-۸: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار هفت ۱۰۵
- جدول ۵-۹: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار هشت ۱۰۷

- جدول ۵-۱۰: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپين های بالا و پايين در ولتاژهای مختلف برای ساختار نه ۱۱۱
- جدول ۵-۱۱: مقادير جريان بدست آمده برای اسپين های بالا و پايين در ساختار ده ۱۱۳
- جدول ۵-۱۲: مقادير جريان بدست آمده برای اسپين های بالا و پايين در ساختار يازده ۱۱۴
- جدول ۵-۱۳: مقادير جريان بدست آمده برای اسپين های بالا و پايين در ساختار دوازده ۱۱۶
- جدول ۵-۱۴: مقادير جريان بدست آمده برای اسپين های بالا و پايين در ساختار سيزده ۱۱۸
- جدول ۵-۱۵: مقادير جريان بدست آمده برای اسپين بالا و پايين در ساختار چهارده ۱۲۰

فصل اول

گرافن

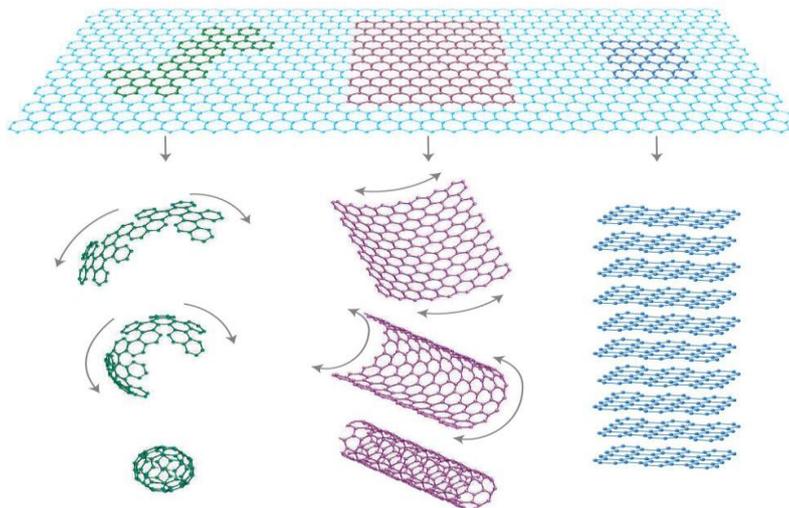
گرافن نامی است که به یک تک صفحه از اتم های کربن داده می شوند که در آن اتم ها در شبکه های لانه زنبوری دو بعدی با هیبریداسیون sp^2 در کنار هم قرار گرفته اند که طول پیوند کربن-کربن در آن $1/42 \text{ \AA}$ می باشد. گسترش شبکه لانه زنبوری گرافن بلوک اصلی دیگر آلوتروپ های مهم کربن است. همانطور که در شکل ۱-۱ نشان داده شده است با قرار دادن دسته ای از صفحات گرافنی بر روی هم می توان گرافیت سه بعدی تشکیل داد و یا با لوله کردن یک صفحه گرافنی می توان نانو لوله کربنی یک بعدی ایجاد کرد و همچنین با پیچاندن یک صفحه گرافنی می توان فولرن صفر بعدی ایجاد کرد. به عبارت دیگر گرافن ساختمانی دو بعدی دارد که می توان با کمک آن بقیه مواد کربنی را با ابعاد دیگر ایجاد کرد [۱]. گرافن دارای خواص فوق العاده گرمایی، مکانیکی و الکتریکی می باشد [۲]. اگرچه به مدت شصت سال گرافن به صورت نظری مورد مطالعه قرار می گرفت اما تصور می شد که آن به صورت آزاد وجود ندارد تا اینکه در سال ۲۰۰۵ نووسلو^۱ و همکارانش [۳ و ۴] گزارش کردند که این ترکیب و خواص شگفت انگیز آن را مشاهده کرده اند، این موفقیت تجربی هیجان زیادی در جامعه فیزیک ایجاد کرد و باعث شد تحقیقات آزمایشگاهی زیادی بر روی این ماده انجام شود. پیش از کشف گرافن، نانو لوله های کربنی (CNT) به دلیل خواص الکتریکی و مکانیکی شگفت انگیزشان توجهات زیادی را به خود جلب کردند. به دلیل تحرک بالای الکترون ها در CNT استفاده از آنها در مدارات و دستگاه های الکترونی بسیار مورد توجه قرار گرفت. شبیه سازی های انجام شده مربوط به ترانزیستورهای نیم رسانای اکسید فلزی (MOS) [۵] مبتنی بر CNT پیشنهاد می کنند که نانو لوله های کربنی پتانسیل بالایی در آینده در سیستم های الکترونیکی با سرعت بالا می توانند داشته باشند اما در عمل کنترل کایرالیته نانو لوله های کربنی بسیار سخت است و ساختارها به آسانی نمی توانند در یک سیستم الکترونیکی مجتمع شوند. کایرالیته به این دلیل مورد اهمیت است که گاف نوار انرژی مربوط به یک نیم رسانای CNT تابعی از آن می باشد. مزیت گرافن در این است که

¹ -Novoselov

سازگار با تکنولوژی سطح به کار گرفته شده در صنعت نیمرسانا می باشد. مانند نانو لوله های کربنی، گرافن نیز تحرکات الکترونی بالایی را نشان می دهد و می تواند به صورت نیمرسانا یا فلزی باشد. زمانی که پهنای نانو روبان گرافنی به کمتر از 100 nm می رسد به دلیل محدودیت کوانتومی در آن گاف نواری ایجاد می شود. حالت های الکترونی گرافن عمیقا به ساختار های لبه و پهنای نانو روبان گرافنی بستگی دارند. یکی از مهم ترین پتانسیل های کاربردی گرافن به عنوان کانال برای ترابرد الکترونی در ساختار MOS می باشد. ساختار های از این نوع به صورت آزمایشگاهی با استفاده از روش همبافته^۱ روی زیر لایه های سیلیکون کارباید ساخته شده است [۱].

۱-۲- ساختار نوار انرژی گرافن

در گرافن هر اتم کربن به سه اتم کربن مجاور خود با پیوند های قوی کووالانسی متصل شده است، این پیوند ها به عنوان پیوند های سیگما (σ) شناخته می شوند، این پیوند ها در اوربیتال های $2s$ ، $2p_x$ و $2p_y$ نوار ظرفیت نقش دارند. الکترون چهارم در نوار ظرفیت در اوربیتال $2p_z$ قرار می گیرد که در جهت عمود بر صفحه گرافن می باشد، بنابراین نمی تواند با الکترون



شکل ۱-۱: آلوتروپ های مختلف کربن که می توانند با گرافن ساخته شوند [۱].

^۱-Epitaxially

های حاضر در صفحه گرافنی برهمکنش داشته باشد، اوربیتال های $2p_z$ در اتم های مجاور باهم هم پوشانی می کنند و باعث می شوند پیوند های غیر موضعی π (اشغال شده یا ظرفیت) و π^* (اشغال نشده یا رسانش) ایجاد شوند، بیشتر خواص الکترونی گرافن می تواند به وسیله این پیوند های π شناخته شود [۶]. گرافن یک تک لایه از گرافیت با شبکه دوبعدی لانه زنبوری می باشد که در شکل ۲-۱ نشان داده شده است دو بردار شبکه در گرافن به صورت زیر تعریف می شوند:

$$a_1 = a \left(\frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad a_2 = a \left(\frac{3}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad 1-1$$

که در آن a طول پیوند کربن-کربن و برابر با $1/42 \text{ \AA}$ می باشد. بردار های شبکه وارون به صورت زیر بیان می شوند:

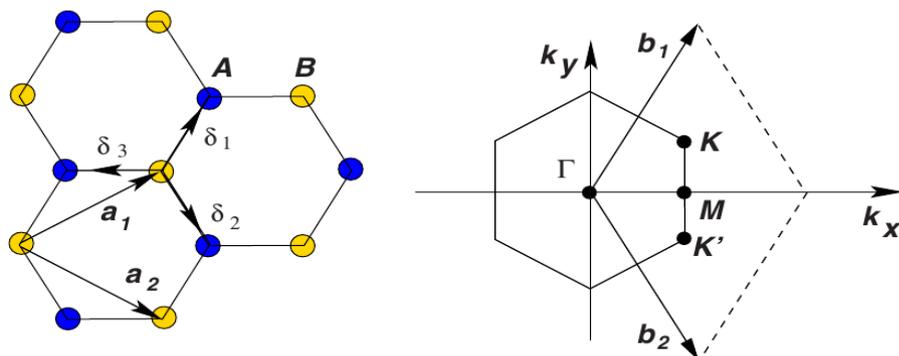
$$b_1 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3} \right), \quad b_2 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{3}, -\frac{\sqrt{3}}{3} \right) \quad 2-1$$

در شکل ۳-۱ نمودار نوار انرژی در امتداد جهت های با بیشترین تقارن در منطقه اول بریلوئن نشان داده شده است، همانطور که در این شکل دیده می شود تقارن شبکه لانه زنبوری در گرافن منجر به ساختار نواری خاصی می شود که در آن نوار های ظرفیت و رسانش در شش نقطه با یکدیگر و همچنین به صورت همزمان با گوشه های منطقه اول بریلوئن (K و K') برخورد می کنند، بنابراین گرافن یک شبه فلز (نیمرسانایی با گاف نواری صفر) می باشد، در نزدیکی این نقاط برخورد، انرژی الکترون به صورت خطی وابسته به بردار موج است، این نقاط به دلیل نسبت پراکندگی انرژی در نزدیکی آنها، نقاط دیراک نامیده می شوند [۷]؛ به عنوان یک نتیجه از رابطه پراکندگی خطی انرژی-اندازه حرکت می توان گفت، جرم موثر الکترون در نقاط دیراک صفر است و در این نقاط رفتار الکترون بیشتر شبیه فوتون ها است تا ذرات مرسوم دارای جرم که پراکندگی انرژی-اندازه حرکت در آنها به صورت سهموی است [۱]. موقعیت نقاط دیراک در فضای اندازه حرکت به صورت زیر می باشد:

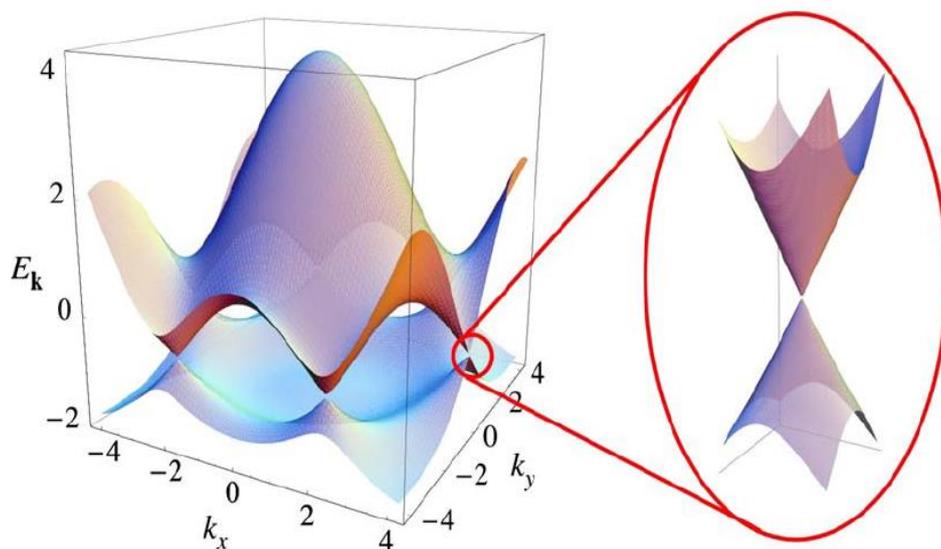
$$K = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3\sqrt{3}} \right), \quad K' = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{3}, -\frac{1}{3\sqrt{3}} \right) \quad 3-1$$

و بردارهای همسایه‌های نزدیک به صورت زیر می‌باشند [۷]:

$$\delta_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \delta_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}) \quad \text{و} \quad \delta_3 = -a(1, 0) \quad ۴-۱$$



شکل ۲-۱: شبکه لانه زنبوری و منطقه بریلوئن آن. a_1 و a_2 بردارهای واحد شبکه و δ_i که $i=1, 2, 3$ است بردارهای همسایه‌های نزدیک هستند [۷].



شکل ۳-۱: پراکندگی انرژی در شبکه لانه زنبوری. واحد انرژی t است که $t = 2.7 \text{ eV}$ است [۷].

۳-۱- تحرک و چگالی حامل ها

در مدل درود^۱ رسانندگی σ (معکوس مقاومت ویژه ρ) برحسب دو خصوصیت مهم ماده توصیف می شود، چگالی حامل n و تحرک μ :

$$\rho^{-1} = \sigma = ne\mu \quad ۵-۱$$

در آزمایشات انجام شده بر روی گرافن n و μ به کمک روش اثر میدان تعیین می شوند. در این روش اندازه گیری، چگالی حامل ها در گرافن، n می تواند به کمک چگالی حامل سطحی تحریک شده به وسیله اعمال ولتاژ ورودی محاسبه شود:

$$n = \epsilon_0 \epsilon_r V_g / te \quad ۶-۱$$

که در این رابطه ϵ_0 گذردهی فضای آزاد، ϵ_r گذردهی نسبی دی الکتریک، t ضخامت دی الکتریک و e بار الکترون است. همچنین در این روش ها تحرک حامل ها را می توان با استفاده از رابطه:

$$\mu_{FE} = \frac{d\sigma}{dV_g} \frac{1}{c_g} \quad ۷-۱$$

محاسبه کرد که در آن σ رسانش نمونه و c_g ظرفیت ورودی است. مقدار μ_{FE} برای گرافن بر روی زیر لایه ای از بورون نیتريد بیش از $100000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ گزارش شده است.

۴-۱- خاصیت مغناطیسی در گرافن

خاصیت مغناطیسی در گرافن به عنوان یک ساختار کربنی نانو مقیاس، از حالت های موضعی قطبیده اسپینی، عیوب و یا جذب مولکولی ناشی می شود، همچنین خاصیت مغناطیسی در گرافیت ها و گرافن های نانویی می تواند به وسیله پیچش و یا تابش فوتونی نیز ایجاد شود. وقوع گشتاور مغناطیسی تحریک شده دلیل روشنی است که قطبش اسپینی به برهمکنش تبادلی بین حالت های کاملاً اشغال شده و الکترون های جفت نشده وابسته است. حالت های لبه ها منشأ فعالیت های

^۱ -Drude model

الکترونی و شیمیایی در مواد کربنی مبتنی بر الکترون های π می باشد. برای ایجاد مکانیزم جفت شدگی دور برد قوی که ترتیب مغناطیسی در دمای بالا را فراهم می کند، طبیعت دو قسمتی شبکه و حضور سیستم اوربیتال های π نیمه پر از الکترون ها در شبکه ای از اتم ها با هیبریداسیون sp^2 ضروری است، این مکانیزم در نتیجه دافعه تبادلی موضعی می باشد که تامین کننده اوربیتال های نیمه پر π هر اتم کربن جفت شده در یک مد پاد موازی با همسایه های نزدیکش است. اسپین یک گرافن محدود، به دلیل خنثی سازی توپولوژیک پیوندهای π به شکل آن وابسته است. خنثی سازی توپولوژیک پیوندهای π یک قاعده کلی ساده برای پیش بینی مرتبه مغناطیسی در مولکول های اورگانیک است بسته به اینکه آیا فقط یک و یا هر دو زیر شبکه ساختار گرافیتی خنثی ساز است. ساختار الکترونی نانو گرافن، به شکل لبه های آن بستگی دارد. حالت های اشغال شده و قطبیده اسپینی لبه، مسئول خاصیت مغناطیسی قوی و حتی فرومغناطیسی می باشند، بنابراین حالت اسپینی لبه ها مسئول خاصیت مغناطیسی مبتنی بر کربن است و می تواند برای کاربردهای اسپین ترونیک استفاده شود؛ در نانو روبان گرافنی با شکل لبه آرمچیر، در مقایسه با نانو روبان گرافنی با لبه زیگزاگ شکل و حالت های غیر پیوندی در لبه های آن، حالت های لبه حضور ندارند و ساختار خاصیت مغناطیسی ندارد. از آنجایی که ساختار های گرافنی با لبه زیگزاگ شکل اسپین قطبیده اند، حالت های موضعی شده اسپینی مسئول خاصیت مغناطیسی غیر عادی در آنها می باشد، لازم به ذکر است که وجود حالت های موضعی شده الکترونی پیش بینی شده برای ساختار های گرافنی با لبه زیگزاگ شکل توسط میکروسکوپ تونل زنی روبشی و روشهای اسپکتروسکوپی تایید شده است.

۱-۵- الکترونیک با سرعت بالا

پیش بینی های نظری پیشنهاد می کنند که در گرافن تحرک حامل ها بسیار بالا است. اندازه گیری های انجام شده بر روی گرافن، علاوه بر تایید پیش بینی ها، توجهات زیادی را نسبت به گرافن، به عنوان یک ماده ممکن برای استفاده در دستگاه های نیمرسانا ایجاد کردند. در واقع خواص شگفت

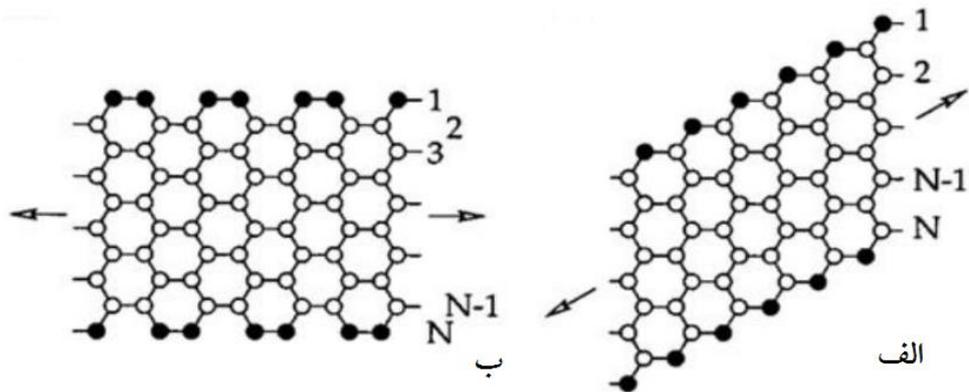
انگیز الکترونی گرافن به دلیل کیفیت بالای شبکه کریستالی دو بعدی آن می باشد. این کیفیت بالا باعث می شود چگالی عیوب در گرافن به طور غیر عادی پایین باشند که این مزیت مهمی برای گرافن است زیرا عیوب عاملی برای مراکز پراکندگی می باشند که مانع انتقال بار هستند. در سال ۲۰۰۸ گروه کیم^۱ برای یک لایه گرافنی، تحرک حامل بیش از $200000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ را اندازه گیری کردند، در چنین تحرک حامل بالایی ترابرد بار در دمای اتاق لزوما در مقیاس میکرو متر می باشد. این امر می تواند پیامد ای عمده ای در صنعت نیمرسانا داشته باشد زیرا ساخت تمام دستگاه های بالستیکی حتی در طول کانال مدارات مجتمع امروزه را قادر می سازد [۲].

۱-۶- نانو روبان های گرافنی

نداشتن گاف نواری و عدم توانایی در محدود کردن الکترونها در گرافن مانعی بزرگ در پیشرفت الکترونیک گرافنی است، یک روش برای ایجاد گاف نواری در گرافن و مهندسی گاف نواری آن این است که گرافن را به شکل نانو روبان هایی نازک در آوریم که به آنها نانو روبان گرافنی می گویند [۶]. این موضوع باعث انجام تحقیقات زیادی بر روی نانو روبان های گرافنی شد [۲]. همانطور که در مقدمه این فصل نیز اشاره شد زمانیکه پهنای نانو روبان به کمتر از 100 nm می رسد به دلیل محدودیت کوانتومی، گاف نواری در گرافن ایجاد می شود. این گاف نواری می تواند با توجه به نوع لبه یا پهنای نانو روبان تغییر کند. ایجاد گاف نواری استفاده از گرافن را در ترانزیستور های اثر میدان نیمرسانای اکسید فلزی^۲ (MOSFET) ممکن می سازد. مطالعات تجربی که در سالهای اخیر انجام شده است امکان تولید نانو روبان گرافنی را تایید می کند [۱]. همانطور که اشاره شد هندسه و شکل لبه ها بر روی خواص نانو روبان های گرافنی تاثیر زیادی دارند شکل لبه ها در نانو روبان های گرافنی می تواند به صورت زیگزاگ و یا آرمچیر (دسته صندلی) باشد که در شکل ۱-۲ نشان داده شده اند.

¹ -Kim

² -Metal-oxide-semiconductor field effect transistors



شکل ۱-۴: انواع مختلف نانو روبان گرافنی (GNR)، الف) نانو روبان گرافنی زیگزاگ با پهناي (N-ZGNR) N و ب) نانو روبان گرافنی آرمچیر با پهناي (N-AGNR) N [۱].

فصل دوم

اسپین ترونیک

تاکون اسپین الکترون در الکترونیک مبتنی بر بار نادیده گرفته می شد. تکنولوژی اسپین ترونیک (یا همان الکترونیک مبتنی بر اسپین) که در آن از اسپین الکترون علاوه بر بار آن به عنوان حامل اطلاعات استفاده می شود، نسل جدیدی از وسایل الکترونیکی را پیشنهاد می دهد که ترکیبی از میکروالکترونیک استاندارد و اثرات وابسته به اسپین می باشند که از برهم کنش بین اسپین حامل و میدان مغناطیسی اعمالی خارجی به وجود می آید. اضافه کردن درجه آزادی اسپینی به نیمرسانای مرسوم در الکترونیک مبتنی بر بار باعث افزایش عملکرد دستگاه های الکترونیکی می شود. مزیت این دستگاه های جدید را می توان در افزایش سرعت پردازش اطلاعات، کاهش توان الکتریکی مصرفی و افزایش چگالی تراکم در مقایسه با نیمرساناهای مرسوم دستگاه های الکترونیکی (که امروزه به محدودیت های فیزیکی خود نزدیک شده اند) بیان کرد. مشاهده اثر مقاومت مغناطیسی بزرگ^۱ (GMR) در ۱۹۸۸ به عنوان آغاز نسل جدید الکترونیک مبتنی بر اسپین در نظر گرفته می شود، این کشف منجر به دریافت جایزه نوبل فیزیک در سال ۲۰۰۸ شد. از آن زمان نقش اسپین الکترون در دستگاه های حالت-جامد و تکنولوژی های ممکن که به طور خاص، فقط اسپین یا علاوه بر بار حامل، اسپین آن نیز مورد استفاده قرار می گیرد، به صورت گسترده مورد مطالعه قرار گرفت. به عنوان مثال بهینه سازی اسپینی و تراپرد اسپینی در فلزات و نیمرساناها هم در فیزیک و هم در تکنولوژی مورد توجه قرار گرفت. چالش های بزرگ در اسپین ترونیک بهینه سازی طول عمر اسپین الکترون، آشکارسازی همدوسی الکترون در ساختارهای نانو مقیاس، تراپرد اسپین-قطبیده حامل ها در مقیاس های طولی مناسب و سطوح مختلف، و به کار گرفتن اسپین های الکترون ها و هسته ها در مقیاس های زمانی به اندازه کافی سریع می باشند. رویای یکی کردن الکترونیک، فوتونیک و مغناطیس نهایتاً منجر به دستگاه های جدید چندکاره مبتنی بر اسپین خواهد شد. موفقیت در این راه به فهم عمیق تر برهمکنش های اسپینی در مواد حالت-جامد، مانند نقش چند بعدی، عیوب و ساختار نواری نیمرسانا

¹ - Giant magnetoresistance

در اصلاح خواص اسپینی، وابسته است. فهم و کنترل مناسب درجات آزادی اسپینی در نیمرساناها و ساختارهای مختلف، عاملی برای تحقق دستگاه های اسپین ترونیکی با کارایی بالا می باشد. آینده اسپین ترونیکی به موفقیت در تزریق اسپینی به دستگاه های چند رسانه ای و بهینه سازی طول عمر اسپینی در این ساختارها وابسته است، بنابراین برای بدست آوردن دستگاه های چند کاره اسپین ترونیکی که در دمای اتاق کار می کنند مواد مختلف مناسبی برای تزریق اسپینی موثر و ترابرد اسپینی باید مورد مطالعه قرار بگیرد [۸].

۲-۲- اسپین ترونیکی

در سال های اخیر اسپین ترونیکی توجهات زیادی را به خود جلب کرده است. ترابرد و یا دستکاری الکترون ها یا حفره های قطبش یافته در نیمرساناها پتانسل بالایی را برای دستگاه های جدید فراهم می آورد که ترکیبی از ذخیره اطلاعات غیر فرار با سرعت پردازش بالا در توان پایین می باشند که حتی می توانند برای محاسبات کوانتومی استفاده شوند. امکان استفاده از اسپین الکترون بجای بار آن در پردازش، انتقال و کنترل سیگنال ها افق تازه ای در علم و تکنولوژی بوجود آورده است، که به آن اسپین ترونیکی می گویند. فلزات، نیمرساناها و بویژه مواد مبتنی بر کربن بدلیل نظم اسپینی شان در این زمینه بسیار مورد توجه هستند. [۹]. هدف اسپین ترونیکی فهم برهمکنش بین اسپین ذره و محیط حالت-جامد اطرافش و ساخت دستگاه های مفید با استفاده از دانش بدست آمده است [۱۰]. اسپین ترونیکی دامنه کاربردهای وسیعی دارد که می توان به موارد زیر اشاره کرد: دیود ساطع کننده نور-اسپینی، ترانزیستور اثر میدان اسپینی، و حافظه با دستیابی تصادفی مغناطومقاومتی، در واقع کاربردهای اسپین ترونیکی می تواند به گستردگی کاربردهای الکترونیکی باشد.

۲-۲-۱- مواد برای اسپین ترونیکی

در حال حاضر بسیاری از ابزار های پردازش اطلاعات و ارتباطاتی مبتنی بر دستگاه های نیمرسانا می باشند، و همچنین دستگاه های ذخیره سازی اطلاعات مبتنی بر چند لایه هایی از فلزات

مغناطیسی و نارساها می باشند. در کاربردهای تکنولوژیکی فعلی مواد مغناطیسی دارای عناصری با اوربیتال های پر و یا نیمه پر d و f می باشند که نوسانات گرمایی براحتی بر روی این مواد تاثیر می گذارد، به عنوان مثال در بین تمام عناصر موجود در جدول تناوبی تنها آهن، کبالت و نیکل در دمای اتاق فرومغناطیس هستند. مواد مغناطیسی برای استفاده در الکترونیک نانو مقیاس و اسپین ترونیک تقاضای بالایی دارند زیرا این مواد، قطبش اسپین را برای اثرات حالت های الکترونی فراهم می کنند. برای استفاده در اسپین ترونیک در ابتدا باید اسپین قطبش یافته باشد، زمانیکه جریان غیر قطبیده از یک نیم رسانای فرومغناطیس عبور می کند، جریان قطبیده می شود، بنابراین فرومغناطیس مانند یک تقویت کننده برای جریان عمل می کند و جریان قطبیده بدست می آید؛ فرومغناطیس می تواند به عنوان منبع جریان قطبیده اسپینی استفاده شود.

۲-۱-۲-۱- فلزات

بیشتر مواد مغناطیسی فلزات هستند. در این طبقه بندی، فرومغناطیس نتیجه عدم تعادل بین الکترون های جفت نشده با اسپین بالا و پایین می باشد. تمام مواد مغناطیسی بکار گرفته شده رایج دارای اوربیتال های پر نشده d یا f می باشند که متعلق به ستون های d یا f در جدول تناوبی می باشند [۹].

۲-۱-۲-۲- فرومغناطیس های نیم فلزی

گروهی از مواد با عنوان فرومغناطیس های نیم فلزی شناخته می شوند که ویژگی جالب توجه آنها در داشتن تنها یک کانال اسپینی با حالت های پر نشده در سطح فرمی حتی در غیاب میدان مغناطیسی می باشد. در این مواد کانال اسپینی دیگر در سطح فرمی هیچ انرژی ندارد و این کانال اسپینی یا کاملاً پر و یا کاملاً خالی است. طبقه بندی فرومغناطیس های نیم فلزی شامل زیر گروه هایی نظیر آلیاژهای هیوسلر، اکسیدهای فرومغناطیسی و بعضی نیم رساناهای مغناطیسی رقیق شده (DMS) می باشد که هر کدام ویژگی های خود را دارند. آلیاژهای هیوسلر دارای ساختار بلوری

مکعبی با چهار زیرشبکه fcc درهم تنیده می باشند که نحوه قرار گرفتن آنها به ساختار، خواص مغناطیسی معینی می دهد. ترکیباتی نظیر Co_2MnSi ، NiMnSb ، Co_2MnGe و Co_2FeSi در این زیر گروه قرار دارند. اکسیدهای فرومغناطیسی نیم فلزی دارای خواص ویژه ای هستند که باعث شده توجهات زیادی را به خود جلب کنند، ترکیباتی که در این زیرگروه قرار می گیرند ممکن است دارای الکترون های سیال باشند مانند CrO_2 و $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ و یا ممکن است دارای الکترون های جایگزیده باشند مانند Fe_2O_3 ؛ روش ساخت این ترکیبات عاملی در تعیین خواص ترکیب می باشد. نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده، نیمرساناهایی هستند که در ابتدا خاصیت مغناطیسی ندارند سپس درصد کمی از ناخالصی مغناطیسی به آنها افزوده می شود بسته به میزان درصد ناخالصی افزوده شده و فرآیند افزودن ناخالصی این مواد می توانند در دمای اتاق و یا بالاتر از آن فرومغناطیس شوند [۱۴].

۲-۱-۳- نیمرسانا ها

دلایل زیادی برای استفاده از نیمرساناها در صنعت ترونیک وجود دارد که می توان به موارد زیر اشاره کرد: می توان آنها را با خلوص بالا تهیه کرد، حالت تعادل چگالی حامل ها را می توان با آرایش نیمرسانا تغییر داد و اینکه در آنها خواص الکترونی با ولتاژهای ورودی قابل تنظیم است؛ با توجه به این دلایل، نیمرساناهای مغناطیسی کاندید مناسبی برای کاربردهای اسپین ترونیک می باشند. پیشرفت های اخیر در ساخت نیمرساناهای مغناطیسی با کیفیت بالا و همچنین بهبود در تطابق بین فصل مشترک ها باعث دستیابی به ترکیبات نیمرسانایی شده است که بیش از فلزات فرومغناطیسی مورد توجه باشند. تزریق حامل های قطبیده اسپینی از یک نیمرسانای مغناطیسی به یک نیمرسانای معمولی موجب قطبش حامل ها می شود که جهت قطبش بستگی به جهت قطبش در نیمرسانای مغناطیسی دارد. [۱۴]. نیمرساناها در مقایسه با فلزات هم زمان واهلش اسپینی و هم طول همدوسی اسپینی بزرگتری دارند بنابراین نسبت به فلزات برای کاربردهای اسپین ترونیک مناسبتر می باشند.

۲-۲-۱-۴- مواد مبتنی بر کربن

خاصیت مغناطیسی فقط مربوط به عناصر متعلق به بخش دوم جدول تناوبی نیست، به تازگی مواد مغناطیسی مبتنی بر کربن معرفی شده اند که توانسته اند با تمام محدودیت های فن آورانیه موجود در مغناطیس، امیدهایی را در طراحی آهن رباهای تک مولکولی و استفاده در دستگاه های اسپین ترونیک فراهم آورند. به طور کلی انتظار می رود موادی که دارای پیوندهای sp می باشند، میزان سختی موج اسپینی شان بالا باشد بنابراین دستگاه های ساخته شده از این مواد دارای دمای کوری بالاتر و یا طول همبستگی اسپینی بزرگتری می باشند؛ همچنین مواد مبتنی بر عناصر سبک جفت شدگی اسپین-مدار و برهم کنش فوق ظریف (دو پدیده ای که باعث واهلش اسپینی می شوند) ضعیفی را نشان می دهند؛ این ویژگی ها باعث شده مواد مبتنی بر کربن کاندید مناسبی برای ترابرد جریان های اسپینی قطبیده در دستگاه های مبتنی بر اسپین باشند. به علاوه رسانندگی مواد مبتنی بر کربن می تواند از فلزی تا نیمرسانایی تغییر کند [۹].

۲-۲-۲- کاربردهای اسپین ترونیک

در این قسمت مقدمه ای برای اصول فیزیکی و موادی که در تحقیقات و کاربردهای ممکن دستگاه های اسپین ترونیک استفاده می شوند و همچنین بعضی از کاربردهای اسپین ترونیک را بیان می کنیم [۱۰].

۲-۲-۲-۱- حسگرهای مغناطیسی

با توجه به اندازه کوچک و توان پایین سنسورهای GMR می توان آرایه ای از آنها را بر روی یک تراشه قرار داد که در آشکارسازی میدان های مغناطیسی خیلی کوچک با قدرت تفکیک پذیری بسیار بالا استفاده می شوند. پیش از این حسگرهای مغناطیسی حالت جامد مانند حسگرهای اثر هال و حسگرهای مغناطیسی مقاومتی ناهمسانگرد (AMR) به دلیل اندازه، توان یا میزان حساسیت شان حتی قادر نبودند در این زمینه وارد شوند، با پیدایش مقاومت های مغناطیسی بزرگ (GMR) با حساسیت

بیشتر و حسگرهای تونل زنی وابسته اسپینی (SDT) ساخت آرایه هایی از این دست امکان پذیر شد. این دستگاه ها می توانند برای اندازه گیری میدان های مغناطیسی بسیار کوچک، ایجاد تغییر در میدان های مغناطیسی، حسگرهای زیستی، اعتبار سنجی سند از جمله ارز و کارت های اعتباری، و تصویربرداری مغناطیسی استفاده شوند.

۲-۲-۲- حافظه های مغناطیسی با دستیابی تصادفی

حافظه های مغناطیسی با دستیابی تصادفی (MRAM) حافظه های ایده آلی هستند که مهم ترین مشخصه های آنها در غیرفرار بودن، سرعت بالا، عدم محدودیت در نوشتن و هزینه پایین آنها می باشد. کار برای دستیابی به MRAM با دستگاه های مبتنی بر مقاومت مغناطیسی ناهمسانگرد (AMR) آغاز شد، اما تغییر مقاومت در مواد AMR چالش هایی را در زمینه دستیابی به MRAM با چگالی بالا ایجاد کرد. کشف GMR و تغییر بسیار زیاد مقاومت آن امیدهای تازه ای برای ساخت و تولید دستگاه های MRAM ایجاد کرد. اتصالات تونل زنی مغناطیسی (MTJ) با مقاومت مغناطیسی بالایشان امکان خواندن سریعتر را در MRAM ایجاد کرده اند. مهمترین مشخصه های MTJ مقاومت بالا، مقاومت مغناطیسی زیاد و پایین بودن ولتاژ عملکرد آنها می باشد. در حال حاضر کمپانی های زیادی نظیر سامسونگ، موتورولا، توشیبا، فیلیپس و غیره در تلاش هستند برای دستیابی به MRAM هایی که قابل عرضه در بازار باشند [۱۱].

۲-۲-۳- دیود اسپینی

دیودهای اسپینی دستگاه های دو پایانه ای ناهمسانگردی هستند که خواص اپتیکی و الکترونی در آنها به قطبش اسپینی حاملها بستگی دارد [۱۰]، ایده دستگاه های اسپینی دو پایانه ای در ابتدا توسط Mattheis مطرح شد [۱۲]. اخیرا دیودهای اسپینی مختلفی با هدف بیشتر شدن میزان حساسیت مشخصه های I-V به اسپین و میدان مغناطیسی، یا تسهیل در تزریق اسپینی و آشکارسازی آن از میان سطوح نیمرسانا شامل یک نیمرسانای مغناطیسی به عنوان تزریق کننده

پیشنهاد شده و یا ساخته شده است. دیود دوقطبی مغناطیسی (MBD) یک دیود پیوندی p-n است که در آن یک و یا هر دو ناحیه n و p دارای خاصیت مغناطیسی می باشند. دیودهای MBD نمونه ای از دستگاه های اسپین ترونیک دوقطبی می باشند که زیر مجموعه ای از اسپین ترونیک است که در آن هم الکترون ها و هم حفره ها در ترابرد حامل ها شرکت می کنند که الکترون ها یا حفره ها و یا هر دوی آنها دارای قطبش اسپینی می باشند. مزیت دستگاه های اسپین ترونیک دوقطبی مغناطیسی در ترکیب خاصیت مغناطیسی اسپین تعادلی و غیرتعادلی، و روش های موثر برای دستکاری جمعیت حامل های اقلیت می باشد [۱۰].

۲-۲-۲-۴ ترانزیستور اسپینی

ظهور الکترونیک اسپینی یا اسپین ترونیک انتظارات و تاثیرات زیادی در الکترونیک نیمرسانای مجتمع سازی شده^۱ داشته است. یکی از زمینه های مهم در این رشته از تحقیقات دستکاری درجات آزادی اسپینی در دستگاه های نیمرسانای فعال (مانند ترانزیستور) و مدارات مجتمع می باشد. ترانزیستور های اسپینی که در آنها از دو لایه فرومغناطیسی به عنوان تزریق کننده اسپینی و آشکارساز اسپینی استفاده می شود کاندیدی برای دستگاه های فعال در نظر گرفته می شوند. ترانزیستورهای اسپینی رفتار ترانزیستورهای معمول را با مشخصات خروجی متغیر نشان می دهند که می تواند به وسیله مغناطش نسبی در دو لایه فرومغناطیس کنترل شود. در بیشتر ترانزیستورهای اسپینی جریان خروجی می تواند به وسیله وضعیت مغناطش نسبی تغییر کند، این ویژگی اغلب به عنوان "پیکربندی مغناطش مربوط به مشخصه خروجی" نسبت داده می شود. به علاوه پیکربندی مغناطش ترانزیستور های اسپینی می تواند به عنوان داده دودویی استفاده شود. با توجه به این ویژگی های مفید، ترانزیستورهای اسپینی به صورت بالقوه ای در مدارات مجتمع قابل استفاده می باشند برای حافظه های غیرفرار با چگالی خیلی بالا که سلول حافظه از یک ترانزیستور اسپینی واحد ساخته

^۱ -Semiconductor-integrated electronics

شده است [۱۳].

۳-۲- مفاهیم بنیادی در دستگاه های اسپین ترونیکی

سه جنبه مهم در اسپین ترونیک الف) تزریق حامل های قطبیده اسپینی به لایه انتقال دهنده اسپینی، ب) ترابرد اسپین ها در محیط انتقال دهنده اسپینی بوسیله انتشار یا تونل زنی، و ج) آشکارسازی حامل های قطبیده اسپینی می باشد. حامل های قطبیده اسپینی می توانند در لایه انتقال دهنده اسپینی به روش الکتریکی، اپتیکی و یا به روشهای دیگر، تولید شوند.

۳-۲-۱- تزریق اسپینی

تزریق جریان های اسپینی به نیمرساناها یکی از بزرگترین چالش های موجود در اسپین ترونیک می باشد [۱۴]. اساس دانش ما از تولید حامل های قطبیده اسپینی و ترابرد در مواد و سیستم های فرومغناطیسی در سال ۱۹۳۶ توسط موت^۱ مطرح شده است. او مشاهده کرد که مقاومت یک فلز فرومغناطیس در حضور میدان مغناطیسی تغییر می کند و توضیح داد که در دماهای به اندازه کافی پایین الکترون ها با اسپین اقلیت و اکثریت با گشتاور مغناطیسی موازی و پاد موازی با جهت قطبش در فرآیند پراکندگی ترکیب نمی شوند، بنابراین رسانش را می توان به عنوان مجموع دو قسمت نابرابر و مستقل تصاویر دو اسپین اقلیت و اکثریت دانست که در جریان موجود در فرومغناطیس قطبیده اسپینی حضور دارند [۸]. بسیاری از مواد می توانند در حالت فرومغناطیس خود میزان قابل توجهی حامل قطبیده اسپینی مساوی داشته باشند، این به تنهایی برای کاربردهای اسپین ترونیکی کافی نیست، اهمیت جریان قطبیده اسپینی فقط به کاربرد آن در دستگاه های اسپین ترونیکی محدود نمی شود؛ از این نوع جریان همچنین می توان در ابزارهای حساس طیف سنجی برای مطالعه طیف گسترده ای از خواص بنیادی مانند جفت شدگی اسپین-مدار و یا برهمکنش فوق ظریف، و همچنین در تولید پرتوهای قطبیده اسپینی برای اندازه گیری نقض پاریده در فیزیک انرژی های بالا استفاده

¹-Mott

کرد. اسپین غیر تعادلی را می توان به روش های تراپردی، اپتیکی و یا رزونانسی تولید کرد [۱۰].

۲-۳-۲- واهلش و تراپرد اسپینی

پس از تزریق اسپینی، حامل های قطبیده اسپینی برای رسیدن به الکتروود دیگر باید از میان محیط انتقال دهنده اسپینی عبور کنند؛ در هنگام عبور از این محیط ممکن است حامل ها، جهت اولیه اسپینی شان را از دست بدهند که به آن واهلش اسپینی گفته می شود [۸]، در واقع واهلش اسپینی باعث متعادل سازی اسپینی می شود بنابراین در اسپین ترونیک حائز اهمیت است [۱۰]. واهلش اسپینی می تواند به دلیل فرآیندهای مختلفی ایجاد شود اما مهم ترین مکانیزم های ایجاد آن در جامدات جفت شدگی اسپین-مدار و برهمکنش های فوق ظریف می باشند که در ادامه به آنها اشاره می کنیم.

۲-۳-۲-۱- جفت شدگی اسپین-مدار

جفت شدگی اسپین-مدار، برهمکنش بین اسپین الکترون و حرکت مداریش در اطراف هسته می باشد. وقتی که یک الکترون در یک میدان الکتریکی محدود مربوط به هسته حرکت می کند، جفت شدگی اسپین-مدار به دلیل برهمکنش الکترومغناطیسی بین اسپین الکترون و میدان الکتریکی، باعث تغییر در سطوح انرژی الکترون های اتمی می شود.

۲-۳-۲-۲- برهمکنش فوق ریز

منشا دیگری برای واهلش اسپینی، برهمکنش فوق ریز می باشد. برهمکنش فوق ریز به دلیل برهمکنش بین هسته ها و محیط اطراف آن ایجاد می شود. این برهمکنش می تواند باعث تغییر سطوح انرژی و یا از بین رفتن تبهگنی شود.

۲-۳-۲-۳- آشکارسازی اسپینی

آشکارسازی اسپینی فرآیندی است که در آن حامل های قطبیده اسپینی رسیده به الکتروود دوم با جهت اسپینی اولیه شان جمع آوری یا آشکارسازی می شوند. برای جمع آوری اسپینی موثر بین

الکتروود دوم و محیط انتقال دهنده اسپینی ترابرد بالاستیکی یا تونل زنی مورد نیاز است. بنابراین داشتن فصل مشترکی که به خوبی بین الکتروود دوم و محیط انتقال دهنده اسپینی تعریف شده باشد خیلی مهم است. آزمایشات اخیر انجام شده با استفاده از سد تونلی شاتکی Fe/GaAs نشان می دهد که حساسیت آشکارساز اسپینی را می توان با ولتاژ بایاس اعمالی عبوری از فصل مشترک تنظیم کرد [۸].

۲-۳-۴ - GMR و TMR

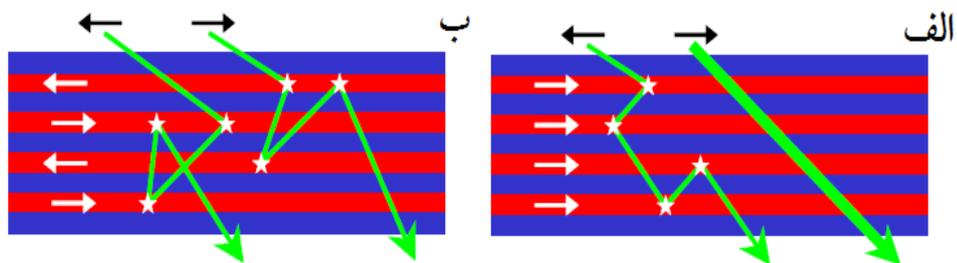
مقاومت مغناطیسی بزرگ^۱ (GMR) و مقاومت مغناطیسی تونلی^۲ (TMR) دو مکانیزم ترابردی مهم برای دستگاه های کاربردی کوانتومی هستند. مقاومت در فلزات به مسیر آزاد میانگین الکترون های رسانش بستگی دارد، هرچه مسیر آزاد میانگین کمتر باشد مقاومت بیشتر است؛ بنابراین اگر ضخامت لایه های نازک^۳ کمتر از مسیر آزاد میانگین باشد مقاومت در لایه می تواند بیشتر از حالت حجمی باشد. در رساناهای غیر مغناطیسی تعداد الکترون های با اسپین بالا و پایین در تمام نوارهای انرژی باهم برابر است. در فلزات فرومغناطیس به دلیل برهم کنش تبادل فرومغناطیسی تعداد الکترون های با اسپین بالا و پایین در زیر نوارهای رسانش ماده فرومغناطیس باهم برابر نیست، بنابراین امکان پراکنده شدن الکترون زمانی که از یک رسانای فرومغناطیسی عبور می کند به جهت اسپین آن بستگی دارد. اگر دو لایه نازک فرومغناطیسی را بوسیله یک لایه نازک غیر مغناطیسی از هم جدا کنیم مقاومت را می توان به وسیله تغییر در گشتاور لایه های فرومغناطیسی که به صورت موازی یا پادموازی باشند، تغییر داد. برای اینکه پراکندگی الکترونی سهم قابل توجهی از مقاومت نهایی را داشته باشد لازم است ضخامت لایه ها کمتر از مسیر آزاد میانگین الکترون ها در ماده کپه ای باشد. معمولاً در بیشتر فرومغناطیس ها مسیر آزاد میانگین از مرتبه چند ده نانومتری است

¹- Giant magnetoresistance

²- Tunneling magnetoresistance

³- Thin films

بنابراین ضخامت هر لایه باید کمتر از ده نانومتر باشد [۱۱]. در شکل ۱-۲ یک ساختار GMR نشان داده شده است، GMR از چندین لایه تشکیل شده است که بعضی از لایه ها فرومغناطیسی هستند یعنی دارای توزیع نابرابری از الکترون ها با اسپین بالا و پایین می باشند. وقتی قطبش در این لایه های فرومغناطیسی GMR موازی باهم باشد، اگر الکترون عبوری دارای اسپین موازی با قطبش صفحات باشد در هنگام عبور پراکنده نمی شود ولی اگر اسپین الکترون مخالف قطبش صفحات باشد الکترون با عبور از لایه ها دچار پراکندگی می شود؛ وقتی قطبش در هر دو لایه فرومغناطیسی مجاور در GMR پاد موازی باشد بیشترین میزان پراکندگی اسپینی روی می دهد، در این چنین ساختاری با عبور الکترون از درون لایه های مجاور در هر لایه الکترون ها پراکنده می شوند لذا الکترون ها بیشترین میزان پراکندگی را خواهند داشت [۱۴]. اساس دستگاه های TMR بر عبور جریان الکتریکی با مکانیزم کوانتومی تونل زنی از یک سد عایق که بین دو لایه فرومغناطیسی قرار گرفته است، می باشد. با توجه به جهت گیری نسبی مغناطش در لایه های فرومغناطیسی دو پایانه اسپینی اتصالات تونل زنی، می توان تغییرات زیادی را در مقاومت تونلی ایجاد کرد. نوع ماده عایق همچنین ارتفاع و پهنای سد نقش تعیین کننده ای در TMR دارد. بعلاوه TMR با ناخالصی های سد، دما و ولتاژ بایاس تغییر می کند. نوع و ترکیب مواد فرومغناطیس/عایق فاکتور تعیین کننده ای در بدست آوردن مقدار TMR می باشد. TMR و GMR نمونه هایی از اثرات اسپین ترونیک می باشند که در آنها شار الکترون ها با اسپین قطبیده، به کمک میدان های مغناطیسی دستکاری می شوند [۱۴].



شکل ۱-۲: پراکندگی اسپینی در GMR با مجموعه ای از لایه ها با قطبش (الف) موازی و (ب) پاد موازی [۱۵].

فصل سوم

نظریه تابعی چگالی

در سال ۱۹۲۶ شرودینگر اولین گزارشات مربوط به معادله موج معروف خود را منتشر کرد. تابع موج شرودینگر به دلیل دربرداشتن تمام اطلاعات موجود درباره یک سیستم در ابتدا بسیار امیدبخش به نظر می رسید، اما بیشتر سیستم های کاربردی مورد مطالعه شامل تعداد زیادی الکترون بودند که باهم برهمکنش می کردند، و این باعث می شد که نیاز به پیدا کردن راه حلی برای معادله شرودینگر به صورت نمایی با افزایش تعداد الکترون ها افزایش یابد، بنابراین در عمل این معادله به سیستم هایی با تعداد کمی الکترون محدود می شد ($N \lesssim 10$)؛ بنابراین روش تابع موج که برای مطالعه خواص مربوط به مولکول های کوچک بسیار موفقیت آمیز بود برای مطالعه جامدات مناسب نبود. این مشکل توسط دیراک در سال ۱۹۲۹ تشخیص داده شد. در ۱۹۶۴ هوهنبرگ و کوهن نشان دادند که حالت پایه انرژی کل یک سیستم با الکترون های برهمکنش کننده، تابع منحصر به فردی از چگالی الکترونی آن است. همچنین هوهنبرگ و کوهن برای کم کردن مشکل مربوط به پیدا کردن انرژی حالت زمینه مربوط به گاز الکترونی در یک پتانسیل خارجی (به عنوان مثال در حضور هسته های یونی) که در رابطه با کمینه کردن یک تابعی از تابع چگالی سه بعدی ظاهر می شود یک اصل تغییر پذیر را کشف کردند. متأسفانه تعریف تابعی، مجموعه ای از توابع موج $3N$ بعدی را شامل می شود. در ۱۹۶۵ کوهن و شم به موفقیت بزرگی دست یافتند آنها دریافتند که مسئله الکترون های برهمکنش کننده در حضور یک پتانسیل خارجی را می توان دقیقاً به مجموعه ای از الکترون های غیر برهمکنشی در حضور یک پتانسیل موثر خارجی تعمیم داد. این موفقیت باعث دستیابی به مجموعه ای از معادلات تک ذره ای خودسازگار شد که امروزه به عنوان معادلات کوهن-شم شناخته می شوند [۱۶]. روش های مختلفی برای توصیف محاسباتی سیستم های بس ذره ای توسعه پیدا کرده است که هر کدام با توجه به اهداف و خواص مورد مطالعه از تقریب ها و مدل های نظری مختلفی استفاده می کنند. یکی از نظریه های مهم برای بسیاری از محاسبات سیستم های بس ذره ای مانند مولکول ها و بلورها، نظریه تابعی چگالی است. استفاده از این نظریه به همراه رهیافت کوهن-شم به

یک توصیف تک ذره ای از سیستم های بس ذره ای می انجامد که تاثیر زیادی در ساده سازی محاسبات آنها دارد به همین دلیل امروزه مبنای بسیاری از محاسبات کوانتومی به شمار می رود.

۳-۲- نظریه تابعی چگالی

۳-۲-۱- مسئله بس ذره ای

بررسی مجموعه ای از اتم ها، مولکول ها، جامدات، گازها، مایعات و غیره را شامل می شود که از الکترون ها و هسته ها تشکیل شده اند. توسط مکانیک کوانتومی می توان یک سیستم برهمکنشی از الکترون ها و هسته ها را توسط معادله شرودینگر توصیف کرد:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (۱-۳)$$

که E ویژه مقدار انرژی می باشد و عملگر هامیلتونی بس ذره ای به صورت زیر می باشد:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_e} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \nabla_i^2 + \sum_{I=1}^{N_{nuc}} \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\right) \nabla_I^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|r_i - R_I|} + \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|R_I - R_J|} \quad (۲-۳)$$

در معادله (۲-۳) بخش اول و دوم انرژی های جنبشی الکترون ها و هسته ها و سه بخش آخر به ترتیب برهمکنش های بین الکترون-الکترون، الکترون-هسته و هسته-هسته می باشند، \hbar ثابت پلانک، m و M به ترتیب جرم های الکترون و هسته، Z_I عدد اتمی I امین اتم، e بار الکترون، R_I و r_i موقعیت i امین الکترون و I امین هسته می باشند. حل معادله شرودینگر بس ذره ای بسیار پیچیده است. برای ساده سازی مسئله از تقریب بورن اوپنهایمر^۱ استفاده شده است، که بیان می کند هسته ها بسیار سنگین تر از الکترون ها هستند و بسیار کندتر از الکترون ها حرکت می کنند، در نتیجه می توان حرکت هسته ها و الکترون ها را جدا کرد. فرض بر این است که موقعیت اتم ها ثابت شده اند در حای که الکترون ها در زمینه میدان باری هسته ها حرکت می کنند. تابع موج کلی می تواند به دو قسمت تابع موج الکترونی و یونی جداسازی شود، در نتیجه معادله شرودینگر برای قسمت الکترونی به

^۱ Born-Oppenheimer

صورت زیر نوشته می شود:

$$\hat{H}_e(r, R)\Psi_e = E_e\Psi_e(r, R) \quad (3-3)$$

که عملگر هامیلتونی الکترونی، توسط معادله زیر بیان می شود:

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^{N_e} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \hat{V}_{ext} \quad (4-3)$$

\hat{V}_{ext} پتانسیلی است که توسط هسته‌ها روی الکترون‌ها عمل می کند. توجه شود که برهم کنش بین هسته‌ها به عنوان یک پارامتر وارد می شود. اگر چه تعداد درجات آزادی سیستم توسط تقریب بورن-اوپنهایمر می تواند کاهش یابد اما حل مسئله بر هم کنشی الکترون-الکترون همچنان مشکل است. بعلاوه تابع موج الکترونی وابسته به مختصات تمام الکترون‌ها است.

۳-۲-۲- نظریه هوهنبرگ-کوهن^۱

هدف اصلی نظریه تابعی چگالی، توصیف یک سیستم برهم کنشی براساس چگالی الکترونی بجای توابع موج بس ذره‌ای می باشد. نظریه تابعی چگالی بر اساس دو نظریه بنیادی، توسط هوهنبرگ و کوهن پایه ریزی شد [۱۷]. نظریه اول بیان می کند که انرژی حالت پایه یک سیستم بر هم کنشی از الکترون‌ها، تابعی یکتا^۲ از چگالی بار الکترونی است. نظریه اول هوهنبرگ-کوهن فقط اثباتی است بر وجود تابعی از چگالی الکترونی، اگرچه شکل درست تابعی ناشناخته است. از نظریه دوم هوهنبرگ-کوهن این مطلب اثبات می شود که انرژی کل هر سیستم بس الکترونی نسبت به چگالی حالت پایه آن، از یک اصل وردشی^۳ تبعیت می کند. بر طبق این نظریه مقدار چشم‌داشتی هامیلتونی در معادله ۳-۴ می تواند به صورت زیر بیان شود:

¹ Hohenberg-Kohn

² Unique functional

³ Variational principle

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = E[n(\mathbf{r})] \quad (5-3)$$

که $E[n(\mathbf{r})]$ تابعی انرژی کل است و $n(\mathbf{r})$ چگالی الکترونی است. اگر شکل تابعی انرژی مشخص باشد، می توان چگالی الکترونی را تا جایی که تابعی انرژی توسط اصل وردشی کمینه شود تغییر داد:

$$\left. \frac{\delta E[n(\mathbf{r})]}{\delta n} \right|_{n=n_0} = 0 \quad (6-3)$$

از معادله (6-3) چگالی الکترونی که به کمینه انرژی مربوط می شود، چگالی حالت پایه $n_0(\mathbf{r})$ می باشد. بر طبق نظریه اول، انرژی حالت پایه می تواند به صورت زیر بیان شود:

$$E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle = E[n_0(\mathbf{r})] \quad (7-3)$$

۳-۲-۳- معادلات کوهن-شم^۱

راه حلی برای کاهش مسئله بس ذره ای حقیقی، به یک مسئله ی تک الکترونی، توسط کوهن و شم مطرح شد. الکترون های برهم کنشی، جایگزین الکترون های غیر برهم کنشی شد، که تحت یک پتانسیل موثر^۲ حرکت می کنند. انرژی تابعی کل در معادله (5-3) می تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$E[n(\mathbf{r})] = T_0[n(\mathbf{r})] + \frac{1}{2} \iint \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' + \int V_{ext}(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} + E_{xc}[n(\mathbf{r})] \quad (8-3)$$

در معادله (8-3)، $T_0[n(\mathbf{r})]$ تابعی انرژی جنبشی سیستم الکترونی غیر برهم کنشی، بخش دوم انرژی الکترواستاتیکی یا انرژی هارتری^۳ و بخش سوم انرژی خارجی ناشی از هسته ها می باشند و بخش آخر همه ی باقی مانده آنچه که تصحیح کننده انرژی است، که انرژی تبادلی و همبستگی^۴ نامیده می شود. با کمینه کردن معادله (8-3) نسبت به چگالی، معادلات تک ذره ای کوهن شم برابر است با:

¹Kohn-Sham

²Effective potential

³Hartree energy

⁴Exchange and correlation energy

$$\left[-\frac{\nabla_i^2}{2} + V_{eff}(\mathbf{r})\right] \Psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (9-3)$$

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = V_{ext} + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \frac{\delta E_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} \quad (10-3)$$

توجه شود که توابع موج کوهن-شم $\Psi_i(\mathbf{r})$ ، هیچ معنی فیزیکی مستقیمی را نمی‌دهند. آن‌ها فقط توابع کمکی^۱ برای محاسبه چگالی الکترونی هستند. چگالی الکترونی می‌تواند به صورت زیر باشد:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (11-3)$$

۳-۲-۴- تابعی‌های تبادلی-همبستگی^۲

رویکرد کوهن-شم نشان داد که چطور مسئله بس‌ذره‌ای را به یک مسئله تک الکترونی موثر تبدیل کنیم. البته نیاز است که تابعی تبادلی همبستگی، $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$ مشخص و تعیین شود. متأسفانه، شکل دقیق تابعی همبستگی-تبادلی به سادگی شناخته شده نیست؛ بنابراین باید از تقریب استفاده نمود.

۳-۲-۴-۱- تقریب چگالی موضعی^۳ (LDA)

ساده‌ترین تقریب، تقریب چگالی موضعی (LDA) نامیده می‌شود. تقریب چگالی موضعی برای پتانسیل تبادلی-همبستگی توسط کوهن-شم در سال ۱۹۶۵ ارائه شد، که از انرژی تبادلی-همبستگی گاز الکترونی همگن بدست می‌آید. تابعی تبادلی-همبستگی LDA به صورت زیر است:

$$E_{xc}^{LDA}[n(\mathbf{r})] \approx \int n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}^{homo}(n(\mathbf{r})) d\mathbf{r} \quad (12-3)$$

که ε_{xc}^{homo} انرژی همبستگی-تبادلی چگالی گاز الکترونی همگن، با چگالی الکترونی $n(\mathbf{r})$ می‌باشد. بنابراین تنها اطلاعاتی که نیاز می‌باشد، انرژی تبادلی-همبستگی گاز الکترونی است که محاسبه دقیق

¹ Auxiliary functions

² Exchange-Correlation Functionals

³ Local Density Approximation

آن امکان پذیر است. به دلیل آنکه تابعی، از چگالی الکترونی یکنواخت موضعی بدست می‌آید انتظار
خطا برای مسائلی می‌رود که چگالی‌های آن‌ها به سرعت تغییر می‌کند [۱۸]. اگرچه تقریب LDA برای
جامدات کپه‌ای بسیار خوب کار می‌کند، اما در صورت تغییر سریع چگالی الکترونی، همانند داخل اتم
و مولکول، بهتر است از تابعی دیگری استفاده شود.

۳-۲-۲-۲- تقریب شیب تعمیم یافته^۱ (GGA)

تقریب پر استفاده دیگری که نسخه تعمیم یافته و بهبود یافته LDA محسوب می‌شود
تقریب GGA می‌باشد که فرمول بندی‌های متفاوتی از آن توسعه پیدا کرده است. تلاش‌های زیادی برای
پیدا کردن تابعی خوب و مناسب از این تقریب انجام گرفته است. دو تا از پر استفاده‌ترین تابعی‌های
این تقریب، تابعی پر دو-ونگ (PW91) [۱۹] و پر دو-بورگ-ارنزهوف (PBE) [۲۰] می‌باشد. در این
پایان نامه از دومین تابعی این تقریب بهره گرفته شده است. در تقریب GGA، انرژی تبادل-همبستگی
علاوه بر چگالی الکترونی در هر نقطه، به تغییرات چگالی در آن نقطه نیز وابسته است، و برابر است با:

$$E_{xc}^{GGA} = \int n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}(n(\mathbf{r}), |\nabla n(\mathbf{r})|) d\mathbf{r} = \int n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}^{homo}(F_{xc}(n, |\nabla n|)) d\mathbf{r} \quad (۱۳-۳)$$

که در این رابطه عبارت F_{xc} یک تابعی بدون بعد است که به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$F_{xc}(n, |\nabla n|) = F_x(n, |\nabla n|) + F_c(n, |\nabla n|) \quad (۱۴-۳)$$

محاسبه F_c مشکل‌تر از F_x می‌باشد اگر چه نقش آن در عبارت بالا کمتر است، سهم انرژی
همبستگی در مقایسه با انرژی تبادل بسیار ناچیز است. برای محاسبه F_c تابعی‌های مختلفی پیشنهاد
شده است. تنها نام تابعی‌های مربوط به F_x ذکر می‌شود که در بالا دو تا از مهم‌ترین تابعی‌های این
تقریب ذکر شد و این به دلیل اهمیت بیشتر F_x نسبت به F_c می‌باشد [۲۰]. برای سیستم‌های
قطبیده اسپینی، چگالی انرژی تبادل-همبستگی در این تقریب به صورت زیر می‌باشد:

^۱ Generalized Gradient Approximation

$$\varepsilon_{xc}^{\pm}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{xc}^{\pm}(n^{+}(\mathbf{r}), n^{-}(\mathbf{r}), |\nabla n^{+}(\mathbf{r})|, |\nabla n^{-}(\mathbf{r})|) \quad (3-15)$$

۳-۳- روش‌های حل معادلات تک ذره‌ای کوهن-شم

تنوع زیادی در کدهای ابتدا به ساکن وجود دارد که از روش DFT برای محاسبه ساختار الکترونی مواد استفاده می‌کنند [۲۱-۲۶]. تفاوت اساسی بین کدها و روش‌های مختلف، عموماً مربوط به مجموعه پایه‌ای است که توابع موج کوهن-شم بر اساس آن بسط داده می‌شوند، همچنین تقریب‌های به کار گرفته شده در آن‌ها که معمولاً یک موازنه بین دقت و سرعت در این کدها وجود دارد. مجموعه پایه‌هایی که برای بسط تابع موج کوهن-شم $\psi_i(\mathbf{r})$ بکار می‌روند، دارای سه گروه عمده می‌باشند:

۱- روش پایه‌های غیرجایگزیده امواج تخت (PW): کدهایی نظیر VASP و QUANTUM ESPRESSO و غیره بر این مبنا می‌باشند.

۲- روش پایه‌های جایگزیده: از جمله توابع Gaussian، مانند کد Gaussian و اوربیتال‌های اتمی نظیر کد SIESTA و

۳- روش هیبریدی و ترکیبی کره‌های اتمی، نظیر اوربیتال مافین-تین خطی (LMTO)^۱ که در آن با در نظر گرفتن کره‌های اتمی فرضی (کره مافین-تین)، همچنین شعاع مافین-تین و انتخاب اوربیتال اتمی به‌عنوان پایه درون کره‌ها و امواج تخت در خارج کره‌ها به حل مسئله می‌پردازد. این روش تلفیقی از دو روش بالا است که از دو نوع پایه استفاده می‌کند. کد محاسباتی WIEN2k بر این روش استوار می‌باشد.

¹ Linearized Muffin-Tin Orbitals

۳-۳-۱- کد SIESTA^۱

کد سیستا بر مبنای روش دوم، یعنی بسط تابع موج کوهن-شم بر مبنای ترکیب خطی از اوربیتال‌های جایگزیده‌ی اتمی (LCAO) به‌عنوان پایه، و تقریب شبه پتانسیل برای توصیف الکترون‌های مغزی و هسته می‌باشد. در این قسمت توصیف مختصری از SIESTA ارائه می‌شود و توصیفی دقیق‌تر را می‌توان در مراجع [۲۱، ۲۷-۲۹] یافت.

۳-۳-۱- مجموعه پایه جایگزیده اوربیتال اتمی

در کد SIESTA، برای حل معادله‌ی کوهن-شم، از ترکیب خطی اوربیتال‌های اتمی عددی جایگزیده به‌عنوان مجموعه پایه به منظور بسط، استفاده می‌شود. این اوربیتال‌های اتمی می‌توانند به صورت حاصل ضربی از یک تابع شعاعی در یک هماهنگ‌گروی نوشته شوند:

$$\phi_{lmn}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (۳-۱۶)$$

که $R_{n,l}$ یک تابع شعاعی برای اوربیتال n ، $Y_{l,m}$ یک هماهنگ‌گروی حقیقی برای تکانه زاویه‌ای اوربیتالی l و عدد کوانتومی مغناطیسی m می‌باشد. تابع شعاعی فراتر از یک شعاع خاص r_c صفر می‌شود یعنی $R_{n,l}(r_c) = 0$. بر خلاف امواج تخت، دقت نتایج برای یک سیستم داده شده بر مبنای اوربیتال‌های اتمی، وابسته به اندازه و شکل پایه‌هاست. اندازه‌ی تعداد پایه‌ها بر مبنای زتای (ξ) چند گانه می‌باشد که می‌توان برای هر m و l ، تعداد اختیاری از توابع شعاعی بدون گره استفاده کرد که اوربیتال‌های زتای ξ مرتبه بالاتر گفته می‌شود [۲۱]. هر اوربیتال زتا ξ ، مربوط به هماهنگ‌های گروی مشابه و مشترک با توابع شعاعی متفاوت می‌باشد. در اینجا به معرفی مجموعه اندازه پایه‌های متفاوت که در SIESTA موجود می‌باشد پرداخته می‌شود:

۱- اوربیتال‌های زتای یگانه ^۱ (sz):

^۱ Spanish Initiative for Electronic Simulation with Thousands of Atoms

مجموعه پایه‌ی زتای یگانه (SZ)، آرایش الکترون‌های لایه‌ی ظرفیت را پوشش می‌دهد که محتوی همه پوسته‌های باز و در بعضی مواقع پوسته‌های بسته با انرژی بالا می‌باشد. این توابع پایه توسط حل معادله‌ی شعاعی شرودینگر برای اتم، با پتانسیل محدود کننده^۲ بدست می‌آید. پتانسیل محدود کننده توسط پارامترهایی نظیر V_0 ، r_{inn} و r_c تعریف می‌شود. در اینجا V_0 میزان نرمی^۳ پتانسیل محدود کننده را تعیین می‌کند. پارامتر r_c تعیین کننده‌ی شعاع محدودیت برای اوربیتال‌های عددی می‌باشد. شعاع محدود کننده r_c به‌عنوان موقعیت اولین گره‌ی تابع موج با انرژی $E_{nl} + \Delta E_{nl}$ در نظر گرفته شده است که E_{nl} انرژی مربوط به شبه ویژه حالت اتمی^۴ و ΔE_{nl} انرژی برانگیختگی اوربیتال شبه اتمی به دلیل محدودیت آن در یک بازه‌ی محدود می‌باشد. مضاف بر آن، r_{inn} شعاع داخلی است که پتانسیل محدود کننده نرم آغاز می‌شود.

۲- اوربیتال‌های زتای دوگانه (DZ)^۵

اوربیتال‌های زتای دوگانه (DZ) با توجه به ادامه‌ی روند شکافت مجموعه پایه‌ی Gaussian ساخته می‌شود. اوربیتال شکافت، توسط ساختن یک پایه‌ی اوربیتالی تحلیلی^۶ که به آرامی در شعاع r_{split} اوربیتال زتای اولیه را منطبق کند، به دست می‌آید. شکل تابع استفاده شده برای اوربیتال شکافت:

$$R_l^{2\xi}(r) = \begin{cases} r^l(a_l - b_l r^2) & \text{if } r < r_l^{split} \\ R_l^{1\xi}(r) & \text{if } r \geq r_l^{split} \end{cases} \quad (17-3)$$

ثابت های a_l و b_l با استفاده از پیوستگی توابع موج و مشتقات آن‌ها در r_l^{split} تعیین می‌شوند.

¹ Single zeta

² Confinement potential

³ Softness

⁴ Pseudo-atomic eigenstate

⁵ Double zeta

⁶ Analytical orbital

تابع شعاعی دومین زتا ξ ، یعنی $R_l^{2\xi}(r)$ در $r \geq r_l^{split}$ دنباله‌ای مشابه اولین زتا ξ دارد. شعاع شکافت r_l^{split} ، توسط پارامتر نرم شکافت^۱ تعیین می‌شود. این پارامتر، شعاع انطباق (r_m) یک اوربیتال تحلیلی که اوربیتال زتای اولی را به پایه‌ی زتای دوگانه می‌شکافت، پیدا می‌کند. شعاع انطباق r_m ، با مشخص شدن اینکه روند شکافت اوربیتال نسبت به روند اوربیتال زتای اولی باید دارای مقدار split-norm باشد، تعیین می‌شود. مقدار معتبر split-norm در بازه‌ی بین ۰ تا ۱ (به غیر از شامل شدن خود ۰ و ۱) قرار دارد. r_c ، شعاع محدود کننده‌ی اوربیتال زتای اولی و r_m ، شعاع محدود کننده‌ی اوربیتال زتای دومی می‌باشد. مقدار r_c ، توسط انرژی برانگیختگی و مقدار r_m توسط پارامتر (Split-Norm) کنترل و تعیین می‌شود.

۳- اوربیتال‌های قطبیده

اوربیتال‌های قطبیده دارای تکانه زاویه‌ای بیشتری نسبت به اوربیتال‌های ظرفیت می‌باشند. این دسته از اوربیتال‌ها با اختلال اوربیتال‌های زتای یگانه توسط میدان الکتریکی تولید می‌شوند و 1+1 مولفه اوربیتال اختلالی از آن حاصل می‌شود. اوربیتال‌های قطبیده به این صورت که اوربیتال‌های p می‌توانند برای قطبیده کردن اوربیتال‌های s ، و اوربیتال‌های d برای قطبیده کردن اوربیتال‌های p مورد استفاده قرار بگیرند.

۳-۱-۲- شبه پتانسیل^۲

پتانسیل کولنی قوی و الکترون‌های مغزی^۳ به شدت مقید در اتم‌ها، باعث تغییراتی بسیار سریع در توابع موج با تعداد زیادی گره می‌شوند. در نتیجه به تعداد زیادی توابع پایه، برای توصیف و ساخت آن‌ها (توابع موج الکترون‌های مغزی) نیاز داریم. رهیافتی برای کاهش تعداد توابع پایه، شبه پتانسیل

¹ Split norm parameter

² Pseudopotential

³ Core electrons

می‌باشد. برای کاهش تعداد حالت‌ها در محاسبات، می‌توان الکترون‌های یک اتم را به الکترون‌های مغزی و ظرفیت تقسیم نمود. الکترون‌های ظرفیت، الکترون‌هایی هستند که پوسته‌های خارجی اتم را اشغال می‌کنند و مسئول پیوندهای شیمیایی می‌باشند. بنابراین خواص الکترونی این حالت‌ها به میزان زیادی به محیط شیمیایی آن‌ها بستگی دارد. از طرف دیگر الکترون‌های مغزی الکترون‌هایی هستند که پوسته‌های داخلی اتم و نزدیک به هسته را اشغال می‌کنند. این الکترون‌ها در پیوندهای شیمیایی مشارکت ندارند و خواص الکترونی آن‌ها به میزان جزئی از محیط شیمیایی اطراف تاثیر می‌پذیرد. بنابراین فرض می‌شود پتانسیل حاصل از الکترون‌های مغزی مستقل از محیط است. در نتیجه می‌توان الکترون‌های مغزی را از محاسبات حذف نمود و تنها الکترون‌های ظرفیت را در نظر گرفت. تنها اثری که الکترون‌های مغزی دارند، استتار پتانسیل هسته می‌باشد. پس می‌توان پتانسیل ناشی از الکترون‌های مغزی و هسته را با یک پتانسیل موثر جایگزین کرد. این پتانسیل موثر در محل هسته، تکینه است اما از آنجا که خواص الکترونی مولکول‌ها و جامدات توسط چگالی بار در ناحیه پیوند تعیین می‌شود، نیاز به توصیف دقیق چگالی بار در نزدیکی هسته وجود ندارد. بنابراین می‌توان پتانسیل موثر را با شبه پتانسیل V_{pp} ، جایگزین کرد تا از تکینگی در هسته جلوگیری شود و در فواصل دورتر از هسته، پتانسیل صحیح را ایجاد کند. در نتیجه توابع شبه موج با توابع موج اتمی در نزدیک هسته متفاوت‌اند اما در ناحیه پیوندی، در فواصل دور از هسته یکسان می‌باشند. به اتمی که هسته والکترون‌های مغزی آن توسط شبه پتانسیل جایگزین شود، شبه اتم گفته می‌شود. در SIESTA شبه پتانسیل‌های ترولیر-مارتین¹ استفاده می‌شود [۳۰-۳۲]. پتانسیل اتمی تک ذره‌ای موثر که روی الکترون‌های ظرفیت اثر می‌کند، با جمع پتانسیل موثر حاصل از هسته و الکترون‌های مغزی (شبه پتانسیل) به اضافه پتانسیل‌های حاصل از الکترون‌های ظرفیت (پتانسیل هارتری و پتانسیل همبستگی-تبادلی) دیگر برابر است. به دلیل این که $V_{ion,l}^{PP}(\mathbf{r})$ (شبه پتانسیل مربوط به هسته

¹ Troullier-Martins pseudopotentials

و الکترون‌های مغزی)، شبه موضعی می‌باشد، یعنی این پتانسیل غیر از \mathbf{r} به عدد کوانتومی l نیز بستگی دارد، بنابراین می‌توان شبه پتانسیل شبه موضعی را به دو قسمت بلندبرد مستقل از l ، $V_{ion}^{local}(\mathbf{r})$ و کوتاه برد وابسته به l ، $V_l^{nonlocal}(\mathbf{r})$ تقسیم کرد:

$$V_{ion,l}^{PP}(\mathbf{r}) = V_{ion}^{local}(\mathbf{r}) + V_l^{nonlocal}(\mathbf{r}) \quad (18-3)$$

عملگر شبه پتانسیل یونی با فرمول بندی ترولیر-مارتین به صورت زیر نوشته می‌شود [۲۸]:

$$\hat{V}_l^{PP}(\mathbf{r}) = V_{ion}^{local}(\mathbf{r}) + \sum_l V_l^{nonlocal}(\mathbf{r}) \hat{p}_l \quad (19-3)$$

که \hat{p}_l ، یک تصویرکننده روی مولفه l تابع موج است. قسمت وابسته به l ، به شکل کاملاً غیر موضعی \hat{V}^{KB} که توسط کلینمن-بای لندر (KB)^۱ ارائه شده، تقریب زده می‌شود [۱۹، ۲۸-۳۰]. نتیجه این است که عملگر شبه پتانسیل برد محدود دارد و به شکل زیر در می‌آید:

$$\hat{V}_{ion}^{PP}(\mathbf{r}) = V_{ion}^{local}(\mathbf{r}) + \hat{V}^{KB} \quad (20-3)$$

شبه پتانسیل‌ها باید دارای ویژگی‌های زیر باشند: (۱) ویژه مقادیر توابع موج تمام الکترونی برای آرایش مرجع اتمی انتخابی در تطابق با توابع موج شبه اتمی باشد. (۲) تابع موج تمام الکترونی و شبه تابع موج و نیز پتانسیل تمام الکترونی و شبه پتانسیل در خارج از ناحیه مغزی و شعاع مغزی، $r \geq r_c$ بر هم منطبق باشند. (۳) مقدار بار درون ناحیه مغزی $r < r_c$ ، که با تابع موج تمام الکترونی و شبه تابع موج محاسبه می‌شود، یکسان باشد (شرایط پایستگی بار).

$$\int_0^{r_c} r^2 |\psi_l^{ae}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \int_0^{r_c} r^2 |\psi_l^{ps}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \quad (21-3)$$

(۴) پراش امواج در اثر وجود ناحیه مغزی برای پتانسیل کامل و شبه پتانسیل یکسان باشد. برای این منظور باید تغییر فاز امواج ناشی از پتانسیل کامل و شبه پتانسیل یکسان باشد. از آنجا که تغییر

¹ Kleinman-Bylander

فاز در اثر وجود سد پتانسیل به مشتق لگاریتمی تابع موج وابسته است، لذا لازم است مشتق لگاریتمی تابع موج تمام الکترونی و شبه تابع موج در r_c برابر باشند که r_c شعاع ناحیه مغزی می باشد.

$$\frac{d}{dr} \ln \psi_l^{ps}(\mathbf{r})|_{r=r_c} = \frac{d}{dr} \ln \psi_l^{ae}(\mathbf{r})|_{r=r_c} \quad (۲۲-۳)$$

۳-۴- مقدمه بر تابع گرین غیر تعادلی (NEGF)

امروزه محاسبات ساختار الکترونی یک ابزار مهم برای بررسی فیزیکی و شیمیایی مواد و مولکول‌های جدید هستند [۳۳]. یک عامل مهم برای موفقیت این تکنیک‌ها گسترش روش‌های اصول اولیه است بدون این که پارامترهای وابسته‌ی سیستمی را معرفی نماید، واقعیت بخشیدن به مدل‌سازی یک دامنه‌ی وسیعی از سیستم‌ها را ممکن می‌سازد. بیشتر روش‌ها در دو جنبه محدود می‌شوند: (۱) هندسه بسته به این که سیستم تناوبی باشد یا محدود و غیرتناوبی. (۲) سیستم الکترونی باید در حالت تعادلی باشد.

از لحاظ نظری به منظور پرداختن به موقعیتی که سیستم در مقیاس اتمی / مولکولی در تماس با الکترودهای حجمی باشد، نیازمند روشی است که قادر باشد به صورت سیستم بی‌نهایت رفتار کند. در موردی که یک ولتاژ بایاس محدود به الکترودها اعمال شود، یک جریان از میان ناحیه‌ی بدست می‌آید، زیرا سیستم الکترونی در حالت تعادل گرمایی نیست و مدل باید توانایی این را داشته باشد که این موقعیت غیرتعادلی را تشریح کند. هدف کار حاضر گسترش اصول اولیه‌ی جدیدی در یک روش ساختار الکترونی غیرتعادلی برای شبیه‌سازی یک نانو ساختار جفت شده با الکترودهای خارجی در پتانسیل‌های شیمیایی متفاوت است (در اینجا جمله‌ی پتانسیل شیمیایی را با تراز فرمی معاوضه می‌کنیم). در این پژوهش، برای یافتن خواص ترابرد الکترونی حالت پایه در قطعات نانو از رهیافت تابع گرین غیر تعادلی (NEGF) استفاده شده است. این رهیافت حالت خارج از تعادل یک سیستم کوانتومی را توصیف می‌کند که شامل ناحیه‌ی پراکندگی می‌باشد که به مخازن الکترونی نیمه

¹ Non-equilibrium Green's Function

بینهایت، الکتروود متصل شده است. رهیافت تابع گرین غیرتعدالی محاسبه سه خاصیت اصلی سیستم‌های کوانتومی مکانیکی خارج از تعادل را امکان پذیر می‌کند:

(۱) محاسبه طیف حالت‌های مربوط به ناحیه پراکندگی برای هامیلتونی داده شده است.

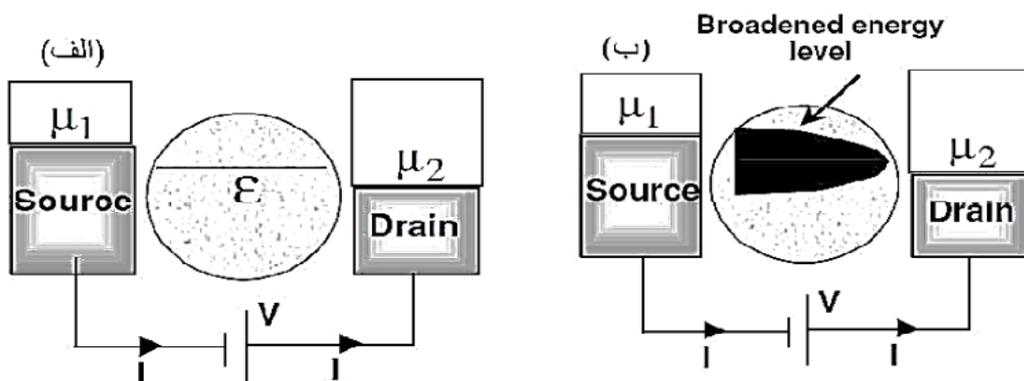
(۲) محاسبه اشغال این حالت‌ها در ناحیه پراکندگی وقتی که الکتروودها خارج از تعادل هستند.

(۳) محاسبه جریان عبوری به ازای پتانسیل‌های شیمیایی الکتروودها و چگالی بار ناحیه پراکندگی.

۳-۴-۱- مدل ساده برای ترابرد غیرتعدالی

بررسی ترابرد را با یک مدل ساده تک تراز که توسط داتا^۱ [۳۴] ارائه شده است، شروع می‌کنیم.

دو پراب جریان/ولتاژ با پتانسیل شیمیایی μ_1 و μ_2 در نظر بگیرید که از طریق یک اتم با یک تراز انرژی ϵ به هم اتصال دارند (شکل ۳-۱ الف). وقتی $\mu_1 = \mu_2$ ، الکتروودها و اتم هر سه در تعادل هستند.



شکل ۳-۱: الف) شکل طرحوار دو پراب جریان/ولتاژ که از طریق یک سیستم تک تراز انرژی ϵ به هم متصل شده اند $\mu_2 < \epsilon < \mu_1$. ب) تراز انرژی ϵ در اثر جفت شدگی با الکتروودها طبق اصل عدم قطعیت به اندازه γ پهن می‌شود [۳۴].

اما چنانچه $\mu_1 \neq \mu_2$ بسته به اینکه تراز انرژی اتم با کدام الکتروود در تعادل باشد، عدد اشغال با توابع

فرمی دیراک زیر داده می‌شود:

^۱ Datta

$$f_1(\varepsilon) = \frac{1}{1+e^{(\varepsilon-\mu_1)/k_B T}} \quad (23-3)$$

$$f_2(\varepsilon) = \frac{1}{1+e^{(\varepsilon-\mu_2)/k_B T}} \quad (24-3)$$

الکتروود اول، الکترون‌ها را به سمت تراز انرژی اتم پمپ می‌کند تا تراز اتمی با انرژی فرمی الکتروود اول برابر شود و عدد اشغال تراز با $f_1(\varepsilon)$ باشد. از طرف دیگر الکتروود دوم، الکترون‌ها را به سمت خود می‌کشد تا تراز با الکتروود دوم در تعادل باشد و عدد اشغال آن با تابع توزیع $f_2(\varepsilon)$ برابر شود. این حالت یک حالت غیرتعادلی می‌باشد که میانگین تعداد الکترون‌ها N در حالت پایا مقداری است بین f_1 و f_2 . تفاوت عدد اشغال در حالت تعادلی و غیرتعادلی منجر به ایجاد جریان می‌شود. شار خالص I_1 بین الکتروود سمت چپ و ناحیه پراکندگی با اختلاف اعداد اشغال در حالت تعادلی و غیرتعادلی برابر با:

$$I_1 = e \frac{\gamma_1}{\hbar} (f_1 - N) \quad (25-3)$$

به همین ترتیب شار I_2 بین اتصال سمت راست و اتم برابر است با:

$$I_2 = e \frac{\gamma_2}{\hbar} (f_2 - N) \quad (26-3)$$

که $\left(\frac{\gamma_2}{\hbar}\right)\frac{\gamma_1}{\hbar}$ آهنگ تراورد الکترون بین الکتروود سمت چپ (سمت راست) و تراز انرژی ε است. در حالت پایا، شاری به تراز انرژی ε وارد یا از آن خارج نمی‌شود در نتیجه از معادلات (25-3) و (26-3) داریم:

$$N = \frac{\gamma_1 f_1 + \gamma_2 f_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (27-3)$$

با قرار دادن رابطه (27-3) در معادلات (25-3) و (26-3) جریان حالت پایا بدست می‌آید:

$$I = -I_1 = I_2 = \frac{e}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} (f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)) \quad (28-3)$$

این جریان به ازای هر اسپین است. چنانچه دو حالت اسپینی با انرژی یکسان داشته باشیم، جریان در ضریب دو ضرب می‌شود. از رابطه بالا دیده می‌شود که به جز در دماهای خیلی بالا، تنها وقتی شارش جریان داریم که تراز انرژی ε با فاصله چند $k_B T$ بین μ_1 و μ_2 قرار گیرد یعنی $\mu_2 < \varepsilon < \mu_1$ ، در غیر این

صورت اگر $\mu_1 < \varepsilon$ و $\mu_2 < \varepsilon$ آنگاه $f_1 \sim f_2 \sim 0$ و چنانچه $\mu_2 > \varepsilon$ و $\mu_1 > \varepsilon$ آنگاه $f_1 \sim f_2 \sim 1$. بنابراین برای هدایت، حضور حالت‌هایی اطراف $E = \mu$ ضروری است و تفاوتی ندارد که این حالت‌ها در هنگام تعادل قبل از اعمال ولتاژ بایاس، حالت‌های خالی هستند (نوع n) یا پر (نوع p). اگر حالت‌های خالی باشند الکترون‌ها توسط الکتروود منفی تزریق و سپس توسط الکتروود دیگر جمع می‌شوند. اگر حالت‌ها در ابتدا پر باشند، الکترون‌ها توسط الکتروود مثبت جمع می‌شوند و سپس توسط الکتروود منفی تزریق می‌شوند. مدلی که تا کنون ارائه شد اطلاعاتی راجع به اشغال تراز انرژی (معادله (۳-۲۷)) و جریان حالت پایا (معادله (۳-۲۸)) به ما می‌دهد. این روابط به ما کمک می‌کند که از یک روش خودسازگار برای پیدا کردن جریان و عدد اشغال شده استفاده کنیم.

در این مدل ساده تقریباً همه جنبه‌های مدل عمومی تراپرد بر پایه تابع گرین غیرتعادلی لحاظ شده است. برای کامل شدن تشابه، باید گستردگی تراز انرژی نیز در نظر گرفته شود. چون تراز انرژی ε با الکتروودها جفت شده است و آهنگ فرار الکترون از این ترازها $\frac{\gamma_1}{\hbar}$ و $\frac{\gamma_2}{\hbar}$ است، لذا زمان حیات الکترون روی این تراز محدود و برابر با \hbar/γ است که $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$. بنابراین بر طبق اصل عدم قطعیت، تراز انرژی باید به اندازه γ گسترده باشد. به این ترتیب می‌توان چگالی حالت‌های انرژی (DOS) را به صورت تابع لورنتس حول $E = \varepsilon$ مطابق رابطه زیر تعریف کرد:

$$D(E) = \frac{\gamma/2\pi}{(E-\varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2} \quad (۲۹-۳)$$

به طوری که حاصل انتگرال گیری از $D(E)$ روی بازه انرژی باید برابر با یک الکترون باشد. بنابراین عدد اشغال را بر حسب DOS به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم:

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \rho(E) \quad (۳۰-۳)$$

که چگالی بار الکترون در حالت پایا برابر است با:

$$\rho(E) = D(E) \frac{\gamma_1 f_1(E) + \gamma_2 f_2(E)}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (31-3)$$

و جریان بر حسب DOS به شکل زیر در می آید:

$$I = \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE T(E) [f_1(E) - f_2(E)] \quad (32-3)$$

با

$$T(E) = D(E) \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (33-3)$$

که $T(E)$ برابر احتمال عبور است. معادله (32-3) همان معادله لاندور در نظریه پراکندگی است. برای مسائل چند پایانه ای مفید است که روابط (3-25) و (3-26) را بر حسب $D(E)$ و $\rho(E)$ بنویسیم. برای الکترون α ، I_α به شکل زیر نوشته می شود:

$$I_\alpha = \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE [\gamma_\alpha^{in} D(E) - \gamma_\alpha \rho(E)] \quad (34-3)$$

$$\gamma_\alpha^{in} = \gamma_\alpha f_\alpha \quad \text{که}$$

در این معادلات جریان و عدد اشغال بر حسب چگالی بار الکترون و احتمال ترابرد نوشته شدند. می توان روابط قبل را بر حسب تابع گرین تک ذره ای زیر نوشت:

$$G_M(E) = \frac{1}{E - \varepsilon + i\gamma/2} \quad (35-3)$$

این امر کمک می کند تا بتوان مفاهیم معرفی شده را به مسائل با ساختار الکترونی پیچیده و روش های خود سازگار بسط داد. چگالی حالت ها DOS و چگالی بار را به صورت تابعی از G بازنویسی می کنیم:

$$D(E) = \frac{1}{2\pi} G_M(E) \gamma(E) G_M^*(E) = i[G_M(E) - G_M^\dagger(E)] \quad (36-3)$$

$$n(E) = \frac{1}{2\pi} G(E) \gamma^{in}(E) G^\dagger(E) \quad (37-3)$$

$$\gamma^{in} = \gamma_1^{in} + \gamma_2^{in} \quad \text{که}$$

با جای گذاری روابط بالا در (۳-۳۳) جریان و ضریب ترابرد به صورت زیر در می آید:

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE T(E) [f_1(E) - f_2(E)] \quad (۳-۳۸)$$

$$T(E) = G(E) \gamma_1(E) G^*(E) \gamma_2(E) \quad (۳-۳۹)$$

تابع گرین غیرتعادلی (NEGF)^۱، شامل تعمیم روابط تک ترازوی بالا برای ساختارهای الکترونی پیچیده می باشد.

۳-۴-۲- روش نظری در کد TRANSIESTA

روش کار بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی است. همانطور که در بخش اول این فصل اشاره شد در این روش، اگر تابعی همبستگی-تبادلی دقیق در دسترس باشد چگالی الکترونی واقعی و انرژی کل بدست می آید، ولی این امر امکان پذیر نیست و تابعی همبستگی-تبادلی باید بوسیله‌ی یک تابعی تقریبی جایگزین شود. که در این پژوهش از تقریب شیب تعمیم یافته استفاده شده است.

برای محاسبه ترابرد تنها از چگالی الکترونی کل استفاده نمی شود، بلکه توابع موج کوهن-شم نیز به صورت موج تک ذره‌ای واجد شرایط، هنگامی که جریان الکترونی محاسبه می شود، استفاده خواهد شد. بنابراین فرض می کنیم که توابع همبستگی-تبادلی متداوالی که استفاده می شوند، قادرند تا موقعیت‌هایی را که الکترون‌ها در حالت غیرتعادلی هستند توصیف کنند و شار جریان را محاسبه نماید. این رهیافت تک الکترونی قادر نیست که اثرات بس ذره‌ای عمیق را که ممکن است در برخی موارد در خلال فرآیندهای ترابرد ظاهر شوند را، توصیف کند. به عنوان مثال، پراکندگی‌های غیرالاستیک به وسیله فونون‌ها در نظر گرفته نمی شود. همانگونه که در مراجع ۳۵ و ۳۶ توضیح داده شده است، بسته‌ی محاسباتی SIESTA به وسیله‌ی محاسبه‌ی ماتریس چگالی^۲ و با استفاده از روش توابع گرین غیر تعادلی، به سیستم‌های غیرتعادلی بسط داده شده است. این کد ساختار الکترونی

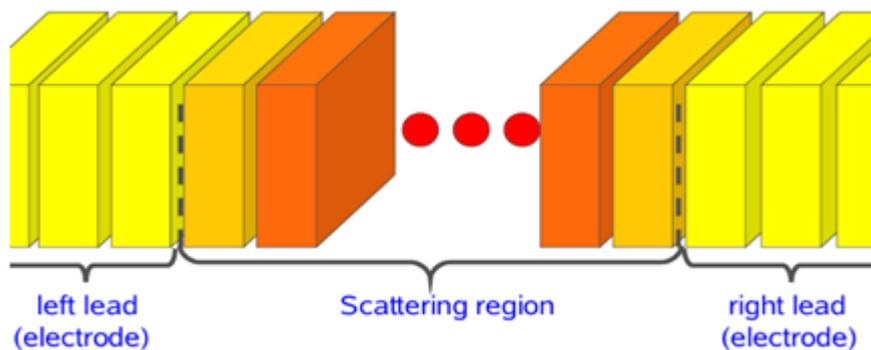
¹ Non-equilibrium Green's Function

² Density matrix

غیرتعادلی، به نام TRANSIESTA نامگذاری شد [۳۷]. در ادامه فصل توضیح خواهیم داد که چگونه سیستم به دو قسمت "الکتروود" و "ناحیه تماس" تقسیم شده است و چگونه با استفاده توابع گرین، ماتریس چگالی حالت غیرتعادلی به دست آمده است.

۳-۴-۳- برپایی سیستم

موقعیت طراحی شده در شکل (۲-۳) را در نظر می‌گیریم. دو الکتروود نیمه نامتناهی چپ و راست با ناحیه‌ی تماس^۱، جفت می‌شوند. تمام عناصر ماتریس هامیلتونی یا انتگرال‌های همپوشانی^۲ بین اوربیتال‌های اتم‌ها در دو الکتروود چپ و راست صفر هستند به طوری‌که جفت‌شدگی بین الکتروودها تنها از طریق ناحیه‌ی تماس رخ می‌دهد. بنابراین ناحیه‌ی مورد نظر شامل سه قسمت: الکتروود چپ (L)، ناحیه تماس (C) و الکتروود راست (R) می‌باشد. فرض می‌شود اتم‌ها در L(R) بخشی از الکتروودهای حجمی نیمه نامتناهی چپ(راست) باشند که با اتم‌های ناحیه‌ی تماس برهمکنش دارند و همچنین فرض می‌شود که هامیلتونی و ماتریس چگالی به مقادیر حجمی در ناحیه‌ی R و L همگرا شود. بنابراین هامیلتونی، ماتریس چگالی و ماتریس همپوشانی تنها در بخش‌های C، C-L و C-R با مقادیر حجمی متفاوت است.



شکل ۲-۳: مدلی برای ترابرد الکترونی برای یک مولکول یا یک نانو سیم کوتاه [۳۸].

¹ Contact region

² Overlap integrals

به منظور بدست آوردن خواص تراپردی فقط نیاز داریم قسمت متناهی L-C-R از سیستمی نامتناهی، که در شکل (۲-۳) نشان داده شده است را توصیف کنیم. ماتریس چگالی که توزیع الکترون‌ها را تشریح می‌کند، می‌تواند از یک سری ماتریس‌های تابع گرین سیستم‌های نامتناهی بدست آید. بنابراین تنها به قسمت متناهی L-C-R از ماتریس چگالی و ماتریس تابع گرین علاقه‌مند هستیم. که مقدار هامیلتونی کل برابر است با:

$$H = \begin{pmatrix} H_{LL} & H_{LC} & 0 \\ H_{LC}^\dagger & H_{CC} & H_{CR} \\ 0 & H_{CR}^\dagger & H_{RR} \end{pmatrix} \quad (۴۰-۳)$$

که H_{LL} ، H_{RR} و H_C به ترتیب ماتریس‌های هامیلتونی در ناحیه‌های L، R و C هستند و H_{LC} (H_{CR}) بر همکنش بین ناحیه‌های L (R) و C است. جفت شدگی L و R برای قسمت باقیمانده‌ی الکترودهای نیمه نامتناهی، تماما به وسیله‌ی خود انرژی‌های \sum_L و \sum_R برشمرده می‌شود. توصیف توابع گرین در فیزیک حالت جامد در مراجع [۳۹-۴۱] یافت می‌شود. در اینجا ما خواص عمومی توابع گرین مربوط به رهیافت NEGF را ارائه می‌دهیم. فرض می‌کنیم سیستم به وسیله هامیلتونی تک ذره‌ای H توصیف می‌شود.

$$H\psi_i = E\psi_i \quad (۴۱-۳)$$

که ψ_i بردار N بعدی تابع موج تک ذره‌ای با ویژه مقدار E است و S ماتریس همپوشانی می‌باشد. چون H و S هرمیتی هستند، E حقیقی می‌باشد. که با توابع گرین به صورت زیر رابطه دارد:

$$(ES - H)G = I \quad (۴۲-۳)$$

که I بردار یکه هست معادله تابع گرین به واسطه هامیلتونی کل به صورت زیر بدست می‌آوریم:

$$\begin{pmatrix} ES_{LL} - H_{LL} & ES_{LC} - H_{LC} & 0 \\ (ES_{LL} - H_{LL})^\dagger & ES_{CC} - H_{CC} & ES_{CR} - H_{CR} \\ 0 & (ES_{CR} - H_{CR})^\dagger & ES_{RR} - H_{RR} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{LL} & G_{LC} & G_{LR} \\ G_{CL} & G_{CC} & G_{CR} \\ G_{RL} & G_{RC} & G_{RR} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{LL} & 0 & 0 \\ 0 & I_{CC} & 0 \\ 0 & 0 & I_{RR} \end{pmatrix} \quad (۴۳-۳)$$

با حل معادله (۴۱-۳) به نتایج زیر می‌رسیم:

$$[(ES_{CC} - H_{CC}) - (ES_{LC} - H_{LC})^\dagger (ES_{LL} - H_{LL})^{-1} (ES_{LC} - H_{LC})] \quad (44-3)$$

$$- (ES_{CR} - H_{CR})^\dagger (ES_{RR} - H_{RR})^{-1} (ES_{CR} - H_{CR})] G_{CC} = I_{CC}$$

$$(ES_{LL} - H_{LL})^{-1} = G_{LL} \quad (45-3)$$

$$(ES_{RR} - H_{RR})^{-1} = G_{RR} \quad (46-3)$$

با قرار دادن معادلات (45-3) و (46-3) در معادله (44-3) خواهیم داشت:

$$[(ES_{CC} - H_{CC}) - (ES_{LC} - H_{LC})^\dagger G_{LL} (ES_{LC} - H_{LC})] \quad (47-3)$$

$$- (ES_{CR} - H_{CR})^\dagger G_{RR} (ES_{CR} - H_{CR})] G_{CC} = I_{CC}$$

که از معادله (47-3) خود انرژی‌های چپ و راست به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\Sigma_L = (ES_{LC} - H_{LC})^\dagger G_{LL} (ES_{LC} - H_{LC}) \quad (48-3)$$

$$\Sigma_R = (ES_{CR} - H_{CR})^\dagger G_{RR} (ES_{CR} - H_{CR}) \quad (49-3)$$

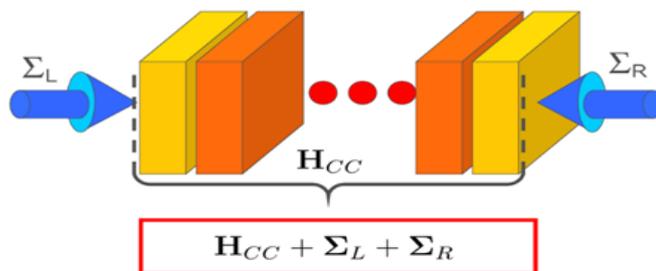
خود انرژی‌های چپ و راست ماتریس‌های غیرهرمیتی هستند، و در شکل (3-3) نشان داده است. با

استفاده از معادلات (48-3) و (49-3) در معادله (47-3) خواهیم داشت:

$$[(ES_{CC} - H_{CC}) - \Sigma_L - \Sigma_R] G_{CC} = I_{CC} \quad (50-3)$$

که تابع گرین در ناحیه پراکندگی به صورت زیر نشان داده می‌شود:

$$G_{CC} = \{ES_{CC} - [H_{CC} + \Sigma_L + \Sigma_R]\}^{-1} \quad (51-3)$$



شکل 3-3: طرح واره‌ای از خود انرژی‌های به جای الکترودهای نامتناهی در ترابرد الکترونی در یک

مولکول [38].

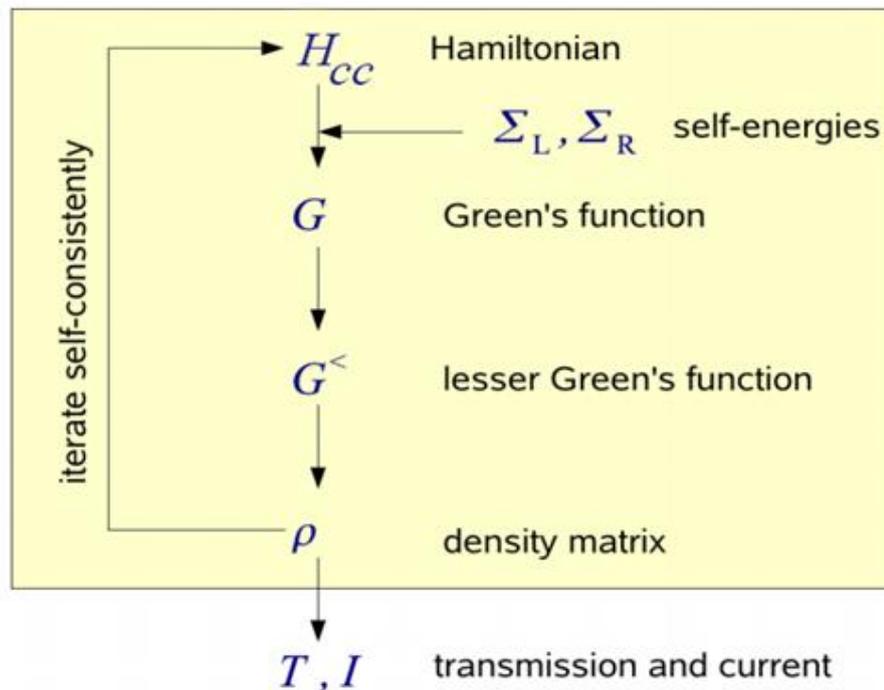
۳-۴-۴ - محاسبه جریان

هرگاه یک سیم مولکولی بین دو الکتروود فلزی نامتناهی قرار گیرد، اعمال یک ولتاژ خارجی به الکتروودها باعث می‌شود، پتانسیل الکتروشیمیایی دو الکتروود چپ(راست) نسبت به هم متفاوت می‌شوند و سیستم دیگر در حالت تعادل نباشد و منجر به جریان غیرصفر، می‌شود. برای بدست آوردن مقدار جریان ناحیه‌ی پراکندگی از روش خودسازگار استفاده می‌کنیم که شکل شماتیک این روش را در شکل(۳-۴) نشان داده شده است. تحت ولتاژ غیرصفر، ماتریس چگالی غیرتعادلی به صورت زیر است:

$$\rho = \frac{1}{2\pi i} \int dE [G_{CC} \Gamma_L G_{CC}^\dagger f(E - \mu_L) + G_{CC} \Gamma_R G_{CC}^\dagger f(E - \mu_R)] \quad (52-3)$$

که $\Gamma_{L(R)}$ نمایشگر اتصال بین الکتروودها و ناحیه‌ی پراکندگی است و معرفی کننده میزان پهن‌شدگی تراز مولکولی است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\Gamma_{L(R)} = i(\Sigma_{L(R)} - \Sigma_{L(R)}^\dagger) \quad (53-3)$$



شکل ۳-۴: طرح شماتیک روش خودسازگار برای مدل NEGF+DFT [۳۸].

علاوه بر این تابع گرین کوچکتر برابر است با:

$$G^< = iG_{CC}[f(E - \mu_L)\Sigma_L + f(E - \mu_R)\Sigma_R]G_{CC}^\dagger \quad (54-3)$$

که F تابع توزیع فرمی-دیراک می باشد و با استفاده از معادله (54-3) در معادله (52-3)، داریم:

$$\rho = \frac{1}{2\pi i} \int dE iG^< \quad (55-3)$$

از مقایسه ماتریس چگالی با مدل DFT، یک چگالی حالت پایه تولید می شود که منجر به محاسبه هامیلتونی H_{CC} می شود. سپس جریان را می توان از طریق رابطه زیر بدست می آید:

$$I = \frac{e}{h} \int dE T(E)[f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] \approx \frac{e}{h} \int_{\mu_R}^{\mu_L} dE T(E) \quad (56-3)$$

در این معادله $T(E)$ نشان دهنده، احتمال عبور الکترون تزریق شده با انرژی E می باشد. تابع ترابردی می توانند از تابع گرین ناحیه ی پراکندگی محاسبه می شود. تحت ولتاژ غیر صفر، چگالی و جریان برابر است با:

$$\rho^\sigma = \frac{1}{2\pi} \int dE [G_{CC} \Sigma_L f(E, \mu_L) G_{CC}^\dagger + G_{CC} \Sigma_R f(E, \mu_R) G_{CC}^\dagger]_{ij}^\sigma \quad (57-3)$$

$$I^\sigma = \frac{e}{h} \int dE [Tr(\Sigma_L G_{CC} \Sigma_R G_{CC}^\dagger)(f(E, \mu_L) - f(E, \mu_R))]^\sigma \quad (58-3)$$

که در معادله بالا $\mu_L = E_f + \frac{eV}{2}$ و $\mu_R = E_f - \frac{eV}{2}$ است، E_f انرژی فرمی الکترون و V ، ولتاژ اعمالی می باشد.

فصل چهارم

بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی

نانوروبان های گرافنی

در چند سال اخیر تحقیق بر روی مواد گرافنی دو بعدی سریع ترین رشد را در زمینه فیزیک نیمرساناها داشته است. این به خاطر ترکیب عجیب این ماده و خواص الکترونیکی قابل توجه آن می باشد [۴۲]. نتایج حاصل از این تحقیقات یافته های قابل توجهی از قبیل ابررسانایی تحریک شده در گرافن، اثر هال کوانتومی غیرعادی [۴۳] و تحرک الکترونی خیلی بالا [۴۴] را در بر دارند. همچنین استفاده از نانوروبان های گرافنی برای اجزای دستگاه های الکترونیکی در شرایط محیطی ممکن است آنها را بادوام تر کند [۴۵]. گرافن یک ساختار دو بعدی شش گوشه از کربن است که به دلیل مکانیزم اسپینی آن و بسیاری مزیت های دیگری که دارد توجهات زیادی را به خود جلب کرده است [۹]. الکترون های گرافن شبیه به فرمیون های دیراک بدون جرم رفتار می کنند [۴۲]. تحرک بالای الکترون و طول همدوسی طولانی، گرافن را به ماده ای تبدیل کرده است که توجهات زیادی را در حوزه کاربردهای الکترونیک در مقیاس نانو به خود جلب کرده است [۴۶]. نانوروبان های گرافنی بنا بر خواص قابل توجه و مختلفی که نشان می دهند و ساختار اولیه بالقوه ای که می توانند داشته باشند برای آینده نانو الکترونیک مبتنی بر کربن پیش بینی شده اند [۴۵]. نانوروبان های گرافنی روبان هایی در اندازه نانومتری از تک لایه گرافن هستند و در زمینه های نظری و عملی بسیار مورد توجه واقع شده اند [۴۶]. عامل اصلی در مشخص کردن خواص تراپردی و اپتیکی نانوروبان های گرافنی، ساختار نوار الکترونی آنها می باشد [۴۵]. خواص الکترونیکی نانوروبان ها می توانند بوسیله پهنا و هندسه اتم ها در امتداد لبه ها مشخص شوند که لبه ها می توانند به شکل زیگزاگ یا آرمچیر باشند [۴۶]. محققان برای بدست آوردن گاف نواری مناسب در گرافن از نقوص و ناخالصی استفاده می کنند. ناخالصی ها در گرافن می توانند بصورت جذب و یا جایگزینی عناصر با یکدیگر باشند. قطبش بالای اسپینی در گرافن می تواند بوسیله جایگزینی بعضی عناصر و یا گروه های تابعی در آن حاصل شود که این موضوع در حوزه اسپینترونیک دارای اهمیت می باشد. داشتن مقدار کمی ناخالصی های فلزی در گرافن برای استفاده در اسپینترونیک، سنسورها و کاربردهای نانو الکترونیکی مورد بررسی قرار گرفته

است. اتم های عناصر واسطه از نظر داشتن خواص مغناطیسی ویژه بسیار شناخته شده هستند، بنابراین ناخالصی فلزات واسطه می تواند به عنوان منبعی برای خاصیت مغناطیسی در گرافن در نظر گرفته شود. ناخالصی های فلزات واسطه می تواند خواص نانوروبان گرافنی را برای کاربرد های اسپینترونیکی تنظیم کند. این الهام بخش ما برای بررسی خواص الکترونی مربوط به نانوروبان های گرافنی آرایش یافته با اتم های عناصر واسطه در مکان های مختلف شده است. نانوروبان های گرافنی با توجه به هندسه و شکل لبه های نانوروبان به دو دسته نانوروبان گرافنی زیگزاگ¹ و نانوروبان گرافنی آرمچیر² تقسیم می شوند، که اتم های کربن در لبه نانوروبان می توانند با اتم هیدروژن، اکسیژن، فلئور و یا اتم ها و گروه های عاملی دیگر محدود شوند³ و یا به صورت محدود نشده باشند. در این پایان نامه خواص الکترونی، مغناطیسی و تراپردی را در نانوروبان های گرافنی زیگزاگ که با اتم هیدروژن محدود شده اند (ZGNR-H) و نانوروبان های گرافنی آرمچیر محدود شده با اتم هیدروژن (AGNR-H)، همچنین خواص الکترونی و مغناطیسی نانوروبان گرافنی آرمچیر محدود نشده (AGNR) را بررسی می کنیم.

۲-۴- بهینه سازی پارامترها

در ابتدا و قبل از انجام محاسبات و توضیح درباره آن به منظور افزایش دقت، کاهش زمان انجام محاسبات و افزایش سرعت همگرایی بعضی از پارامترها شامل: انرژی قطع و بردار شبکه بندی (که تعداد نقاط در فضای وارون را مشخص می کند) را می بایست بهینه کرد.

۲-۴-۱- انرژی قطع

برای محاسبه بسیاری از کمیت های فیزیکی نظیر چگالی بار، پتانسیل و انرژی در ساختارهای متناوب و دوره ای و همچنین تبدیل فوریه کمیت های فیزیکی از فضای وارون به فضای حقیقی و

¹ - Zigzag graphene nanoribbon

² - Armchair graphene nanoribbon

³ - Passivated

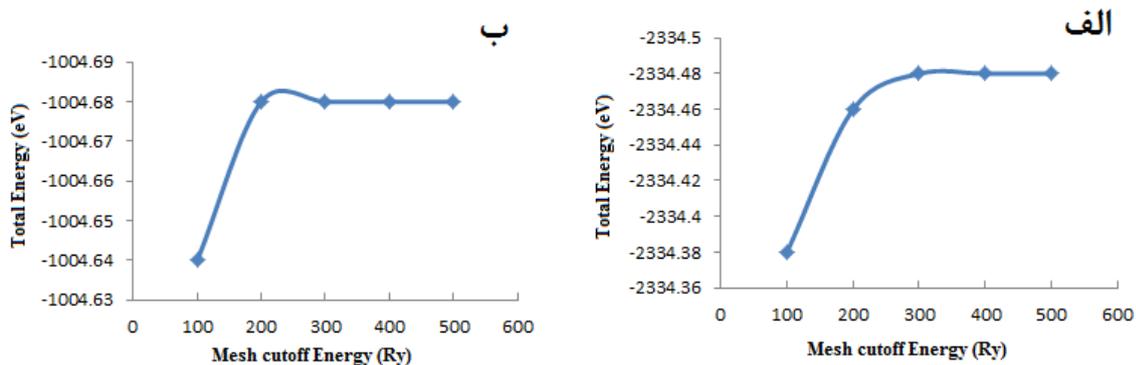
بالعکس نیاز است انتگرال هایی را در این فضاها محاسبه نماییم. برای محاسبه این انتگرال ها در فضاها مورد نظر این فضاها را شبکه بندی می کنیم. اگر فاصله بین این نقاط را در فضای حقیقی با Δx نمایش دهیم رابطه آن با انرژی قطع به صورت زیر خواهد بود:

$$K_c = \frac{\pi}{\Delta x} \Rightarrow E_{cut} = \frac{\hbar^2 K_c^2}{2m_e} \Rightarrow \text{if } m, \hbar = 1 \Rightarrow \Delta x = \frac{\pi}{\sqrt{2 E_{cut}}}$$

که در آن K_c بردار موج تخت قطع و E_{cut} انرژی قطع می باشد. هرچه میزان انرژی قطع بیشتر شود، در شبکه حقیقی فاصله نقاط کمتر و تعداد آنها بیشتر می شود لذا تعداد بیشتری از آنها در انتگرال گیری مشارکت می کنند که این باعث افزایش دقت انتگرال گیری در فضای حقیقی می شود. کد SIESTA براساس این انرژی قطع تعریف شده است. با توجه به مطالب بیان شده در بالا یکی از پارامترهای مهم در ورودی که انتخاب درست آن باعث افزایش سرعت همگرایی و کاهش زمان محاسبات می شود، انرژی قطع می باشد. به دلیل زیاد بودن تعداد ساختارهای مورد بررسی، تعیین مقدار بهینه شده این پارامتر به ازای هر ساختار امکان پذیر نبود، لذا مقدار انرژی قطع را برای سلول واحد اولیه در ساختارهای زیگزاگ و آرمچیر محدود شده با اتم هیدروژن بدست آوردیم و مقادیر بدست آمده را برای تمامی محاسبات بعدی استفاده کردیم، که این مقادیر در جدول و شکل ۴-۱ آمده است:

جدول ۴-۱: مقادیر بدست آمده برای انرژی کل برحسب انرژی قطع برای ZGNR-H و AGNR-H

انرژی قطع (Ry)	۱۰۰	۲۰۰	۳۰۰	۴۰۰	۵۰۰
انرژی کل (eV) برای AGNR-H	-۲۳۳۴/۳۸	-۲۳۳۴/۴۶	-۲۳۳۴/۴۸	-۲۳۳۴/۴۸	-۲۳۳۴/۴۸
انرژی کل (eV) برای ZGNR-H	-۱۰۰۴/۶۴	-۱۰۰۴/۶۸	-۱۰۰۴/۶۸	-۱۰۰۴/۶۸	-۱۰۰۴/۶۸



شکل ۴-۱: نمودار انرژی قطع برای الف) AGNR-H و ب) ZGNR-H

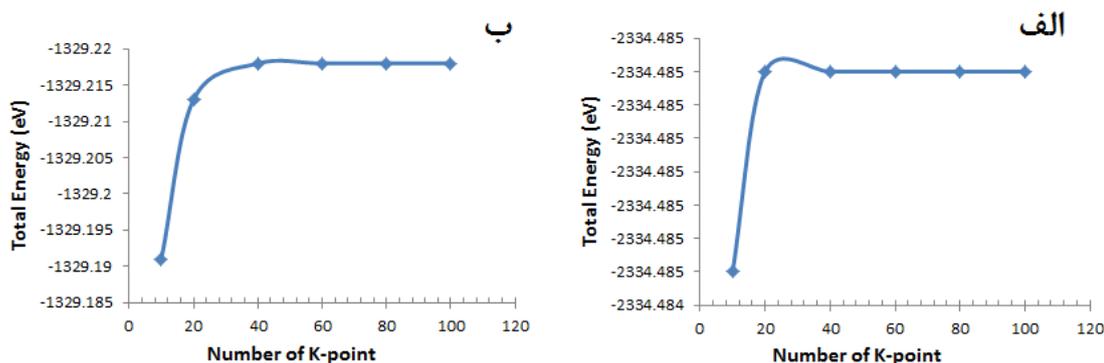
با توجه به جدول و شکل ۴-۱ تغییرات انرژی کل برحسب انرژی قطع برای نانوروبان AGNR-H از ۳۰۰ Ry به بعد روند یکنواختی دارد بنابراین این عدد را به عنوان مقدار بهینه انتخاب کردیم و برای نانوروبان ZGNR-H تغییرات از ۲۰۰ Ry به بعد روند یکنواختی دارد اما برای دقت بیشتر مقدار ۳۰۰ Ry را به عنوان مقدار بهینه انتخاب کردیم.

۴-۲-۲- بردار شبکه بندی و تعداد نقاط K در فضای وارون

پارامتر دیگری که پس از انرژی قطع لازم است بهینه شود تا سرعت همگرایی و همچنین دقت نتایج افزایش یابد تعداد نقاط و بردار مش بندی در فضای وارون k می باشد. در کد محاسباتی SIESTA این مش بندی توسط روش منخارست پک و در راستای آزادی و دوره ای ساختار انجام می شود. از آنجا که ساختارهای مورد بررسی نانوروبان های گرافنی می باشند که ساختارهایی تک بعدی هستند شرایط مرزی دوره ای به گونه ای انتخاب شد که در دو راستای x و y به اندازه 10 \AA خلا وجود داشته باشد تا از برهمکنش در این راستاها جلوگیری شود. در راستای z برای ساختار رفتاری دوره ای در نظر گرفته شد و مش بندی به صورت $1 \times 1 \times N$ انتخاب گردید. برای تعیین تعداد نقاط، در فایل ورودی مقدار بهینه شده برای انرژی قطع را وارد می کنیم سپس مقدار N را همانطور که در جدول ۴-۲ آمده است تغییر می دهیم و انرژی کل را برای هر مقدار N بدست می آوریم. با توجه به

جدول ۴-۲: انرژی کل برحسب تعداد نقاط K، برای نانوروبان AGNR-H و ZGNR-H

تعداد نقاط K	۱۰	۲۰	۴۰	۶۰	۸۰	۱۰۰
انرژی کل (eV) برای AGNR-H	-۲۳۳۴.۴۸۴۵	-۲۳۳۴.۴۸۴۸	-۲۳۳۴.۴۸۴۸	-۲۳۳۴.۴۸۴۸	-۲۳۳۴.۴۸۴۸	-۲۳۳۴.۴۸۴۸
انرژی کل (eV) برای ZGNR-H	-۱۳۲۹.۱۹۱	-۱۳۲۹.۲۱۳	-۱۳۲۹.۲۱۸	-۱۳۲۹.۲۱۸	-۱۳۲۹.۲۱۸	-۱۳۲۹.۲۱۸



شکل ۴-۲: نمودار k-point برای الف) AGNR-H و ب) ZGNR-H

نتایج بدست آمده و همچنین جدول و شکل ۴-۲ می بینیم برای نانوروبان ZGNR-H پس از مقدار ۴۰ مقادیر انرژی کل به ازای تعداد نقاط K یکسان است اما برای دقت بیشتر مقدار ۸۰ را به عنوان مقدار بهینه انتخاب کردیم و برای نانوروبان AGNR-H پس از مقدار ۲۰، مقادیر انرژی کل به ازای تعداد نقاط K یکسان است، اما برای دقت بیشتر مقدار ۴۰ را به عنوان مقدار بهینه انتخاب کردیم.

۴-۲-۳- مجموعه پایه ها

یکی دیگر از کمیت هایی که باعث افزایش دقت محاسبات می شود انتخاب یک پایه مناسب به ازای اوربیتال های اتم های تشکیل دهنده ساختار مورد بررسی می باشد. همانطور که در فصل سوم نیز اشاره شد کد محاسباتی SIESTA توابع موج تک ذره ای کوهن-شم را برحسب ترکیب خطی از پایه های اوربیتال های اتمی بسط می دهد. اوربیتال های اتمی را می توان به صورت حاصلضرب تابع

شعاعی در هماهنگی های کروی در نظر گرفت. دقت محاسبات وابسته به شکل و اندازه این پایه ها می باشد. در این پایان نامه جهت بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی از مجموعه پایه DZP و برای بررسی خواص تراپردی از مجموعه پایه SZP استفاده شده است.

جدول ۳-۴: پارامترهای ورودی محاسبات برای نانوروبان های گرافنی (زیگزاگ و آرمچیر)

تقریب کد	شبه پتانسیل	روش دینامیک مولکولی (MD)	شیب همیوگ (CG)
تابعی همبستگی-تبادلی	GGA(PBE)	همگرایی نیرو	$\leq 0.04 \frac{eV}{\text{\AA}}$
انرژی قطع	۳۰۰ Ry	مجموعه پایه ها	دوگانه قطبیده (DZP)
همگرایی چگالی بار	10^{-5}	بردار شبکه بندی فضای k (زیگزاگ)	$1 \times 1 \times 80$
آرایش لایه ظرفیت کربن	$2s^2 2p^2$	بردار شبکه بندی فضای k (آرمچیر)	$1 \times 1 \times 40$

۳-۴- بهینه سازی ساختار

پس از بهینه سازی پارامترهای مورد نیاز برای انجام محاسبات و پیش از بررسی خواص الکترونی لازم است ساختار و موقعیت اتم ها بهینه شوند. این کار توسط رهیافت دینامیک مولکولی (MD) انجام می گیرد. این رهیافت به مطالعه دینامیک یونی و نیروهای بین اتمی می پردازد. روش های دینامیک مولکولی متفاوتی وجود دارد، در انجام محاسبات از روش شیب همیوگ (CG) استفاده شده است که توسط آن موقعیت اتم ها دائما تغییر می کند و در وضعیت های متفاوت نیروی بین آنها توسط روش هلمن-فاینمن تا زمانیکه انرژی کل ساختار و سیستم به ازای موقعیت اتم ها و یون ها کمینه شود ادامه می یابد. دقت نیروی بین اتمی و بیشینه تغییرات آن به عنوان پارامتر ورودی تعریف می شوند. در جدول ۳-۴ مهم ترین پارامترهای ورودی برای انجام محاسبات آورده شده اند.

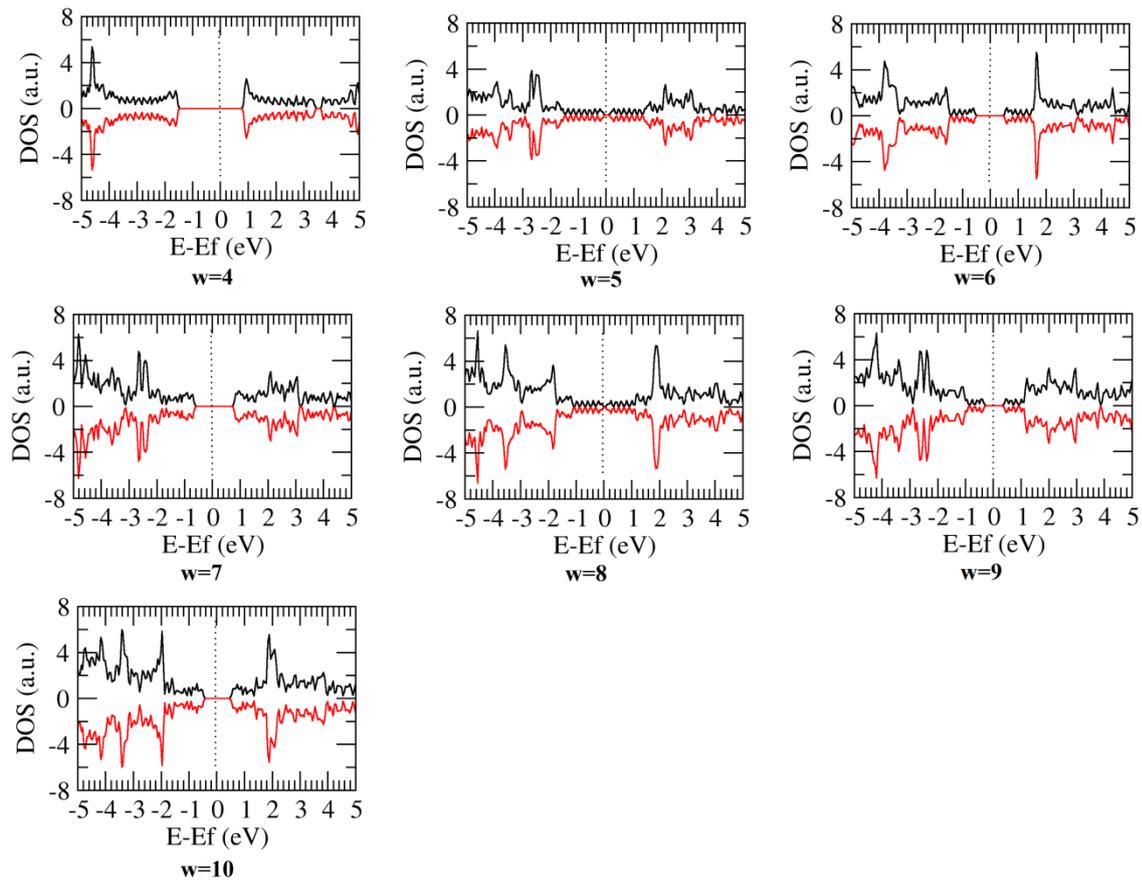
۴-۴- بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوروبان های گرافنی خالص (زیگزاگ و آرمچیر)

برای بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوروبان گرافنی ابتدا ساختار را بهینه می کنیم سپس با بدست آوردن پارامترهای بهینه شده ساختار شامل موقعیت اتمها و ثابت های شبکه به بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی ساختار می پردازیم. در قسمت خواص الکترونی به بررسی ساختار نواری و چگالی حالت های کلی (DOS) می پردازیم و در قسمت خواص مغناطیسی، چگالی حالت های قطبیده و گشتاور مغناطیسی ساختار را بررسی می کنیم.

۴-۴-۱- چگالی حالت ها (DOS)

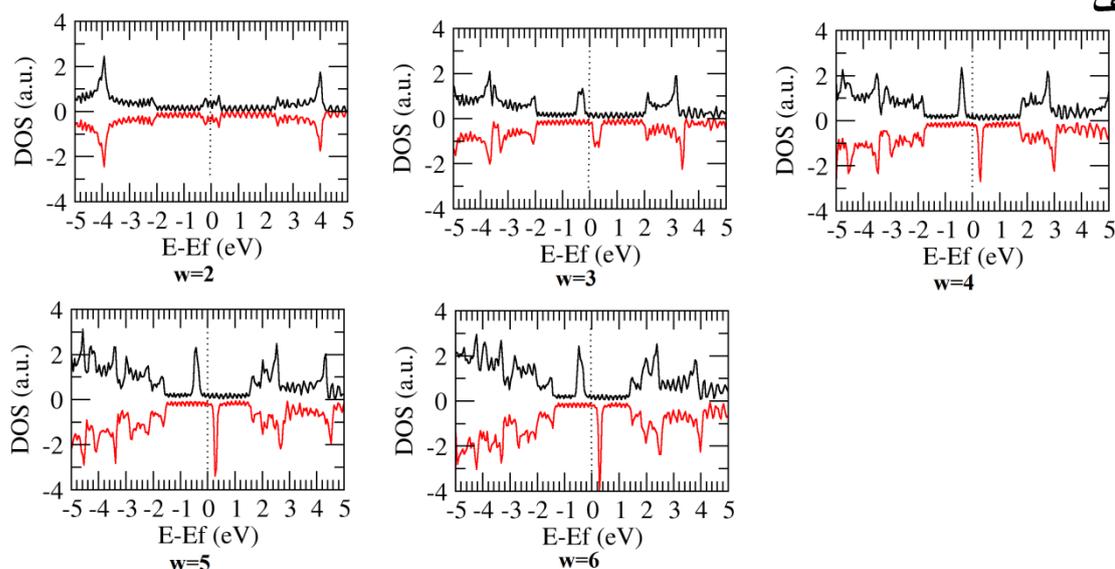
با بررسی چگالی حالت ها می توان از مقدار گاف نواری و روند تغییرات آن اطلاع حاصل کرد. برای محاسبه ساختار نواری و چگالی حالت ها ابتدا محاسبات خودسازگار انجام می شود تا انرژی فرمی بدست آید. نکته مهم پس از انجام محاسبات خودسازگار، انتخاب مسیر مناسب انتگرال گیری در فضای وارون در ناحیه کاهش ناپذیر بریلوئن به منظور محاسبه نوارهای انرژی می باشد، این مسیر بیشترین تقارن را دارا می باشد. از آنجا که سیستم مورد بررسی ساختاری یک بعدی در راستای محوری C می باشد مسیر انتگرال گیری در فضای وارون برای محاسبه ساختار نواری از $\Gamma(0,0,0)$ به $Z(0,0,\frac{1}{2})$ صورت گرفته است که مختصات نقاط برحسب بردارهای شبکه وارون معین می شوند. چگالی حالت ها برای نانوروبان های AGNR-H با پهناهای مختلف در شکل ۴-۳ و برای نانوروبان های ZGNR-H با پهناهای مختلف در شکل ۴-۴ نشان داده شده اند. گستره انرژی برای رسم چگالی حالت ها از -5 eV تا $+5\text{ eV}$ در نظر گرفته شده است. در تمام نمودارهای چگالی حالت رسم شده، سطح انرژی صفر بیانگر موقعیت تراز فرمی می باشد که با خط چین عمودی نشان داده شده است، چگالی حالت های مثبت مربوط به اسپین بالا و چگالی حالت های منفی مربوط به اسپین پایین می باشد، همچنین چگالی حالت های غیر صفر زیر تراز فرمی مربوط به نوار ظرفیت و چگالی حالت های بالای تراز فرمی مربوط به نوار رسانش می باشند. در نیمرساناهای ذاتی چگالی الکترون ها و حفره ها

باهم برابر است و تراز فرمی در وسط گاف نواری بین نوار ظرفیت و نوار رسانش قرار دارد. در نیمرسانای نوع n چگالی الکترون ها بیش از چگالی حفره هاست و تراز فرمی به نوار رسانش نزدیکتر است. در نیمرسانای نوع p چگالی حفره ها بیشتر از چگالی الکترون هاست و تراز فرمی به نوار ظرفیت نزدیکتر است.

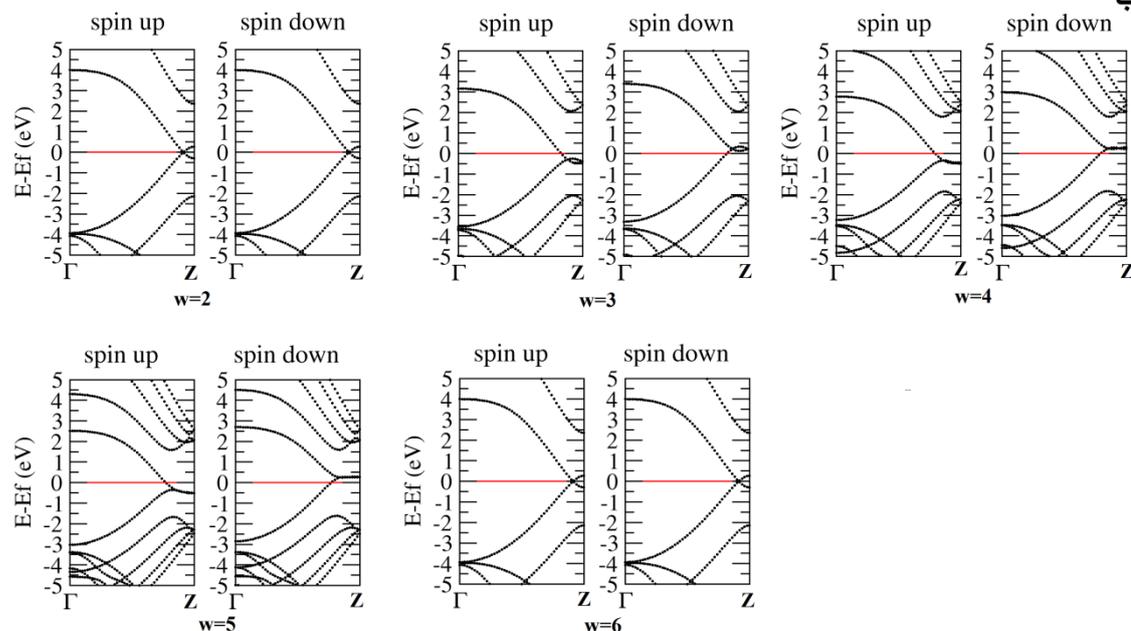


شکل ۳-۴: چگالی حالت ها برای نانورویان های AGNR-H با پهناهای مختلف

الف



ب

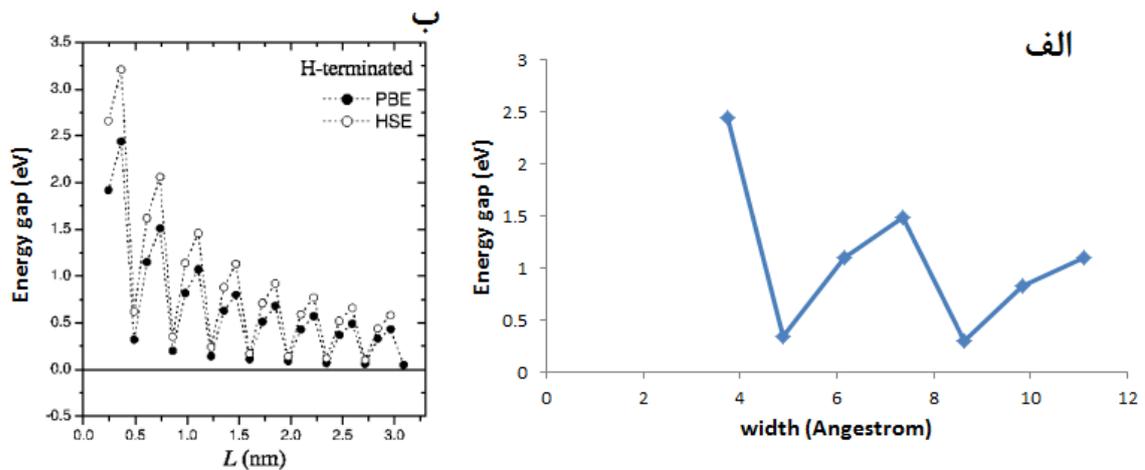


شکل ۴-۴: الف) چگالی حالت ها برای نانوروبان های ZGNR-H با پهناهای مختلف. ب) ساختار نواری برای نانوروبان های ZGNR-H با پهناهای مختلف

طبق نمودارهای شکل ۳-۴ نانوروبان های AGNR-H همگی نیمرسانای غیر مغناطیسی می باشند و گاف نواری در آنها با افزایش پهنا کاهش می یابد. همانطور که در نمودارهای شکل ۳-۴ می بینیم و نتایج دیگر تحقیقات انجام شده در این زمینه نیز این مطلب را تایید می کنند [۴۷ و ۴۸].

گاف نواری در ساختارهای AGNR-H برحسب پهنای آنها به سه گروه تقسیم می شوند که به صورت $w = 3p; 3p+1; 3p+2$ مشخص می شوند که در آنها p یک عدد صحیح است و ترتیب کاهش گاف نواری به صورت $3p+2 > 3p > 3p+1$ می باشد، همچنین با افزایش p گاف نواری کاهش می یابد. در مرجع شماره ۴۷ در شکل 2-b روند تغییرات گاف نواری در ساختارهای آرمچیر با پهنای مختلف آورده شده است که با نتایج بدست آمده در توافق است. همچنین بر طبق این نمودارها در شکل ۴-۳، چگالی حالت برای اسپین بالا با چگالی حالت برای اسپین پایین کاملاً بر هم منطبق است، بنابراین هیچکدام از این نانوروبان های گرافنی آرمچیر مورد بررسی خاصیت مغناطیسی ندارند و گشتاور مغناطیسی همه آنها صفر است. اطلاعات مربوط به مقدار گاف نواری بدست آمده، نوع آن، موقعیت تراز فرمی، اختلاف سطح انرژی کمینه نوار رسانش نسبت به تراز فرمی ($E_C - E_F$) و بیشینه نوار ظرفیت نسبت به تراز فرمی ($E_F - E_V$) برای نانوروبان های گرافنی آرمچیر در جدول ۴-۴ آورده شده است. طبق محاسبات انجام شده و اطلاعات بدست آمده جز برای نانوروبان های گرافنی آرمچیر با پهنای ۷ و ۹ بقیه نانوروبان ها نیمرسانای نوع n می باشند یعنی چگالی الکترون ها در آنها بیشتر از چگالی حفره ها می باشد، نانوروبان 7-AGNR-H نیمرسانای نوع p است و چگالی حفره ها در آن بیشتر از چگالی الکترون هاست، در نانوروبان 9-AGNR-H چگالی الکترون ها و حفره ها باهم برابر است و نیمرسانای ذاتی داریم. تغییرات گاف نواری با پهنای نانوروبان های گرافنی آرمچیر در شکل ۴-۵-الف نشان داده شده است. روند کاهش گاف نواری در نانوروبان های گرافنی آرمچیر نشان داده در این شکل با روند کاهشی که با دیگر تحقیقات گزارش شده در توافق است، به عنوان نمونه در شکل ۲ در مرجع شماره ۴۸ که در شکل ۴-۵-ب آورده شده است روند کاهش گاف نواری AGNR-H با نتایج بدست آمده در توافق خوبی است. چگالی حالت های بدست آمده برای نانوروبان های ZGNR-H با پهنای مختلف در شکل ۴-۴-الف نشان داده شده است بر طبق این نمودارها نانوروبان های ZGNR-H همگی فلز هستند. همچنین چگالی حالت ها برای اسپین بالا با چگالی حالت ها برای اسپین پایین برای این نانوروبان ها بر هم منطبق نمی باشد و این بیانگر این مطلب است که نانوروبان

های گرافنی زیگزاگ دارای خاصیت مغناطیسی می باشند. مقدار گشتاور مغناطیسی بدست آمده برای پهناهای مختلف در جدول ۴-۵ گزارش شده است، با توجه به نتایج بدست آمده مشاهده می شود با افزایش پهنا در ZGNR-H مقدار گشتاور مغناطیسی افزایش می یابد. نمودارهای ساختار نواری بدست آمده برای نانوروبان های ZGNR-H در شکل ۴-۴-ب آورده شده اند، ساختارهای نواری بدست آمده با ساختارهای نواری که در پژوهش های دیگر حاصل شده اند (مرجع شماره ۴۹) کاملاً در توافق هستند. باتوجه به اطلاعات بدست آمده از چگالی حالت ها، در گروه نانوروبان های گرافنی آرمچیر نانوروبان 7-AGNR-H و در گروه نانوروبان های گرافنی زیگزاگ نانوروبان 4-ZGNR-H را برای بررسی خواص الکترونی، مغناطیسی و تراپردی انتخاب کردیم.



شکل ۴-۵: تغییرات گاف نواری برحسب پهناى روبان در نانوروبان های AGNR-H (الف) مقادیر این پژوهش، (ب) نتایج مرجع ۴۸

جدول ۴-۴: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی برای نانوروبان های AGNR-H خالص با پهناهای مختلف

پهنای AGNR-H	پهنای AGNR-H برحسب آنگستروم	موقعیت تراز فرمی (eV)	E_C-E_F (eV)	E_F-E_V (eV)	گاف نواری (eV)
w=۴	۳/۷۴	-۳/۰۰۴۹	۰/۸۳	۱/۶۱	۲/۴۴ (n-type)
w=۵	۴/۸۹	-۳/۴۰۷۰	۰/۱۴	۰/۱۹	۰/۳۳ (n-type)
w=۶	۶/۱۶	-۳/۴۱۸۴	۰/۴۹	۰/۶۱	۱/۱ (n-type)
w=۷	۷/۳۶	-۳/۴۶۳۳	۰/۷۵	۰/۷۳	۱/۴۸ (p-type)
w=۸	۸/۶۴	-۳/۴۸۳۱	۰/۱۲	۰/۱۷	۰/۲۹ (n-type)
w=۹	۹/۸۳	-۳/۴۷۸۰	۰/۴۱	۰/۴۱	۰/۸۲
w=۱۰	۱۱/۱۱	-۳/۵۰۵۰	۰/۵۳	۰/۵۶	۱/۰۹ (n-type)

جدول ۴-۵: مقدار گشتاور مغناطیسی برحسب مگنتون بوهر (μ_B) برای نانوروبان های ZGNR-H با پهناهای مختلف

پهنا	w=۲	w=۴	w=۶	w=۸	w=۱۰
گشتاور مغناطیسی (μ_B)	۰	۰/۳۳	۰/۴۱	۰/۴۵	۰/۴۸

۴-۵- بررسی خواص الکترونی و مغناطیس نانوروبان های گرافنی آلایش یافته

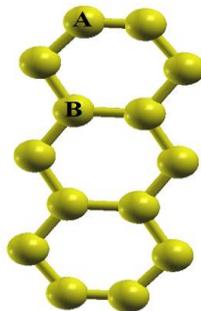
در این بخش از پایان نامه، ابتدا می خواهیم خواص الکترونی و مغناطیسی نانوروبان گرافنی آرمچیر را در حضور ناخالصی های نیتروژن (N) و بورون (B) بررسی کنیم، سپس خواص الکترونی و مغناطیسی نانوروبان های گرافنی آرمچیر و زیگزاک محدود شده با اتم هیدروژن را در حضور ناخالصی

عناصر واسطه (Fe و Mn ، Cr) بررسی کنیم. برای بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی در نانوروبان های گرافنی، نانوروبان گرافنی آرمچیر محدود نشده 7-AGNR و نانوروبان گرافنی آرمچیر محدود شده با اتم هیدروژن 7-AGNR-H و همچنین نانوروبان گرافنی آرمچیر 7-AGNR-H با طول دو سلول واحد به عنوان ابرسلول، و نانوروبان گرافنی زیگزاگ با لبه های محدود شده با اتم هیدروژن 4-ZGNR-H با طول چهار سلول واحد به عنوان ابرسلول انتخاب شده است.

۴-۵-۱- نانوروبان 7-AGNR آرایش یافته با اتم های بورون و نیتروژن

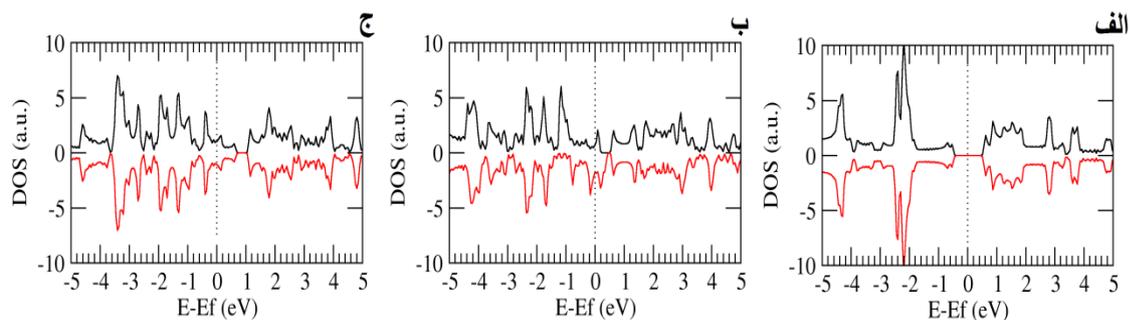
برای بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوروبان 7-AGNR آرایش یافته با اتم های بورون و نیتروژن از یک سلول واحد شامل ۱۴ اتم کربن استفاده کردیم، اتم ناخالصی را ابتدا در مکان A و سپس در مکان B جای یک اتم کربن قرار می دهیم، که به صورت شماتیک در شکل ۴-۶ نشان داده شده است.

در ابتدا اثر ناخالصی اتم بورون را بر روی 7-AGNR بررسی می کنیم. در حالت خالص 7-AGNR نیمرسانای غیر مغناطیسی با گاف انرژی eV ۱/۳۱ می باشد که نمودار چگالی حالت های آن در شکل ۴-۷-الف آورده شده است، طبق این شکل چگالی حالت ها برای اسپین بالا و پایین کاملاً برهم منطبق است و چگالی حالت ها برای اسپین های بالا و پایین متقارن است و ساختار خاصیت مغناطیسی ندارد. وقتی اتم بورون را در مکان A جای یک اتم کربن قرار می دهیم این باعث می شود



شکل ۴-۶: نانوروبان 7-AGNR و مکان های انتخاب شده برای آرایش آن

که حالت هایی اطراف تراز فرمی ایجاد شود و ساختار خاصیت فلزی پیدا کند. نمودار چگالی حالت ها برای 7-AGNR آرایش یافته با اتم بورون در مکان A در شکل ۴-۷-ب نشان داده شده است همانطور که در شکل دیده می شود چگالی حالت ها برای اسپین بالا با چگالی حالت ها برای اسپین پایین بر هم منطبق نیستند و قله های مربوط به چگالی حالت ها برای اسپین بالا و پایین در یک مکان و به یک اندازه ظاهر نشده اند و تقارن بین چگالی حالت های اسپین بالا و پایین از بین رفته است که این باعث ایجاد قطبش مغناطیسی در ساختار شده است لذا ساختار دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و در این حالت مقدار گشتاور مغناطیسی ساختار $0.57 \mu_B$ بدست آمد. وقتی اتم بورون را در مکان B جای یک اتم کربن قرار می دهیم یک فلز غیر مغناطیسی بدست می آید، نمودار چگالی حالت ها برای این وضعیت در شکل ۴-۷-ج نشان داده شده است همانطور که می توان از شکل استنباط کرد ساختار خاصیت مغناطیسی ندارد و گشتاور مغناطیسی ساختار صفر بدست آمد. باتوجه به نتایج بدست آمده وقتی اتم بورون را به عنوان ناخالصی در نانوروبان 7-AGNR قرار می دهیم ساختار خاصیت فلزی پیدا می کند و با توجه به اینکه این اتم در چه مکانی جای اتم کربن قرار بگیرد ساختار می تواند خاصیت مغناطیسی پیدا کند.

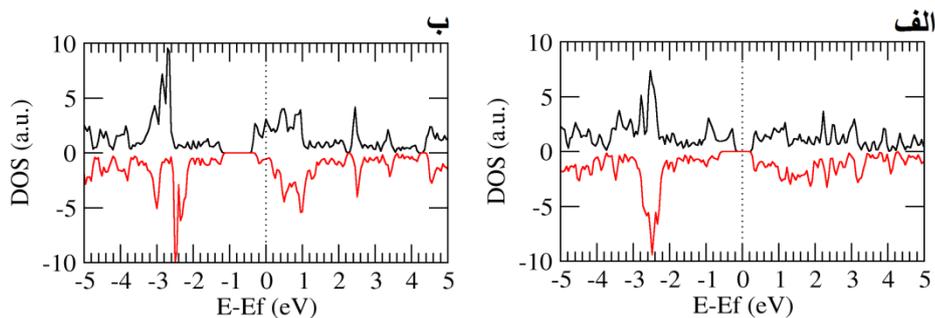


شکل ۴-۷: نمودار های چگالی حالت برای 7-AGNR (الف) خالص، و آرایش یافته با اتم بورون در مکان

(ب) A و (ج) B

حال به بررسی 7-AGNR آرایش یافته با اتم نیتروژن می پردازیم. وقتی اتم نیتروژن را در

مکان A جایگزین یک اتم کربن می کنیم یک نیمرسانای مغناطیسی حاصل می شود. مقدار گاف انرژی برای اسپین بالا 0.57 eV و برای اسپین پایین 1 eV بدست آمد، موقعیت تراز فرمی برای این ساختار 0.54 eV می باشد، چگالی حالت ها برای 7-AGNR آرایش یافته با اتم نیتروژن در مکان A در شکل ۴-۸-الف آورده شده است. این ساختار دارای گشتاور مغناطیسی به اندازه $0.999 \mu_B$ می باشد. وقتی اتم نیتروژن را جای یک اتم کربن در مکان B قرار می دهیم فلز مغناطیسی با گشتاور مغناطیسی حدود $0.6 \mu_B$ حاصل می شود. نمودار چگالی حالت های آن در شکل ۴-۸-ب آورده شده است. وقتی اتم نیتروژن را در نانوروبان 7-AGNR قرار می دهیم ساختار خاصیت مغناطیسی پیدا می کند و بسته به اینکه اتم ناخالصی را در چه مکانی جای اتم کربن قرار دهیم نیمرسانا یا فلز بدست می آید که این، می تواند در مهندسی گاف نواری استفاده شود.

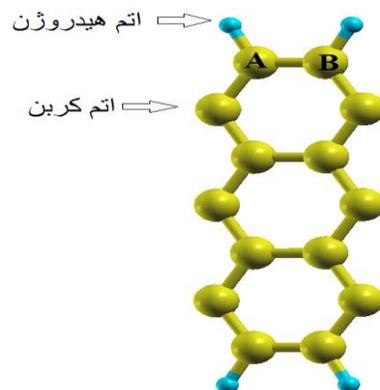


شکل ۴-۸: نمودار چگالی حالت ها برای 7-AGNR محدود نشده و آرایش یافته با اتم نیتروژن در مکان الف (A و ب) B

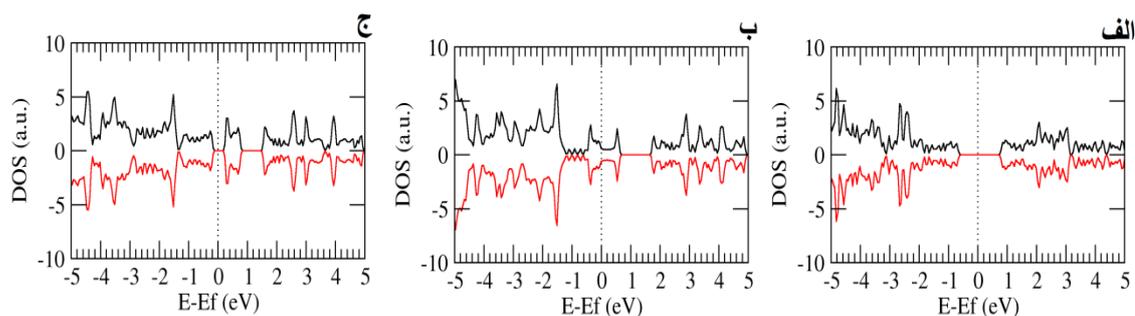
۴-۵-۲- نانوروبان گرافنی 7-AGNR-H و آرایش یافته با اتم های بورون و نیتروژن

برای آرایش 7-AGNR-H با اتم های بورون و نیتروژن از یک سلول واحد شامل ۱۸ اتم (۱۴ اتم کربن و ۴ اتم هیدروژن) استفاده شده است. در شکل ۴-۹، 7-AGNR-H و مکان های انتخاب شده برای آرایش آن با حروف الفبای لاتین نمایش داده شده است. در ابتدا اتم ناخالصی در مکان A جای یک اتم کربن و سپس در مکان های A و B جای دو اتم کربن قرار داده شد. پس از بهینه سازی

ساختار آلایش یافته و قرار دادن موقعیت های اتمی با پارامترهای ساختاری بهینه به بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی 7-AGNR-H آلایش یافته با اتم های بورون و نیتروژن پرداختیم. در این قسمت سعی در یافتن بهترین الکتروود (طبق بررسی های انجام شده در این پژوهش) برای تزریق جریان در ناحیه پراکندگی داریم. در این قسمت می خواهیم خواص الکترونی و مغناطیسی 7-AGNR-H آلایش یافته با اتم بورون را بررسی کنیم. نمودار چگالی حالت ها برای این نانوروبان در شکل ۴-۱۰ آورده شده است. 7-AGNR-H در حالت خالص نیمرسانای غیرمغناطیسی با گاف نواری $1/48 \text{ eV}$ می باشد که چگالی حالت های آن در شکل ۴-۱۰-الف نشان داده شده است، وقتی اتم بورون را در مکان A جای یک اتم کربن قرار می دهیم یک فلز غیر مغناطیسی حاصل می شود، شکل ۴-۱۰-ب چگالی حالت ها را برای 7-AGNR-H آلایش یافته با اتم بورون در مکان A نشان می دهد طبق این شکل چگالی حالت ها برای اسپین بالا و اسپین پایین برهم منطبق است و ساختار خاصیت مغناطیسی ندارد و گشتاور مغناطیسی آن صفر می باشد.



شکل ۴-۹: نانوروبان 7-AGNR-H و مکان های انتخاب شده برای آلایش آن

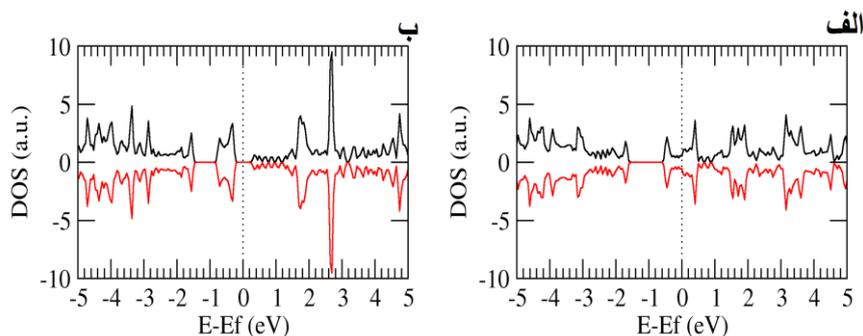


شکل ۴-۱۰: چگالی حالت ها برای نانوروبان 7-AGNR-H (الف) خالص، و آرایش یافته با اتم بورون در مکان (ب) A و در مکان های ج) A و B.

وقتی دو اتم بورون در دو مکان A و B جای دو اتم کربن قرار می گیرد نیمرسانای غیر مغناطیسی با گاف نواری 0.53 eV بدست می آید که چگالی حالت های آن در شکل ۴-۱۰ ج آورده شده است، با توجه به این شکل، این ساختار نیز خاصیت مغناطیسی ندارد و گشتاور مغناطیسی آن صفر می باشد. وقتی اتم بورون را به عنوان ناخالصی در نانوروبان 7-AGNR-H وارد می کنیم این اتم نمی تواند تقارن بین چگالی حالت های مربوط به اسپین بالا و پایین را از بین ببرد و ساختار حالت غیر مغناطیسی بودن خود را حفظ می کند اما با توجه به اینکه با یک یا دو اتم بورون، ساختار را آرایش دهیم می تواند منجر به تشکیل فلز یا نیمرسانا شود. چگالی حالت های برای 7-AGNR-H آرایش یافته با اتم نیتروژن در شکل ۴-۱۱ نشان داده شده است. وقتی اتم نیتروژن را در مکان A جای یک اتم کربن قرار می دهیم، یک فلز غیر مغناطیسی بدست می آید که چگالی حالت های آن در شکل ۴-۱۱ الف آورده شده است طبق این شکل، قله ها و دره های مربوط به چگالی حالت های اسپین بالا و پایین در یک مکان و به یک اندازه اتفاق می افتد و چگالی حالت های مربوط به این دو اسپین کاملاً برهم منطبق می باشد لذا ساختار خاصیت مغناطیسی ندارد و گشتاور مغناطیسی آن صفر می باشد. وقتی دو اتم نیتروژن در مکان های A و B جای دو اتم کربن قرار می گیرد نیمرسانایی با گاف نواری 0.63 eV بدست می آید، چگالی حالت های آن در شکل ۴-۱۱ ب نشان داده شده

است، گشتاور مغناطیسی این ساختار نیز صفر می باشد و ساختار خاصیت مغناطیسی ندارد. آرایش ساختار 7-AGNR-H با اتم نیتروژن، مانند آرایش ساختار با اتم بورون، نمی تواند تقارن بین چگالی حالت های اسپین بالا و پایین را از بین ببرد و به ساختار خاصیت مغناطیسی دهد اما بسته به اینکه چه اتم ناخالصی را در ساختار وارد کنیم، فلز یا نیمرسانا بدست می آید.

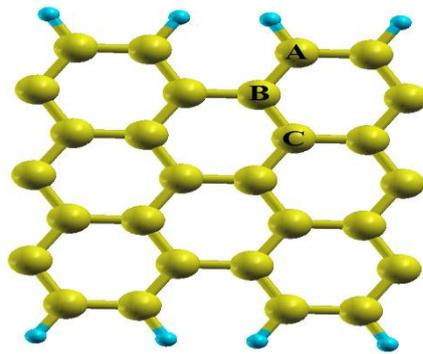
با توجه به نتایج بدست آمده در این قسمت، ساختارهای 7-AGNR-H آرایش یافته با یک اتم بورون و آرایش یافته با یک اتم نیتروژن را به عنوان الکتروود برای تزریق جریان در ناحیه پراکندگی، در گروه نانوروبان های آرمچیر انتخاب می کنیم.



شکل ۴-۱۱: چگالی حالت ها برای نانوروبان 7-AGNR-H آرایش یافته با اتم نیتروژن در مکان های الف) A و ب) B

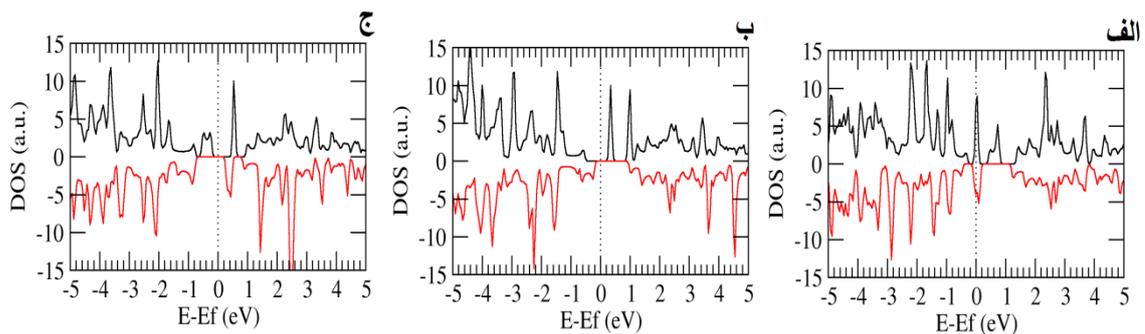
۴-۵-۳- نانوروبان گرافنی آرمچیر آرایش یافته با عناصر واسطه

برای بررسی تاثیر آرایش اتم های عناصر واسطه بر روی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوروبان گرافنی آرمچیر، نانوروبان 7-AGNR-H با طول دو سلول واحد به عنوان ابرسلول با تعداد ۳۶ اتم (۳۲ اتم کربن و ۸ اتم هیدروژن) را انتخاب کردیم. این نانوروبان و مکان های انتخاب شده برای آرایش در آن در شکل ۴-۱۲ نشان داده شده است. از بین اتم های عناصر واسطه اتم های Cr ، Mn و Fe را برای آرایش ابرسلول 7-AGNR-H انتخاب کردیم.



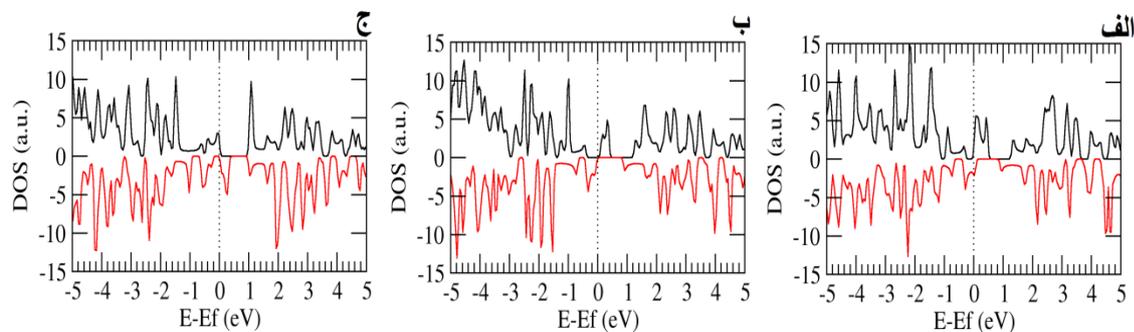
شکل ۴-۱۲: نانورویان 7-AGNR-H با طول دو سلول واحد و مکان های انتخاب شده برای آرایش آن

ابتدا تاثیر اتم ناخالصی را با قرار دادن در مکان A بر روی خواص الکترونی و مغناطیسی ابرسلول 7-AGNR-H بررسی می کنیم. نمودارهای چگالی حالت های بدست آمده در شکل ۴-۱۳ آورده شده است. با قرار دادن اتم کروم جای اتم کربن فلز مغناطیسی با اندازه گشتاور مغناطیسی $2/84 \mu_B$ بدست می آید. با قرار دادن یک اتم Mn و یا یک اتم Fe در مکان A جای یک اتم کربن نیمرسانای مغناطیسی بدست می آید. اطلاعات مربوط به اندازه گاف نواری برای اسپین بالا و اسپین پایین، و میزان گشتاور مغناطیسی هر ساختار در جدول ۴-۶ آورده شده است. طبق مقادیر بدست آمده ساختار زمانی دارای بیشترین مقدار گشتاور مغناطیسی می شود که با اتم آهن آرایش یابد.



شکل ۴-۱۳: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 7-AGNR-H آرایش یافته با اتم های الف (Cr ، ب) Mn و ج) Fe در مکان A

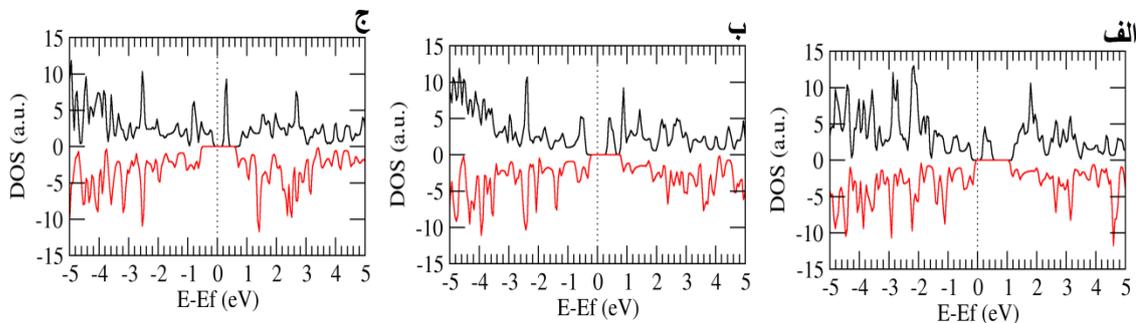
با آرایش ساختار با اتم کروم در مکان B، فلز مغناطیسی بدست آمد. چگالی حالت ها برای این ترکیب در شکل ۴-۱۴-الف آورده شده است. با توجه به این شکل، ساختار دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و مقدار گشتاور مغناطیسی محاسبه شده برای این ساختار $2/13 \mu_B$ می باشد. چگالی حالت ها برای زمانی که اتم منگنز جای اتم کربن در مکان B قرار می گیرد در شکل ۴-۱۴-ب آورده شده است. طبق این شکل با قرار دادن اتم منگنز در مکان B جای اتم کربن نیمرسانای مغناطیسی با مقدار گاف نواری $0/56 \text{ eV}$ برای اسپین بالا و $0/96 \text{ eV}$ برای اسپین پایین بدست آوردیم. گشتاور مغناطیسی ساختار $3 \mu_B$ می باشد. با قرار دادن اتم آهن جای یک اتم کربن در مکان B فلز مغناطیسی حاصل شد که چگالی حالت های آن در شکل ۴-۱۴-ج نشان داده شده است. همانطور که در شکل می بینیم ساختار دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و گشتاور مغناطیسی به دست آمده در آن $3/95 \mu_B$ می باشد. بیشترین گشتاور برای وقتی که ناخالصی در مکان B جای اتم کربن قرار می گیرد مربوط به اتم Fe می باشد.



شکل ۴-۱۴: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 7-AGNR-H آرایش یافته با اتم های الف (Cr، ب)، ج (Mn و Fe) در مکان B

وقتی اتم ناخالصی را در مکان C جای یک اتم کربن قرار می دهیم، برای هر سه آرایش، نیمرسانای مغناطیسی خواهیم داشت. نمودارهای چگالی حالت برای سه اتم Cr، Mn و Fe به ترتیب در شکل ۴-۱۵-الف، ۴-۱۵-ب و ۴-۱۵-ج آورده شده است. اطلاعات مربوط به اندازه گاف نواری برای

اسپین بالا، اندازه گاف نواری برای اسپین پایین، رفتار الکترونیکی و گشتاور مغناطیسی در جدول ۴-۶ آورده شده است.



شکل ۴-۱۵: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 7-AGNR-H آرایش یافته با اتم های الف (Cr ، ب) Mn و ج) در مکان C

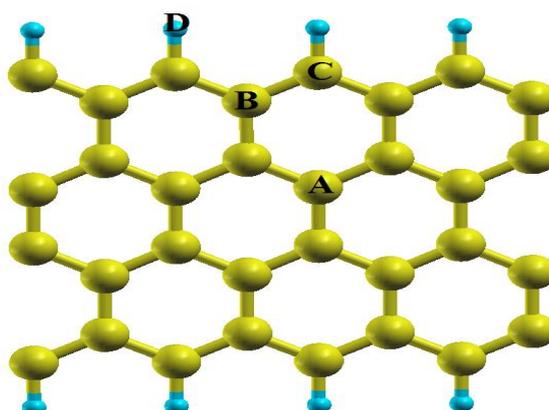
جدول ۴-۶: مقادیر محاسبه شده برای اندازه گاف نواری، گشتاور مغناطیسی و رفتار الکترونیکی برای ابرسلول 7-AGNR-H آرایش یافته با عناصر واسطه Cr ، Mn و Fe در مکان های A، B و C

مکان آرایش	E_g برای اسپین بالا	E_g برای اسپین پایین	گشتاور مغناطیسی (μ_B)	رفتار الکترونیکی
Cr (A)	-	-	۲/۸۴	فلز مغناطیسی
Mn (A)	۰/۸۲	۱/۲۲	۲/۹۹	نیمرسانای مغناطیسی
Fe (A)	۰/۷۳	۱/۰۹	۳/۹۹	نیمرسانای مغناطیسی
Cr (B)	-	-	۲/۱۳	فلز مغناطیسی
Mn (B)	۰/۵۶	۰/۹۶	۳/۰	نیمرسانای مغناطیسی
Fe (B)	-	-	۳/۹۵	فلز مغناطیسی
Cr (C)	۰/۴۵	۱/۲۴	۲/۰	نیمرسانای مغناطیسی
Mn (C)	۰/۸۲	۱/۱۲	۲/۹۹	نیمرسانای مغناطیسی
Fe (C)	۰/۴۶	۱/۲۴	۳/۹۹	نیمرسانای مغناطیسی

با توجه به نتایج بدست آمده در این پژوهش، وقتی در نانوروبان 7-AGNR-H که در حالت خالص نیمرسانای غیر مغناطیسی است از اتم عناصر واسطه به عنوان آرایش استفاده می کنیم جفت شدگی بین حالت های لبه و حالت اتم آلاینده باعث می شود تقارن بین چگالی حالت های اسپین بالا و پایین از بین برود و در ساختار قطبش مغناطیسی ایجاد شود که این باعث می شود ساختار خاصیت مغناطیسی پیدا کند. بیشترین گشتاور مغناطیسی مربوط به آرایش با اتم آهن در مکان A می باشد؛ همچنین با توجه نتایج جدول ۴-۶، اینکه کدام اتم آلاینده را در چه مکانی جای اتم کربن قرار دهیم، نیمرسانا یا فلز بدست می آید به عبارت دیگر خواص الکترونی و مغناطیسی نانوروبان 7-AGNR-H به مکان قرار گرفتن اتم آلاینده و نوع آن بستگی دارد.

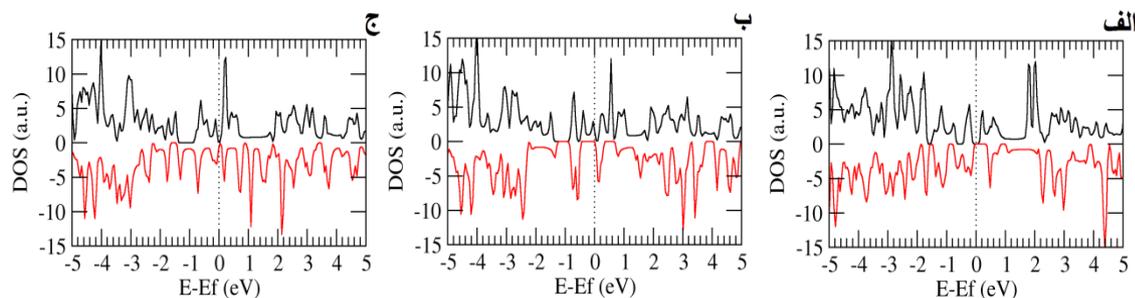
۴-۵-۴- نانوروبان گرافنی زیگزاگ آرایش یافته با عناصر واسطه

برای بررسی نانوروبان گرافنی زیگزاگ، نانوروبان 4-ZGNR-H و طول چهار سلول واحد را به عنوان ابرسلول انتخاب کردیم که دارای ۴۰ اتم (۳۲ اتم کربن و ۸ اتم هیدروژن) می باشد، اتم های کربن موجود در هر دو لبه نانوروبان با اتم هیدروژن محدود شده اند، در شکل ۴-۱۶ این نانوروبان و محل های انتخاب شده برای آرایش آن نشان داده شده است. قبل از انجام محاسبات ابتدا ساختار آرایش یافته با عناصر واسطه را بهینه می کنیم سپس با بدست آوردن موقعیت های اتمی با پارامترهای ساختاری بهینه به بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته با اتم عناصر واسطه می پردازیم. از بین عناصر واسطه اتم های Cr، Mn و Fe را انتخاب کردیم. مکان های انتخاب شده برای آرایش، مکان A (جای اتم کربنی که در میانه ساختار قرار دارد)، مکان B (جای اتم کربنی که در لبه نانوروبان قرار دارد و با سه اتم کربن دیگر پیوند دارد)، مکان C (جای اتم کربنی که در لبه نانوروبان قرار دارد و با دو اتم کربن مجاور و یک اتم هیدروژن پیوند دارد) و مکان D (جای یک اتم هیدروژن) قرار می دهیم، که در مکان D اتم های Mn و Fe را به عنوان آرایش انتخاب کردیم.



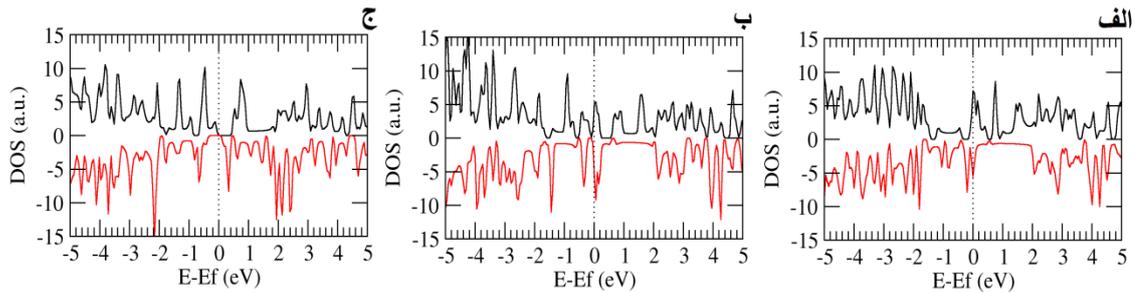
شکل ۴-۱۶: ابرسلول نانوروبان گرافنی 4-ZGNR-H و محل های انتخاب شده برای آرایش آن با اتم های عناصر واسطه

در شکل ۴-۴ نمودار چگالی حالت ها برای 4-ZGNR-H خالص نشان داده شده است، با توجه به چگالی حالت های آن، این ساختار یک فلز مغناطیسی است. وقتی اتم ناخالصی را در مکان A جای یک اتم کربن قرار می دهیم برای هر سه نوع اتم ناخالصی، ساختار به یک نیم رسانای مغناطیسی تبدیل می شود. چگالی حالت های بدست آمده برای آرایش 4-ZGNR-H با اتم Cr در شکل ۴-۱۷-الف، با اتم Mn در شکل ۴-۱۷-ب و با اتم Fe در شکل ۴-۱۷-ج آورده شده است. همانطور که در نمودارهای چگالی حالت ها می بینیم آرایش ساختار با یک اتم از عناصر واسطه باعث می شود، نیم رسانا حاصل شود و در هر سه وضعیت آرایش ساختار با عناصر واسطه باعث افزایش خاصیت مغناطیسی ساختار می شود. مقادیر بدست آمده برای اندازه گاف نواری، نوع آن و گشتاور مغناطیسی در جدول ۴-۷ آورده شده است. طبق مقادیر بدست آمده بیشترین گشتاور مغناطیسی مربوط به آرایش منگنز در مکان A می باشد.



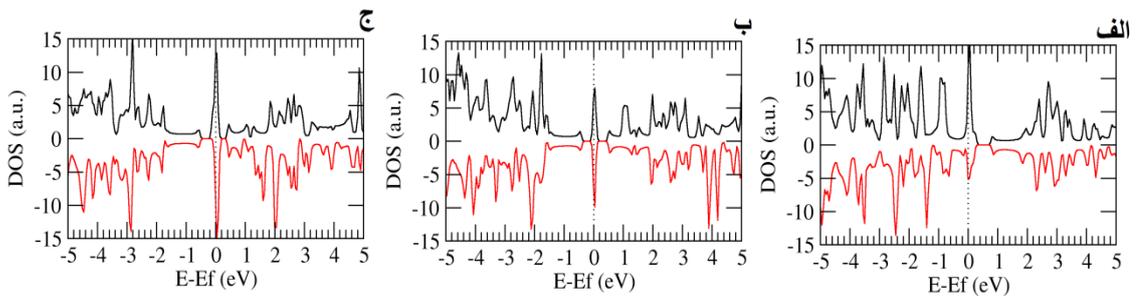
شکل ۴-۱۷: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته با اتم الف (Cr ، ب) Mn و ج) Fe در مکان A

وقتی اتم کروم را در مکان B جای یک اتم کربن قرار می دهیم فلز مغناطیسی حاصل می شود. چگالی حالت ها برای ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته با اتم کروم در مکان B در شکل ۴-۱۸-الف آورده شده است، می بینیم در این موقعیت ترکیب دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و گشتاور مغناطیسی بدست آمده برای این ترکیب $1/15 \mu_B$ می باشد. با قرار دادن اتم منگنز جای اتم کربن در موقعیت B بازهم فلز مغناطیسی حاصل شد، نمودار چگالی حالت ها برای 4-ZGNR-H آرایش یافته با اتم منگنز در شکل ۴-۱۸-ب آورده شده است می بینیم ساختار دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و مقدار گشتاور مغناطیسی بدست آمده برای این ترکیب $4/2 \mu_B$ می باشد. با قرار دادن اتم آهن جای یک اتم کربن در موقعیت B نیمرسانای مغناطیسی بدست آوردیم. چگالی حالت ها برای 4-ZGNR-H آرایش یافته با اتم آهن در مکان B در شکل ۴-۱۸-ج نشان داده شده است. طبق چگالی حالت های بدست آمده ترکیب دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و اندازه گشتاور مغناطیسی $3/99 \mu_B$ می باشد. اندازه گاف انرژی برای اسپین بالا $0/55 \text{ eV}$ و برای اسپین پایین $0/53 \text{ eV}$ بدست آمد. طبق مقادیر بدست آمده بیشترین مقدار گشتاور مغناطیسی برای آرایش منگنز در موقعیت B می باشد.



شکل ۴-۱۸: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته با اتم الف (Cr ، ب Mn و ج) در مکان B

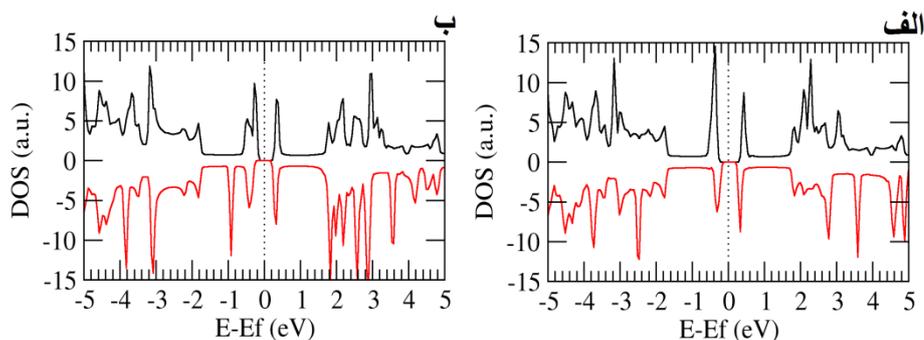
چگالی حالت ها برای ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته با اتم کروم، منگنز و آهن در مکان C به ترتیب در شکل ۴-۱۹ الف، ب و ج آورده شده است. برطبق چگالی حالت های بدست آمده در هر سه وضعیت فلز مغناطیسی حاصل شد. گشتاور مغناطیسی برای ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته در مکان C با اتم کروم $3/34 \mu_B$ ، با اتم منگنز $3/98 \mu_B$ و با اتم آهن μ_B حاصل شد. مشاهده می شود بیشترین مقدار گشتاور مغناطیسی برای اتم آهن گرفته در مکان C بدست می آید.



شکل ۴-۱۹: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR آرایش یافته با اتم الف (Cr ، ب Mn و ج) در مکان C

حال می خواهیم وضعیتی را بررسی کنیم که در آن اتم ناخالصی جای یک اتم هیدروژن در

مکان D در ابرسلول 4-ZGNR-H قرار می گیرد. برای آرایش ابرسلول 4-ZGNR-H در مکان D اتم های منگنز و آهن را انتخاب کردیم. چگالی حالت ها برای ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته با اتم منگنز و آهن به ترتیب در شکل ۴-۲۰-الف و ۴-۲۰-ب آورده شده است. طبق چگالی حالت های بدست آمده وقتی اتم منگنز را جای اتم هیدروژن در مکان D قرار می دهیم نیمرسانای مغناطیسی حاصل می شود. همچنین زمانی که اتم آهن را در مکان D جای یک اتم هیدروژن قرار می دهیم نیمرسانای مغناطیسی خواهیم داشت. مقادیر بدست آمده برای گاف انرژی، نوع آن و گشتاور مغناطیسی در جدول ۴-۷ آورده شده است. مشاهده می شود بیشترین گشتاور مغناطیسی برای آرایش در مکان D زمانی حاصل می شود که اتم منگنز جای اتم هیدروژن قرار بگیرد.



شکل ۴-۲۰: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته با اتم الف) Mn و ب) Fe در مکان D

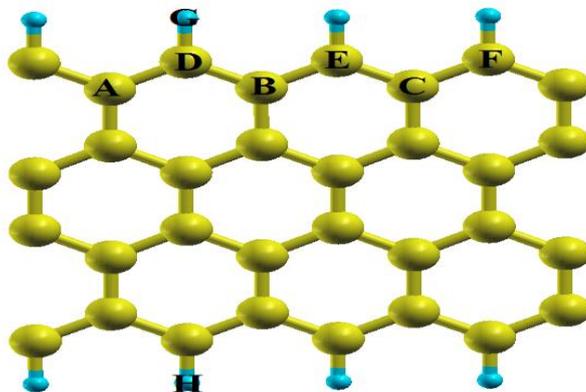
جدول ۴-۷: مقادیر بدست آمده برای برای اندازه گاف نواری، نوع آن و مقدار گشتاور مغناطیسی در ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته با عناصر واسطه در مکان های A و D

اتم ناخالصی	گاف انرژی اسپین بالا (eV)	گاف انرژی اسپین پایین (eV)	گشتاور مغناطیسی (μ_B)	رفتار الکتریکی
Cr (A)	۰/۳۹	۰/۵۶	۲/۰	نیمرسانای مغناطیسی
Mn (A)	۰/۲۳	۱/۱	۲/۹۶	نیمرسانای مغناطیسی
Fe (A)	۰/۱۸	۰/۲۱	۲/۰۱	نیمرسانای مغناطیسی
Cr (B)	-	-	۱/۱۵	فلز مغناطیسی
Mn (B)	-	-	۴/۲	فلز مغناطیسی
Fe (B)	۰/۵۵	۰/۵۳	۳/۹۹	نیمرسانای مغناطیسی
Cr (C)	-	-	۳/۳۴	فلز مغناطیسی
Mn (C)	-	-	۳/۹۴	فلز مغناطیسی
Fe (C)	-	-	۴/۵۴	فلز مغناطیسی
Mn (D)	۰/۷	۰/۵	۶/۰	نیمرسانای مغناطیسی
Fe (D)	۰/۶	۰/۵۸	۴/۹۹	نیمرسانای مغناطیسی

با توجه به نتایج بدست آمده برای نانوروبان 4-ZGNR-H مشاهده می شود که وقتی اتم ناخالصی را در مرکز نانوروبان جای یک اتم کربن قرار می دهیم جفت شدگی بین اتم ناخالصی و نانوروبان قویتر از وضعیتی است که اتم ناخالصی در لبه نانوروبان جای یک اتم هیدروژن قرار بگیرد لذا بیشترین تفاوت در چگالی حالت های مربوط به اسپین بالا و پایین زمانی است که اتم ناخالصی در لبه نانوروبان جای یک اتم هیدروژن قرار بگیرد و بیشترین گشتاور مغناطیسی در نانوروبان 4-ZGNR-H آرایش یافته با یک اتم از عناصر واسطه در این وضعیت اتفاق می افتد، همچنین بسته به اینکه کدام اتم آلاینده را در چه مکانی قرار دهیم نیمرسانا یا فلز بدست می آید. با توجه به نتایج این پژوهش می

توان گفت خواص الکترونی و مغناطیسی نانوروبان 4-ZGNR-H مورد بررسی به محل آرایش و نوع اتم آلاینده بستگی دارد.

اکنون می خواهیم به بررسی ابرسلول نانوروبان گرافنی زیگزاگ آرایش یافته با دو اتم از عناصر واسطه به طور همزمان بپردازیم. مکان هایی را که برای آرایش انتخاب کردیم در شکل ۴-۲۱ با حروف الفبای لاتین نشان داده ایم. اتم های انتخاب شده برای آرایش اتم های کروم، منگنز و آهن می باشند. در این قسمت نیز قبل از انجام محاسبات ابتدا ساختار را بهینه می کنیم سپس با قرار دادن

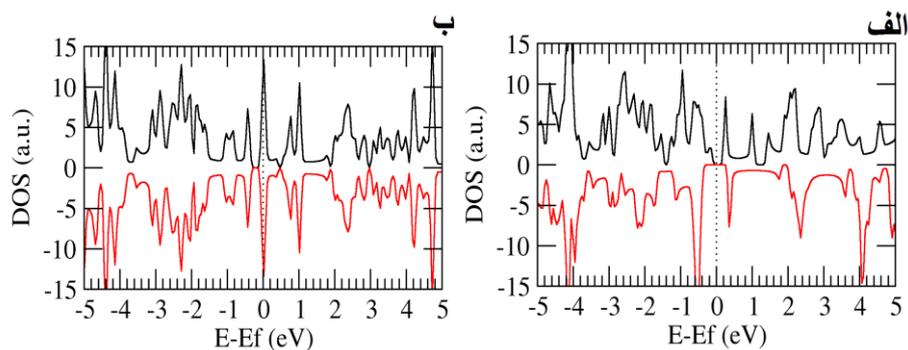


شکل ۴-۲۱: ابرسلول 4-ZGNR-H و مکان های انتخاب شده برای آرایش آن که با حروف الفبای لاتین مشخص شده اند.

موقعیت های اتمی با پارامترهای ساختاری بهینه شده به بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی می پردازیم.

با قرار دادن دو اتم Cr جای دو اتم کربن در مکان های A و C وقتی دو اتم نسبت بهم در حالت فرومغناطیس قرار می گیرند نیمرسانا بدست می آید و وقتی دو اتم نسبت بهم در حالت فرومغناطیس قرار می گیرند یک فلز بدست می آید. چگالی حالت ها بدست آمده برای حالت فرومغناطیس در شکل ۴-۲۲-الف و برای حالت پاد فرومغناطیس در شکل ۴-۲۲-ب آورده شده است.

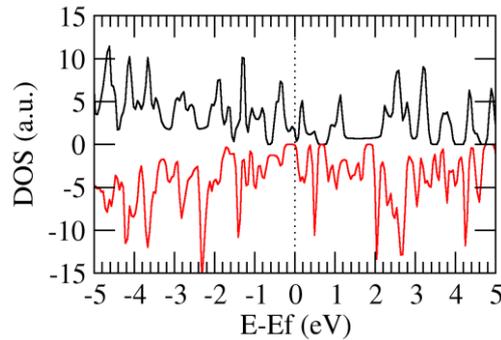
همانطور که می بینیم وقتی دو اتم نسبت بهم حالت فرومغناطیس دارند ساختار دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و گشتاور مغناطیسی بدست آمده در این وضعیت $3/99 \mu_B$ می باشد، اندازه گاف نواری برای اسپین بالا $0/34 \text{ eV}$ و برای اسپین $1/07 \text{ eV}$ می باشد. برای حالتی که دو اتم کروم در ابرسلول 4-ZGNR-H نسبت بهم در وضعیت پاد فرومغناطیس قرار دارند ساختار هیچ خاصیت مغناطیسی را از خود نشان نمی دهد و گشتاور مغناطیسی صفر است. وقتی دو اتم منگنز یا دو اتم آهن جای دو اتم کربن در مکان های A و C قرار می گیرند، با توجه به پارامترهای ورودی انتخاب شده برای انجام محاسبات ساختار بهینه تشکیل نشد، لذا نمی توانستیم خواص الکترونی و مغناطیسی آنرا بررسی کنیم.



شکل ۴-۲۲: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته با دو اتم Cr در مکان های A و C در وضعیت الف) فرومغناطیس و ب) پاد فرومغناطیس

با قرار دادن دو اتم آهن در مکان های B و C جای دو اتم کربن، وقتی این دو اتم در وضعیت فرومغناطیس نسبت بهم قرار می گیرند ساختار نیم رسانای مغناطیسی با گشتاور مغناطیسی $7/97 \mu_B$ و اندازه گاف نواری $0/11 \text{ eV}$ برای اسپین بالا و $0/4 \text{ eV}$ برای اسپین پایین می باشد. چگالی حالت های این ترکیب در شکل ۴-۲۳ آورده شده است. وقتی دو اتم آهن که نسبت بهم در وضعیت پاد فرومغناطیس قرار دارند، و همچنین وقتی دو اتم کروم یا دو اتم منگنز جای دو اتم کربن در مکان

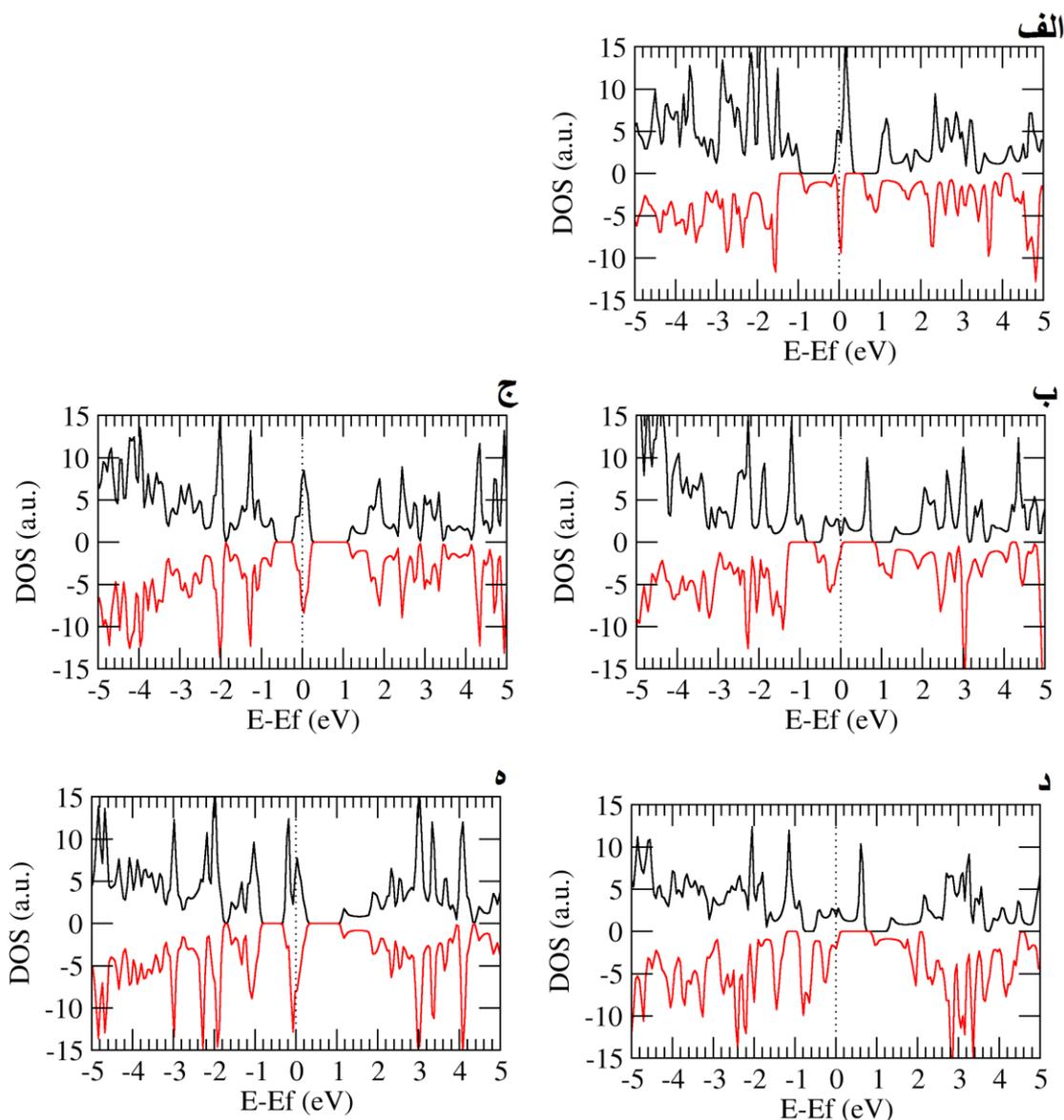
های B و C قرار می گیرند هم در حالتی که دو اتم نسبت بهم در وضعیت فرومغناطیس و هم در حالتی که نسبت بهم در وضعیت پاد فرومغناطیس قرار می گیرند با توجه به پارامترهای ورودی انتخاب شده برای انجام محاسبات ساختار بهینه تشکیل نشد.



شکل ۴-۲۳: نمودار چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته با اتم آهن در مکان های B و C در وضعیت فرومغناطیس

وقتی دو اتم کروم را جای دو اتم کربن در مکان های D و E قرار می دهیم، وقتی این دو اتم در وضعیت فرومغناطیس نسبت بهم قرار بگیرند فلز بدست می آید چگالی حالت های بدست آمده برای این وضعیت در شکل ۴-۲۴ الف آورده شده است همانطور که می بینیم ساختار دارای خاصیت مغناطیسی است، گشتاور مغناطیسی محاسبه شده برای این ساختار $7/13 \mu_B$ می باشد؛ و وقتی دو اتم نسبت بهم در وضعیت پاد فرومغناطیس قرار گرفتند ساختار بهینه تشکیل نشد. با قرار دادن دو اتم منگنز در دو مکان D و E جای دو اتم کربن اگر دو اتم ناخالصی را نسبت بهم در فاز فرومغناطیس قرار دهیم نیم رسانایی با خاصیت مغناطیسی و اندازه گشتاور مغناطیسی $8/3 \mu_B$ بدست می آید، چگالی حالت ها برای این وضعیت در شکل ۴-۲۴ ب آورده شده است، اندازه گاف نواری برای اسپین بالا $0/12 \text{ eV}$ و برای اسپین پایین $0/94 \text{ eV}$ می باشد؛ اگر دو اتم منگنز را نسبت بهم در وضعیت پاد فرومغناطیس قرار دهیم فلز مغناطیسی با گشتاوری به اندازه $0/01 \mu_B$ بدست می آید، چگالی حالت ها برای این وضعیت را در شکل ۴-۲۴ ج نشان داده ایم. با قرار دادن دو اتم آهن در مکان های D و

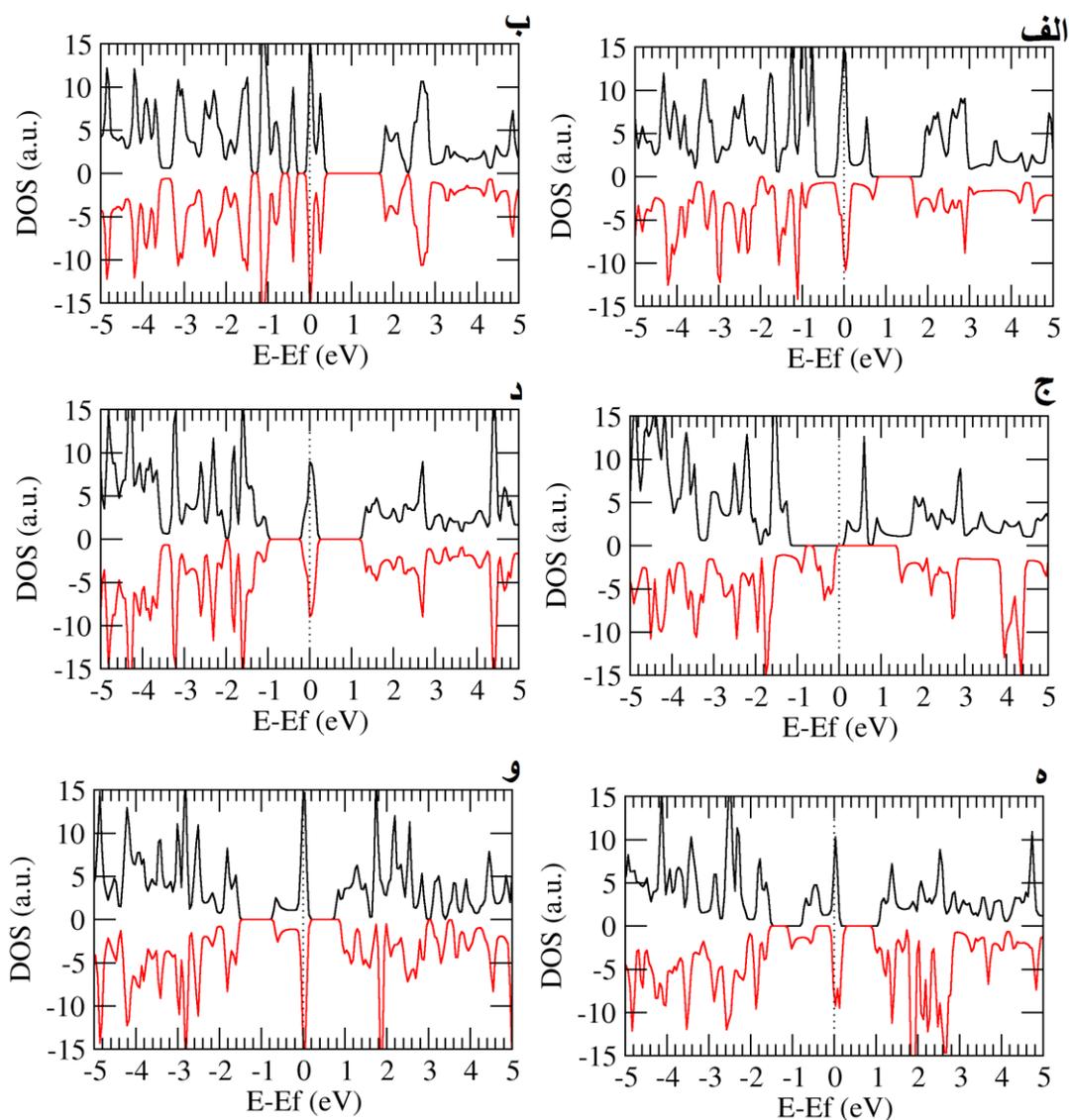
E جای دو اتم کربن، هم برای زمانیکه دو اتم نسبت بهم در فاز فرومغناطیس قرار دارند و هم برای زمانیکه دو اتم نسبت بهم در فاز پاد فرومغناطیس قرار دارند فلز بدست می آید. چگالی حالت ها برای ناخالصی آهن در فاز فرومغناطیس در شکل ۴-۲۴-د، و در فاز پاد فرومغناطیس در شکل ۴-۲۴-ه آورده شده است. همانطور که در نمودارهای چگالی حالت می بینیم وقتی دو اتم ناخالصی آهن در وضعیت فرومغناطیس نسبت بهم قرار دارند ساختار دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و اندازه گشتاور مغناطیسی محاسبه شده $6/13 \mu_B$ می باشد؛ در فاز پاد فرومغناطیس نیز ساختار دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و گشتاور $0/000718 \mu_B$ می باشد.



شکل ۴-۲۴: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته در مکان های D و E (الف) دو اتم Cr در فاز فرومغناطیس، دو اتم Mn در فاز (ب) فرومغناطیس، (ج) پاد فرومغناطیس و دو اتم Fe در فاز (د) فرومغناطیس و (ه) پاد فرومغناطیس

وقتی دو اتم Cr را در مکان های D و F جانشین دو اتم کربن می کنیم، هم برای حالتی که دو اتم کروم نسبت بهم در وضعیت فرومغناطیسی قرار دارند و هم برای وضعیتی که نسبت بهم در فاز پاد فرومغناطیس می باشند، ترکیب خواص فلزی را نشان می دهد. چگالی حالت های بدست آمده برای

قرار گرفتن دو اتم کروم در وضعیت فرومغناطیسی در شکل ۴-۲۵-الف و در وضعیت پاد فرومغناطیسی در شکل ۴-۲۵-ب آورده شده است. وقتی دو اتم کروم نسبت بهم در وضعیت فرومغناطیسی قرار دارند ساختار دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و اندازه گشتاور مغناطیسی برای این وضعیت $7/75 \mu_B$ می باشد اما برای وضعیتی که دو اتم نسبت بهم در فاز پاد فرومغناطیسی قرار دارند ساختار هیچ خاصیت مغناطیسی ندارد و گشتاور مغناطیسی بدست آمده صفر می باشد. با قرار دادن دو اتم Mn در مکان های D و F در ابرسلول 4-ZGMR-H جای دو اتم کربن، وقتی دو اتم ناخالصی نسبت بهم در فاز فرومغناطیسی قرار می گیرند، نیمرسانا بدست می آید، و وقتی دو اتم ناخالصی نسبت بهم در فاز پاد فرومغناطیسی قرار می گیرند، فلز بدست می آید. نمودارهای چگالی حالت برای فاز فرومغناطیسی در شکل ۴-۲۵-ج و برای فاز پاد فرومغناطیسی در شکل ۴-۲۵-ب آورده شده است. برای حالت فرومغناطیسی ساختار دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و اندازه گشتاور مغناطیسی ساختار $6/0 \mu_B$ می باشد، اندازه گاف نواری برای اسپین بالا $1/41 \text{ eV}$ و برای اسپین پایین اندازه گاف نواری eV $1/58$ می باشد. در حالت پاد فرومغناطیسی ساختار خاصیت مغناطیسی ندارد و گشتاور مغناطیسی ساختار صفر می باشد. با قرار دادن دو اتم آهن به عنوان ناخالصی جای دو اتم کربن در مکان های D و F برای هر دو وضعیت فرومغناطیسی و پاد فرومغناطیسی قرار گرفتن دو اتم ناخالصی نسبت به هم، فلز بدست می آید. نمودار چگالی حالت برای وضعیت فرومغناطیسی در شکل ۴-۲۵-ه و برای وضعیت پاد فرومغناطیسی در شکل ۴-۲۵-و آورده شده است. وقتی دو اتم آهن در وضعیت فرومغناطیسی نسبت بهم قرار دارند ساختار دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و گشتاور مغناطیسی بدست آمده در این وضعیت برای این ساختار $8/71 \mu_B$ می باشد، و وقتی دو اتم آهن در وضعیت پاد فرومغناطیسی نسبت به هم قرار دارند نیز ساختار دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و اندازه گشتاور مغناطیسی ساختار $0/14 \mu_B$ می باشد.



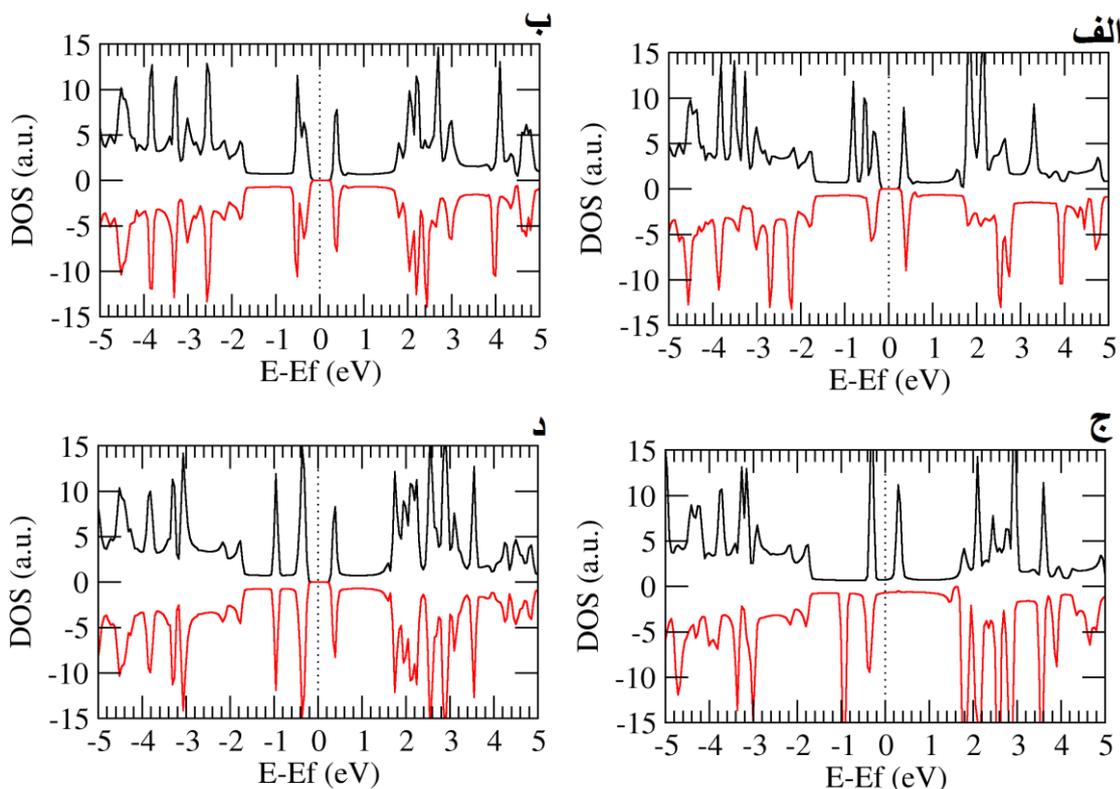
شکل ۴-۲۵: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته در مکان های D و F برای دو اتم Cr در فاز الف (فرو، ب) پاد فرو، دو اتم Mn در فاز ج (فرو، د) پاد فرو، و دو اتم Fe در فاز ه (فرو و و) پاد فرو

حال می خواهیم به بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوروبان گرافنی آرایش یافته با عناصر واسطه بپردازیم وقتی که اتم ناخالصی جای اتم هیدروژن قرار می گیرد. از بین عناصر واسطه اتم های آهن و منگنز را برای آرایش در ابرسلول 4-ZGNR-H انتخاب کردیم. نمودارهای چگالی حالت برای قرار گرفتن دو اتم منگنز جای دو اتم هیدروژن در مکان های G و H وقتی دو اتم

ناخالصی نسبت بهم در وضعیت فرومغناطیس قرار دارند در شکل ۴-۲۶-الف و برای وضعیتی که دو اتم نسبت بهم در فاز پاد فرومغناطیس قرار دارند در شکل ۴-۲۶-ب آورده شده است. با قرار دادن دو اتم Mn جای دو اتم هیدروژن هم برای حالتی که دو اتم ناخالصی نسبت بهم در وضعیت فرومغناطیس قرار دارند و هم برای حالتی که دو اتم ناخالصی نسبت بهم در وضعیت پاد فرومغناطیس قرار دارند، نیمرسانا بدست می آید، اما وقتی دو اتم در وضعیت فرومغناطیس نسبت بهم قرار دارند ساختار خاصیت مغناطیسی دارد و گشتاور مغناطیسی ساختار $12/0 \mu_B$ می باشد، و وقتی دو اتم نسبت بهم در وضعیت پاد فرومغناطیس قرار می گیرند ساختار خاصیت مغناطیسی ندارد و گشتاور صفر بدست آمد. برای حالتی که دو اتم منگنز نسبت بهم در وضعیت فرومغناطیس قرار دارند، اندازه گاف نواری برای اسپین بالا $0/55 \text{ eV}$ و برای اسپین پایین $0/59 \text{ eV}$ می باشد. با قرار دادن دو اتم آهن در مکان های G و H جای دو اتم هیدروژن، در وضعیتی که دو اتم نسبت بهم در فاز فرومغناطیس قرار دارند، فلز بدست می آید. چگالی حالت ها برای این وضعیت در شکل ۴-۲۶-ج آورده شده است، همانطور که می بینیم، ساختار دارای خاصیت مغناطیسی می باشد و اندازه گشتاور مغناطیسی محاسبه شده برای این وضعیت $8/34 \mu_B$ است. با قرار دادن دو اتم آهن در مکان های G و H جای دو اتم هیدروژن وقتی دو اتم نسبت بهم در فاز پاد فرومغناطیس قرار دارند نیمرسانا بدست می آید. نمودار چگالی حالت ها برای این وضعیت در شکل ۴-۲۶-د آورده شده است. همانطور که در شکل می بینیم ساختار خاصیت مغناطیسی ندارد و گشتاور مغناطیسی صفر بدست می آید.

با توجه به نتایج بدست آمده در این قسمت می بینم، آرایش ساختار 4-ZGMR-H با دو اتم از عناصر واسطه با توجه به اینکه در چه مکانی و کدام نوع اتم آلاینده را قرار دهیم فلز و یا نیمرسانا بدست می آید، اینکه دو اتم آلاینده در وضعیت فرومغناطیس یا پاد فرومغناطیس نسبت بهم قرار بگیرند باعث می شود خاصیت مغناطیسی ساختار افزایش یابد و یا به صفر برسد، همچنین بیشترین مقدار گشتاور مغناطیسی زمانی حاصل شد که دو اتم آلاینده را در وضعیت فرو مغناطیس نسبت بهم

جای دو اتم هیدروژن قرار دادیم.



شکل ۴-۲۶: نمودارهای چگالی حالت برای ابرسلول 4-ZGNR-H آرایش یافته با، دو اتم Mn در فاز الف) فرومغناطیس، ب) پاد فرومغناطیس، و دو اتم Fe در وضعیت ج) فرومغناطیس و د) پاد فرومغناطیس در مکان های G و H

۴-۶- جمع بندی

در این فصل به بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوروبان های گرافنی آرمچیر و زیگزاگ پرداختیم. نانوروبان های گرافنی آرمچیر در حالت خالص همگی نیمرسانا بودند و خاصیت مغناطیسی نداشتند، همچنین با افزایش پهناي روبان در نانوروبان های گرافنی آرمچیر گاف نواری روندی تناوبی و کاهشی داشت. نانوروبان های گرافنی زیگزاگ در حالت خالص همگی فلز مغناطیسی بدست آمدند. در بین نانوروبان های گرافنی آرمچیر نانوروبان 7-AGNR محدود نشده و محدود شده با اتم هیدروژن و در بین نانوروبان های گرافنی زیگزاگ نانوروبان 4-ZGNR-H را برای بررسی تاثیر آرایش بر روی

خواص الکترونی و مغناطیسی آنها انتخاب کردیم.

در ساختار 7-AGNR-H با آلایش ساختار با یک اتم بورون و یا یک اتم نیتروژن فلز حاصل می شود و با آلایش ساختار با دو اتم بورون و یا دو اتم نیتروژن نیمرسانا حاصل می شود که در هر چهار وضعیت ساختار هیچ خاصیت مغناطیسی ندارد. ساختار 7-AGNR در حالت خالص نیمرسانای غیر مغناطیسی است وقتی یک اتم بورون در لبه این ساختار و یا یک اتم بورون و یا یک اتم نیتروژن در میانه این ساختار جای یک اتم کربن قرار می دهیم فلز مغناطیسی بدست می آید ولی با قرار دادن یک اتم نیتروژن در لبه این ساختار یک نیمرسانای مغناطیسی حاصل می شود. در ساختار 7-AGNR-H با طول دو سلول واحد با آلایش ساختار با عناصر واسطه ساختار خاصیت مغناطیسی بدست می آورد و بسته به نوع و مکان آلایش، فلز مغناطیسی یا نیمرسانای مغناطیسی حاصل می شود. در ساختار 4-ZGNR-H با آلایش ساختار با عناصر واسطه، وقتی یک اتم ناخالصی جایگزین یک اتم هیدروژن و یا یک اتم کربن شود، خاصیت مغناطیسی ساختار به مقدار قابل توجهی افزایش می یابد. وقتی یک اتم منگنز را جای یک اتم هیدروژن قرار دهیم ساختار دارای بیشترین خاصیت مغناطیسی می شود و با توجه به نوع اتم ناخالصی و اینکه در چه مکانی اتم ناخالصی را قرار دهیم فلز مغناطیسی و یا نیمرسانای مغناطیسی حاصل خواهد شد. با آلایش ساختار با دو اتم از عناصر واسطه به صورت همزمان به عنوان ناخالصی با توجه به اینکه این دو اتم ناخالصی نسبت بهم در وضعیت فرومغناطیسی و یا پاد فرومغناطیسی قرار بگیرند خاصیت مغناطیسی ساختار می تواند افزایش یابد و یا ساختار هیچ خاصیت مغناطیسی نداشته باشد. وقتی دو اتم منگنز را جای دو اتم هیدروژن در وضعیت فرومغناطیسی نسبت بهم قرار می دهیم ساختار دارای بیشترین گشتاور مغناطیسی خواهد شد. همچنین با توجه به نوع آلایش و اینکه در چه مکان هایی اتم های ناخالصی را قرار می دهیم ساختار می تواند فلز و یا نیمرسانا باشد.

فصل پنجم

بررسی خواص تراپردی

نانو روبان های گرافنی

۵-۱- مقدمه

در این فصل می خواهیم به بررسی خواص تراپردی در نانوروبان های گرافنی زیگزاگ و آرمچیر بپردازیم. نانوروبان های مورد بررسی در این فصل، در صفحه xy قرار دارند و در جهت محور z رشد داده می شوند (جهت تراپرد). هر ساختار از سه قسمت تشکیل شده است: الف) الکتروود چپ، ب) ناحیه پراکندگی و ج) الکتروود راست. در ساختار های زیگزاگ، ناحیه پراکندگی شامل چهار سلول واحد اولیه از 4-ZGNR-H می باشد که اتم های کربن موجود در لبه نانوروبان با اتم هیدروژن محدود شده اند. در ساختار های آرمچیر، ناحیه پراکندگی شامل پنج و شش سلول واحد اولیه از 7-AGNR می باشد و در دو حالت مختلف، وقتی اتم های کربن در لبه نانوروبان محدود نشده اند و زمانی که اتم های کربن موجود در لبه نانوروبان با اتم هیدروژن محدود شده اند، مورد بررسی قرار گرفته اند.

۵-۲- اثر اسپین فیلترینگ و پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی^۱ (NDR)

گرافن می تواند برای ترانزیستورهای اثر میدان خیلی سریع در رژیم تراهرتز و یا سنسورهای مغناطیسی با استفاده از اثر مقاومت مغناطیسی قطعه هایی را فراهم آورد. در ابزارهای اسپین-فیلتر بازده اسپین-فیلتر^۲ توسط قطبش جریان اسپینی مشخص می شود که با استفاده از رابطه زیر بدست می آید:

$$SFE = \left| \frac{I_{up} - I_{down}}{I_{up} + I_{down}} \right| \times 100 \quad (1-5)$$

که در این رابطه I_{up} جریان اسپین بالا و I_{down} جریان اسپین پایین می باشد [۵۰].

در الکترونیک، مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR) یک ویژگی مربوط به بعضی از مدارات و دستگاه های الکترونیکی است که در آن افزایش ولتاژ عبوری از پایانه های دستگاه منجر به کاهش جریان الکتریکی عبوری از آن می شود. این ویژگی در تضاد با مقاومت های متداول است که در آنها

^۱ -Negative differential resistance

^۲ -Spin-filter efficiency

طبق قانون اهم با افزایش ولتاژ عبوری از دستگاه جریان افزایش می یابد [۵۱]. بهترین توجیه برای منشا NDR که یافت شد چنین بیان می نمود که با اعمال ولتاژهای بالا، جفت شدگی مولکول به الکترودها غیرمقارن می شود که این به دلیل عدم تقارن بین سطوح انرژی بالاترین اوربیتال های اشغالی مولکولی (HOMO) و پایین ترین اوربیتال مولکولی خالی (LUMO) است. به عبارتی اعمال ولتاژ بالا باعث ظهور یک پتانسیل غیر مقارن در الکتروود و مولکول می شود و در نتیجه موجب جایگزینی HOMO و LUMO در قسمتهای مختلف سیستم می شود که می تواند باعث کاهش همپوشانی اوربیتالی و نهایتاً کاهش ضریب عبور شود [۵۲]. در ساختارهایی که به جای تراز شاهد نوارهای انرژی هستیم همین توضیح برای پدیده NDR قابل استفاده است با این تفاوت که در آنها بجای HOMO و LUMO به ترتیب نوار ظرفیت و نوار رسانش را خواهیم داشت.

۳-۵- ساختارهای مورد بررسی

در ادامه ساختارهایی را که در این پژوهش خواص تراپردی آنها مورد بررسی قرار گرفته است را بیان کرده ایم:

- ۱- ابرسلول 7-AGNR-H و طول پنج سلول واحد.
- ۲- ابرسلول 7-AGNR-H و طول پنج سلول واحد و اتم کروم جایگزین شده با یک اتم کربن در میانه ناحیه پراکندگی.
- ۳- ابرسلول 7-AGNR-H و طول پنج سلول واحد و اتم کروم جایگزین شده با یک اتم کربن در لبه ناحیه پراکندگی.
- ۴- ابرسلول 7-AGNR-H با لبه محدود شده با اتم هیدروژن و طول شش سلول واحد
- ۵- ابرسلول 7-AGNR-H و طول شش سلول واحد، با اتم بورون جایگزین شده در لبه الکتروود و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (I).
- ۶- ابرسلول 7-AGNR-H و طول شش سلول واحد، با اتم بورون جایگزین شده در لبه الکتروود

و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (II).

۷- ابرسلول 7-AGNR-H و طول شش سلول واحد، با اتم نیتروژن جایگزین شده در لبه

الکتروود و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (I).

۸- ابرسلول 7-AGNR-H و طول شش سلول واحد، با اتم نیتروژن جایگزین شده در لبه

الکتروود و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (II).

۹- ابرسلول 4-ZGNR-H و طول هشت سلول واحد.

۱۰- ابرسلول 4-ZGNR-H و طول هشت سلول واحد و دو اتم آهن جایگزین شده در

مکان های A و B که نسبت بهم در وضعیت فرومغناطیسی قرار دارند در ناحیه پراکندگی.

۱۱- ابرسلول 4-ZGNR-H و طول هشت سلول واحد و دو اتم آهن جایگزین شده در

مکان های A و B که نسبت بهم در وضعیت پاد فرومغناطیسی قرار دارند در ناحیه

پراکندگی.

۱۲- ابرسلول 4-ZGNR-H و طول هشت سلول واحد و دو اتم منگنز جایگزین شده در

مکان های A و B که نسبت بهم در وضعیت پاد فرومغناطیسی قرار دارند در ناحیه

پراکندگی.

۱۳- ابرسلول 4-ZGNR-H و طول هشت سلول واحد و دو اتم آهن جایگزین شده در

مکان های C و D که نسبت بهم در وضعیت فرومغناطیسی قرار دارند در ناحیه پراکندگی.

۱۴- ابرسلول 4-ZGNR-H و طول هشت سلول واحد و دو اتم منگنز جایگزین شده در

مکان های C و D که نسبت بهم در وضعیت پاد فرومغناطیسی قرار دارند در ناحیه

پراکندگی.

ساختارهایی را که در بالا به آنها اشاره کردیم به ترتیب ساختار یک تا ساختار چهارده می

نامیم. قبل از بررسی خواص تراپردی در ساختارهای فوق، پارامترهای ورودی که در این بررسی ها

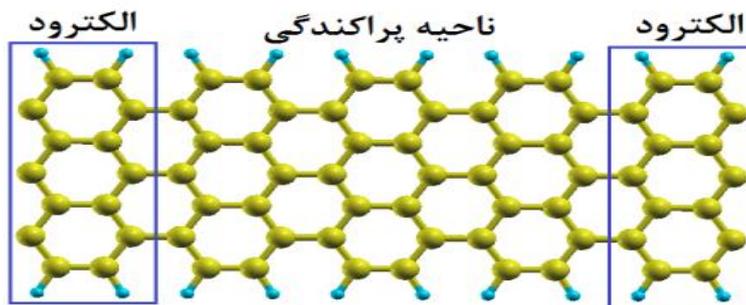
مورد استفاده قرار گرفته اند را بیان می کنیم:

جدول ۱-۵: پارامتر های ورودی برای محاسبه خواص تراپردی نانوروبان های گرافنی زیگزاگ و آرمچیر

ساختار	تقریب کد	بردار شبکه بندی k	انرژی قطع (Ry)	مجموعه پایه	همگرایی نیرو ($\frac{eV}{\text{\AA}}$)
7-AGNR-H	شبه پتانسیل (ترولیر-مارتینز) ^۱	$1 \times 1 \times 40$	۳۰۰	SZP	۰/۰۰۵
4-ZGNR-H	شبه پتانسیل (ترولیر-مارتینز)	$1 \times 1 \times 80$	۳۰۰	SZP	۰/۰۰۵

۵-۳-۱- ابرسلول 7-AGNR-H با طول پنج سلول واحد (ساختار یک)

در این ساختار در ناحیه پراکندگی یک نیمرسانای غیرمغناطیسی قرار دادیم که به دو الکتروند با خاصیت نیمرسانای غیر مغناطیسی متصل شده است. این ساختار در شکل ۱-۵ نشان داده شده است همچنین در این شکل ناحیه پراکندگی و الکترونها مشخص شده اند:

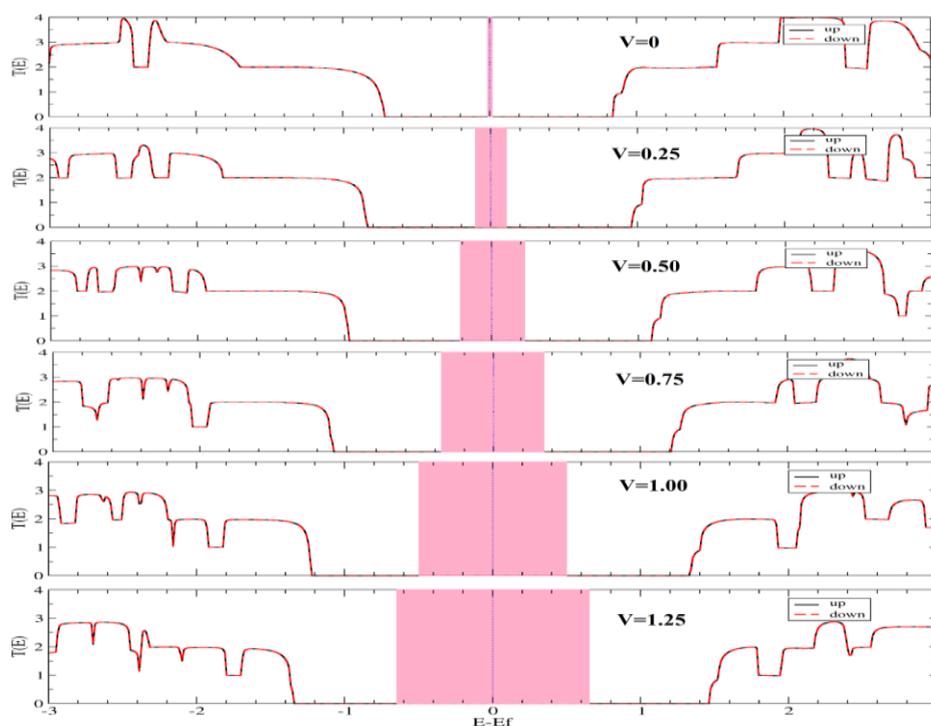


شکل ۱-۵: شکل ساختار یک، اتم های هیدروژن با رنگ آبی و اتم های کربن با رنگ زرد نشان داده شده اند.

نمودارهای ضریب عبور برای ساختار یک در شکل ۲-۵ نشان داده شده است. همانطور که در شکل می بینیم در پنجره ولتاژ (پنجره ولتاژ، ناحیه ای از انرژی در طیف عبور است که در محاسبه جریان شرکت می کند و از $-\frac{V}{2}$ تا $+\frac{V}{2}$ می باشد که V مقدار ولتاژ اعمالی است). ضریب عبور برای هر

¹ -Troullier-Martins

دو اسپین بالا و پایین در تمام ولتاژها باهم برابر است و صفر می باشد، برابر بودن ضریب عبور برای اسپین های بالا و پایین به دلیل غیر مغناطیسی بودن سه قسمت ساختار (الکترودها و ناحیه پراکندگی) می باشد، همچنین می بینیم با افزایش ولتاژ گاف عبور در این ساختار افزایش می یابد. در جدول ۲-۵ مقادیر جریان ولتاژ برای ساختار یک آورده شده است. طبق مقادیر بدست آمده برای جریان می بینیم، جریان اسپین بالا و پایین در ولتاژهای مختلف باهم برابر است اما مقادیر بدست آمده بسیار ناچیز می باشند، دلیل این می تواند، نیمرسانا بودن الکترودها باشد، زیرا این الکترودهای نیمرسانا نمی توانند جریان قابل ملاحظه ای را به ناحیه پراکندگی تزریق کنند.



شکل ۲-۵: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار یک

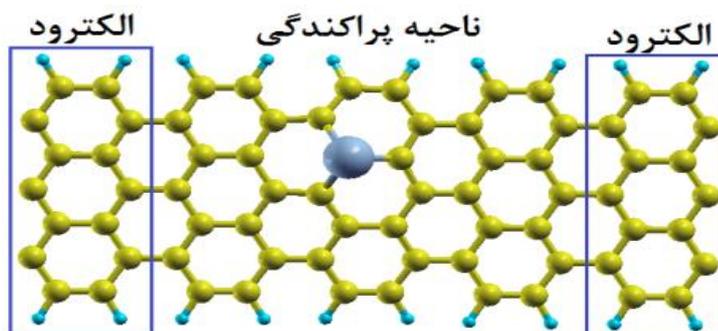
جدول ۵-۲: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پايين در ساختار يك

ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پايين (A)	۰	$۱/۳۱ \times ۱۰^{-۱۶}$	$۳/۷۳ \times ۱۰^{-۱۶}$	$۵/۳۲ \times ۱۰^{-۱۳}$	$۳/۸۲ \times ۱۰^{-۱۱}$	$۱/۱۱ \times ۱۰^{-۱۰}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$۱/۳۱ \times ۱۰^{-۱۶}$	$۳/۷۳ \times ۱۰^{-۱۶}$	$۵/۳۲ \times ۱۰^{-۱۳}$	$۳/۸۲ \times ۱۰^{-۱۱}$	$۱/۱۱ \times ۱۰^{-۱۰}$

۵-۳-۲- ابرسلول 7-AGNR-H با طول پنج سلول واحد و اتم کروم جایگزین شده در میانه ناحیه پراکندگی (ساختار دو)

در این ساختار در ناحیه پراکندگی نیمرسانای مغناطیسی داریم که به دو الکتروود با خاصیت

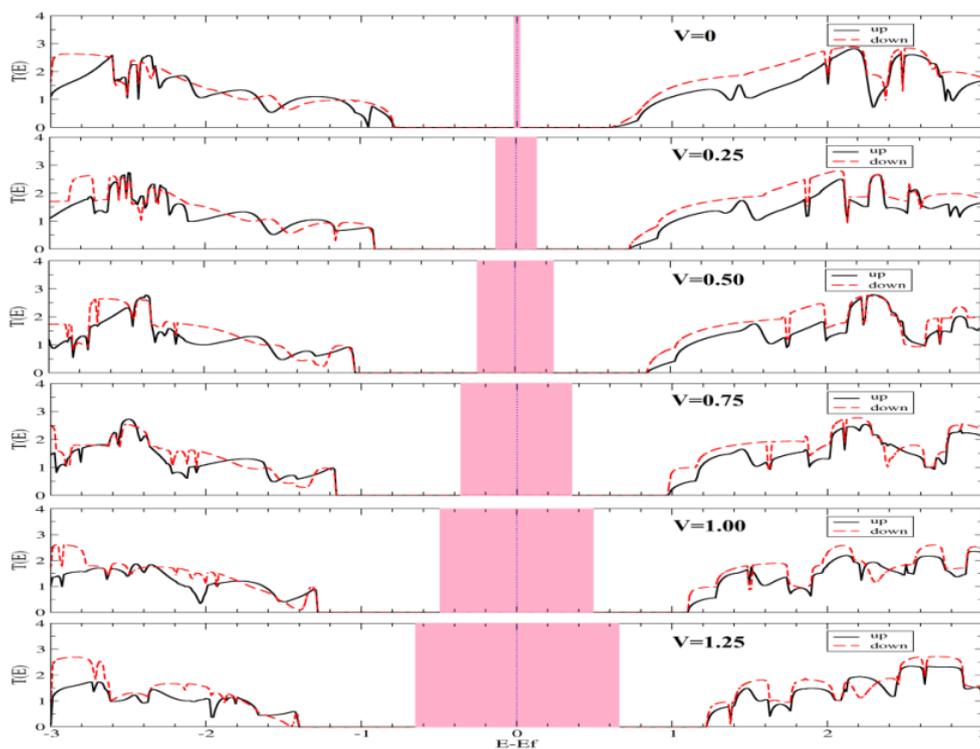
نیمرسانای غیرمغناطیسی متصل شده است، که در شکل ۵-۳ آن را نشان داده ایم:



شکل ۵-۳: ابرسلول 7-AGNR-H با طول پنج سلول واحد و اتم Cr جایگزین شده در میانه ناحیه پراکندگی (ساختار دو). اتم کروم با رنگ خاکستری مشخص شده است.

نمودارهای ضریب عبور در ولتاژهای مختلف برای ساختار دو، در شکل ۵-۴ رسم شده است. همانطور که می بینیم در پنجره ولتاژ برای ولتاژهای مختلف، هیچ قله و یا دره ی وجود ندارد و ضریب عبور برای هر دو اسپین بالا و پايين صفر است که این بیان کننده این مطلب است که جریان بدست آمده از این ساختار بسیار کم خواهد بود، همچنین در این ساختار، با وجود الکترودهای غیر مغناطیسی مشابه با ساختار یک، اما برخلاف ساختار یک، نمودارهای ضریب عبور برای دو اسپین بالا و پايين باهم متفاوت است و برهم منطبق نمی باشند که این می تواند به دلیل خاصیت مغناطیسی

ناحیه پراکندگی باشد. در جدول ۳-۵ مقادیر جریان بدست آمده برای ساختار دو آورده شده است. با توجه به مقادیر جدول ۳-۵ و همچنین شکل ۵-۷ می بینیم جریان اسپین بالا با افزایش ولتاژ، افزایش می یابد ولی برای اسپین پایین جریان تا ولتاژ ۱V با افزایش ولتاژ، افزایش می یابد اما در ولتاژ ۱/۲۵V با افزایش ولتاژ جریان کاهش می یابد، یعنی در این ولتاژ پدیده NDR رخ می دهد، درباره علت رخ دادن پدیده NDR همانطور که در بخش ۵-۲ آورده شده است می توان گفت، اعمال ولتاژ باعث جابجایی ترازهای انرژی موجود در ناحیه پراکندگی و الکترودهای راست و چپ می شود و این جابجایی باعث عدم تطابق ترازهای انرژی در این سه قسمت می شود این عدم تطابق باعث می شود الکترون، تراز را برای فرود در ناحیه پراکندگی و یا در الکتروده سمت راست نداشته باشد لذا جریان کاهش می یابد و پدیده NDR رخ می دهد.



شکل ۵-۴: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار دو

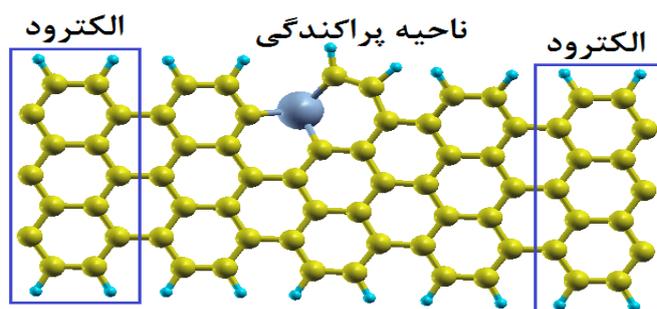
جدول ۳-۵: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار دو

ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پایین (A)	۰	$1/62 \times 10^{-16}$	$6/5 \times 10^{-16}$	$2/5 \times 10^{-12}$	$3/34 \times 10^{-10}$	$2/05 \times 10^{-10}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$2/18 \times 10^{-16}$	$1/99 \times 10^{-15}$	$3/12 \times 10^{-11}$	$3/27 \times 10^{-10}$	$3/93 \times 10^{-10}$
میزان فیلترینگ	۰	% ۱۴/۷۳	% ۵۰/۷۵	% ۸۵/۱۶	% ۱/۰۵	% ۳۱/۴۳

۳-۳-۵- ابرسلول 7-AGNR-H با طول پنج سلول واحد و اتم کروم جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (ساختار سه)

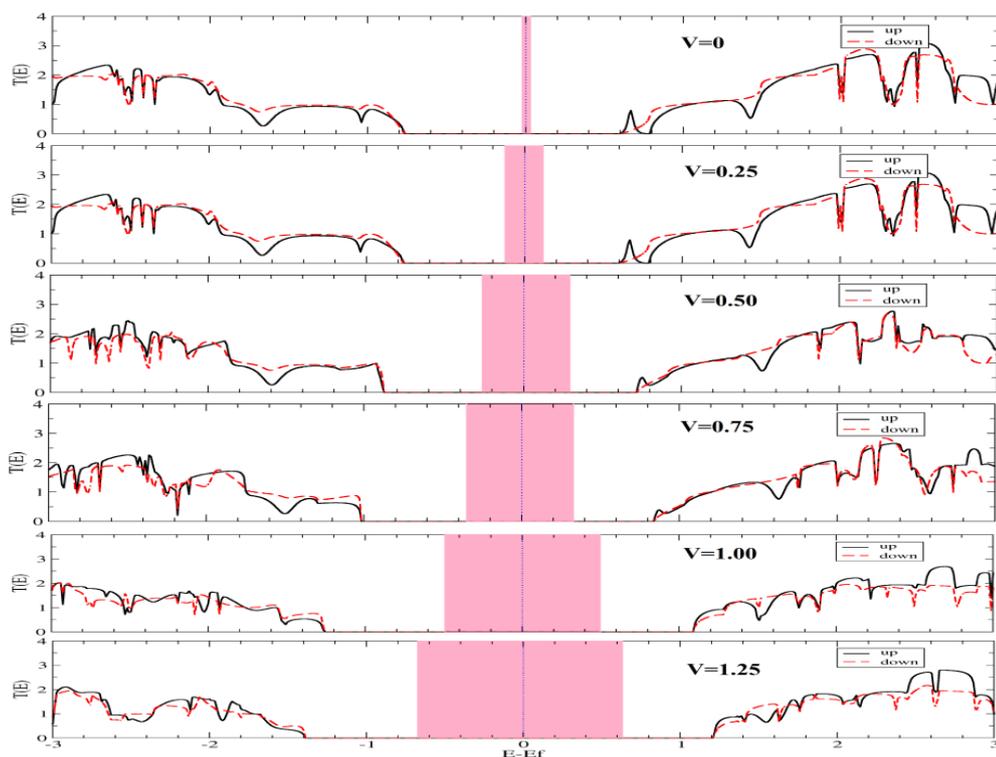
در این ساختار در ناحیه پراکندگی یک فلز مغناطیسی داریم که به دو الکتروود با خاصیت

نیمرسانای غیرمغناطیسی متصل شده است، شکل ۵-۵ این ساختار را نشان می دهد:



شکل ۵-۵: ابرسلول 7-AGNR-H با اتم کروم جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (ساختار سه)

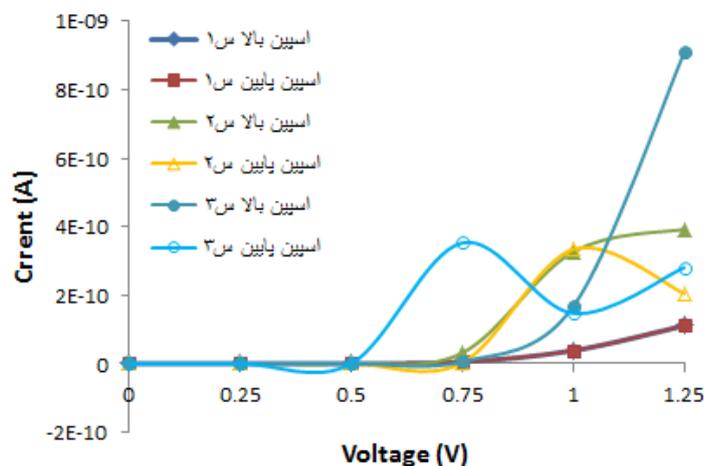
نمودارهای ضریب عبور در ولتاژهای مختلف برای ساختار سه در شکل ۵-۶ آورده شده است. همانطور که در شکل دیده می شود، در این ساختار نیز مانند دو ساختار دیگر ضریب عبور برای هر دو اسپین بالا و پایین در پنجره ولتاژ صفر است، یعنی در این ساختار نیز جریان مطلوبی نخواهیم داشت. در جدول ۴-۵ مقادیر جریان بدست آمده برای ساختار سه آورده شده است، طبق مقادیر بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین با افزایش ولتاژ، جریان نیز افزایش می یابد اما برای اسپین پایین در ولتاژ ۱ V جریان کاهش می یابد و شاهد پدیده NDR هستیم.



شکل ۵-۶: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار سه

جدول ۴-۵: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار سه

ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پایین (A)	۰	$۸/۸ \times 10^{-۱۶}$	$۲/۵۳ \times 10^{-۱۳}$	$۳/۵۳ \times 10^{-۱۰}$	$۱/۴۷ \times 10^{-۱۰}$	$۲/۸۱ \times 10^{-۱۰}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$۲/۱۵ \times 10^{-۱۵}$	$۲/۷۹ \times 10^{-۱۳}$	$۵/۷۷ \times 10^{-۱۲}$	$۱/۶۷ \times 10^{-۱۰}$	$۹/۰۹ \times 10^{-۱۰}$
میزان فیلترینگ	۰	% ۴۱/۹۱	% ۴/۸۸	% ۹۶/۷۸	% ۸/۰۹	% ۵۲/۷۷



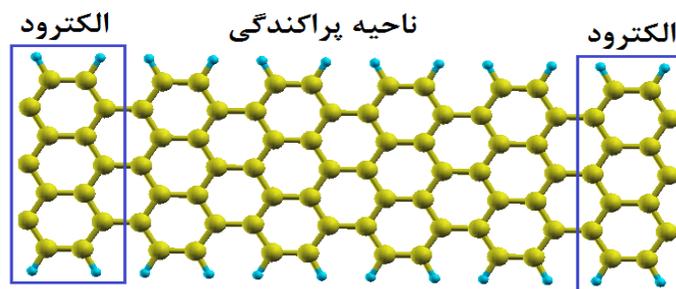
شکل ۵-۷: نمودارهای جریان-ولتاژ برای اسپین های بالا و پایین در ساختارهای یک، دو و سه

با توجه به نمودارهای ضریب عبور که در شکل های ۵-۲، ۵-۴ و ۵-۶ آورده شده است می بینیم، در ساختار یک نمودارهای ضریب عبور برای اسپین بالا و پایین در تمام ولتاژها کاملاً برهم منطبق هستند و هیچ قطبشی در طیف عبور ساختار یک دیده نمی شود که این می تواند به دلیل غیر مغناطیسی بودن سه قسمت مختلف ساختار (یعنی ناحیه پراکندگی و دو الکتروود چپ و راست) باشد، در ساختارهای دو و سه الکتروودها مشابه با ساختار یک می باشند ولی با قرار دادن اتم Cr در ناحیه پراکندگی این ناحیه دارای خاصیت مغناطیسی می شود که این باعث ایجاد قطبش در نمودارهای ضریب عبور برای اسپین های بالا و پایین در ساختارهای دو و سه می شود و طیف عبور در این دو ساختار قطبیده است. طبق نمودارهای $I-V$ در شکل ۵-۷ و مقادیر بدست آمده برای جریان در سه ساختار فوق، بیشترین جریان بدست آمده، برای اسپین بالا در ساختار سه و در ولتاژ $1/25V$ و به میزان $9/09 \times 10^{-10}$ A می باشد. با توجه به میزان فیلترینگ محاسبه شده در جدول های ۵-۳ و ۵-۴ به ترتیب برای ساختار های دو و سه، بیشترین میزان فیلترینگ در ساختار سه و در ولتاژ $0/75V$ به میزان $96/78\%$ روی می دهد، با توجه به میزان بالای فیلترینگ در این ساختار می توان

از آن برای سوئیچ جریان اسپینی و یا در دستگاه های فیلتر کننده اسپینی استفاده کرد.

۵-۳-۴- ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد (ساختار چهار)

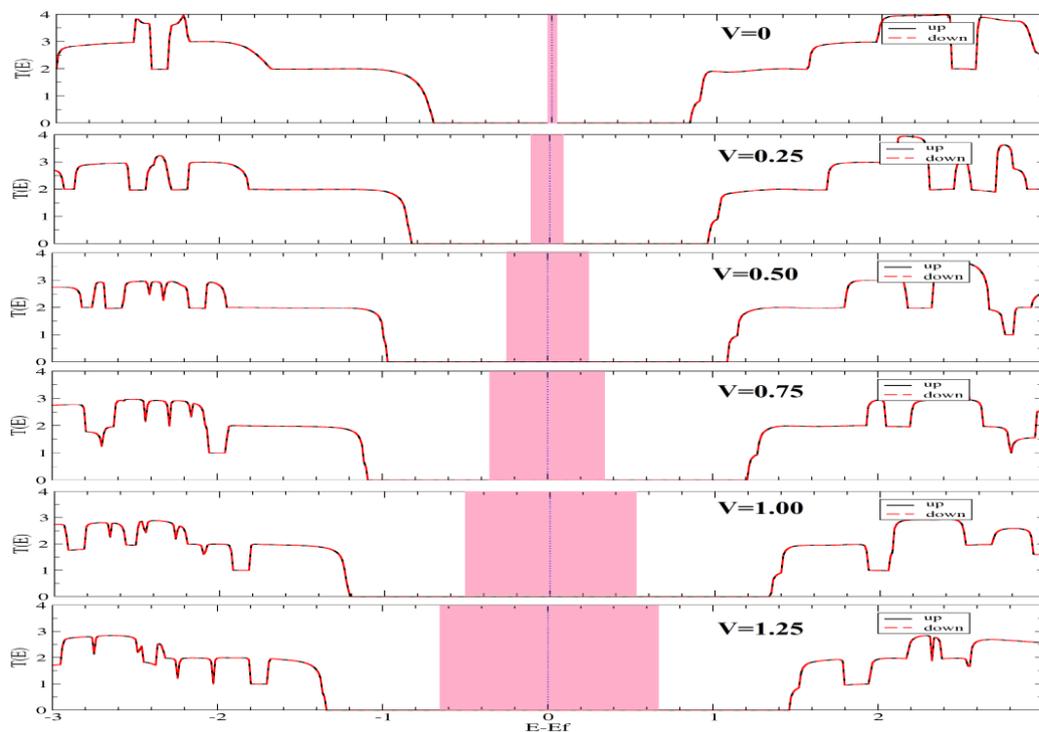
در این ساختار در ناحیه پراکندگی یک نیمرسانای غیرمغناطیسی داریم که به دو الکتروود که آنها نیز نیمرسانای غیرمغناطیسی می باشند متصل شده است، در شکل ۵-۸ این ساختار نشان داده شده است.



شکل ۵-۸: ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد (ساختار چهار)

نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار چهار در شکل ۵-۹ آورده شده است. همانطور که در این شکل می بینیم، ضریب عبور برای هر دو اسپین بالا و پایین در تمام ولتاژها کاملاً برهم منطبق است، که این نشان می دهد مقادیر جریان اسپین های بالا و پایین باهم متفاوت نخواهند بود، همچنین با توجه به این شکل می بینیم با افزایش ولتاژ گاف عبور افزایش می یابد. مقادیر بدست آمده برای جریان های اسپین بالا و پایین در ولتاژهای مختلف در ساختار چهار در جدول ۵-۵ آورده شده است. طبق مقادیر بدست آمده با افزایش ولتاژ، جریان های اسپین های بالا و پایین نیز افزایش می یابند، اما مقدار این جریان ها بسیار ناچیز است. در چهار ساختار فوق، در نمودارهای ضریب عبور با وجود افزایش گاف ضریب عبور با افزایش ولتاژ انتظار داریم جریان با افزایش ولتاژ کاهش یابد اما این اتفاق رخ نداده است و جریان افزایش می یابد علت این امر، افزایش بازه انتگرالگیری یا همان گسترش پنجره ولتاژ با افزایش ولتاژ می باشد که باعث افزایش جریان با افزایش

ولتاژ می شود.



شکل ۵-۹: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار چهار

جدول ۵-۵: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین بالا و پایین در ولتاژهای مختلف در ساختار چهار

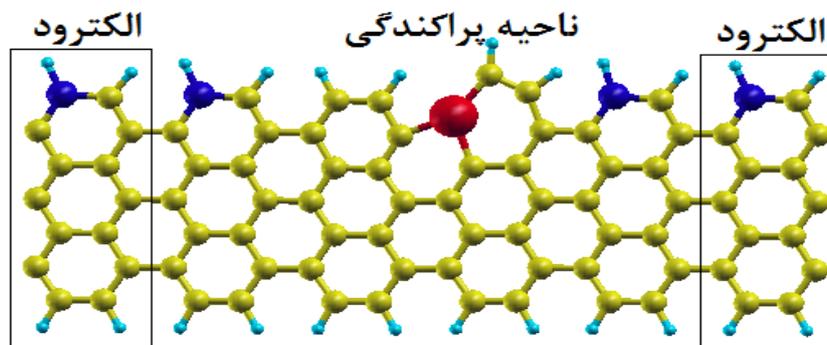
ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پایین (A)	۰	$3/74 \times 10^{-17}$	$1/11 \times 10^{-16}$	$2/14 \times 10^{-13}$	$1/64 \times 10^{-11}$	$4/84 \times 10^{-11}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$3/74 \times 10^{-17}$	$1/11 \times 10^{-16}$	$2/14 \times 10^{-13}$	$1/64 \times 10^{-11}$	$4/84 \times 10^{-11}$

ساختارهای یک و چهار تقریباً مشابه هستند تنها تفاوت آنها در طول ناحیه پراکندگی می باشد، طول ناحیه پراکندگی در ساختار یک، سه سلول واحد اولیه از 7-AGNR-H و در ساختار چهار، چهار سلول واحد اولیه از 7-AGNR-H می باشد با مقایسه مقادیر جریان در این دو ساختار که در جداول ۲-۵ و ۵-۵ آورده شده است می بینیم جریان در ساختار یک بیشتر از ساختار چهار است،

علت آن این است که با افزایش طول ناحیه پراکندگی (که دارای خاصیت نیمرسانایی می باشد) امکان عبور الکترون از ناحیه پراکندگی و رسیدن به الکتروود دیگر کاهش می یابد که این امر باعث کاهش مقدار جریان برای اسپین های بالا و پایین در ساختار چهار نسبت به ساختار یک می شود. مقادیر جریان بدست آمده در ساختارهای یک تا چهار بسیار ضعیف هستند، این می تواند به دلیل الکترودهای نیمرسانای این ساختارها باشد که نمی توانند جریان مطلوبی را به ناحیه پراکندگی هدایت کنند بنابراین برای رفع این مشکل الکترودهایی را از جنس فلز انتخاب می کنیم. در ادامه به بررسی ساختارهایی با الکترودهای فلزی می پردازیم.

۵-۳-۵- ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد واتم بورون جایگزین شده در لبه الکتروود و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (I) (ساختار پنج)

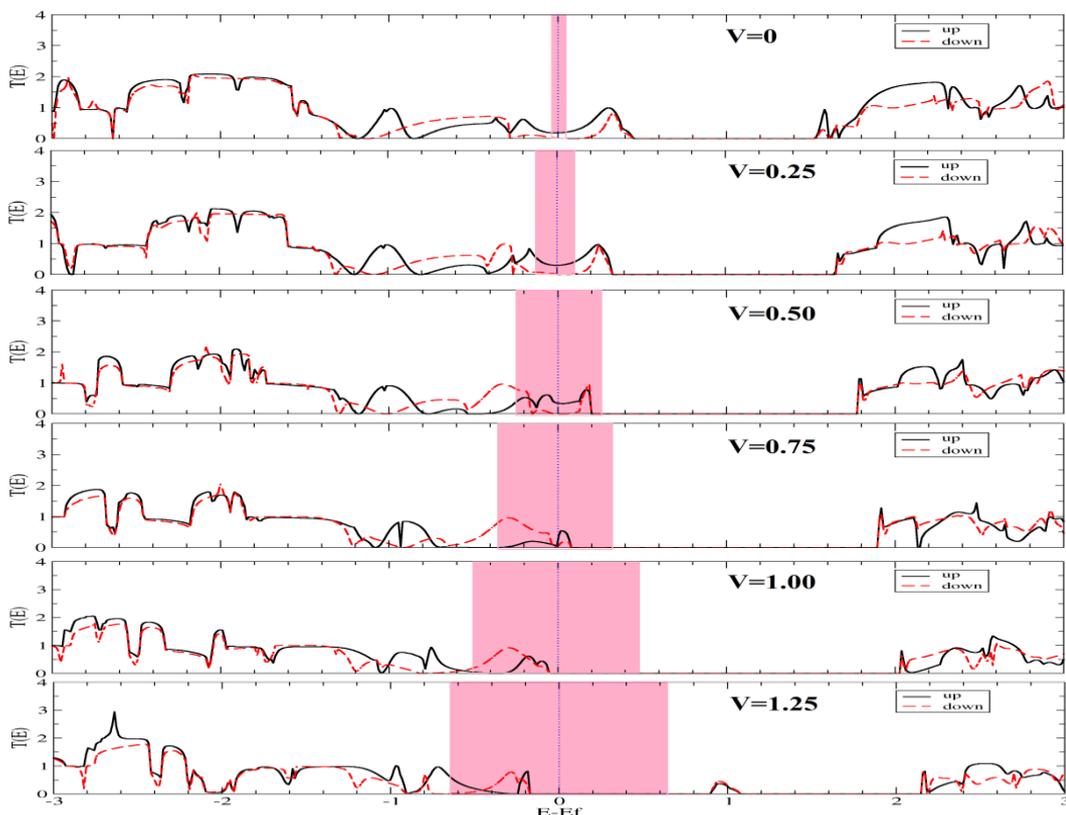
در این ساختار در ناحیه پراکندگی یک فلز مغناطیسی داریم که به دو الکتروود مشابه با خاصیت فلز غیرمغناطیسی متصل شده است، این ساختار در شکل ۵-۱۰ نشان داده شده است:



شکل ۵-۱۰: ساختار پنج. اتم های بورون با رنگ آبی تیره و اتم آهن با رنگ قرمز نشان داده شده اند.

در این ساختار اتم آهن در لبه نانوروبان جای اتم کربنی قرار گرفته است که با سه اتم کربن دیگر پیوند دارد، همچنین در الکتروودها اتم بورون جای اتم کربنی قرار گرفته است که با دو اتم کربن دیگر و یک اتم هیدروژن پیوند دارد. نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای

ساختار پنج در شکل ۵-۱۱ و مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در این ساختار در جدول ۵-۶ آورده شده است. بر طبق نمودارهای ضریب عبور و مقادیر بدست آمده برای جریان در این ساختار، با افزایش ولتاژ تا $0.50V$ جریان اسپین بالا نیز افزایش می یابد و در ولتاژ $0.50V$ جریان اسپین بالا به بیشترین مقدار خود می رسد این رفتار را می توان با نمودار ضریب عبور در این ولتاژ توجیه کرد، با توجه به شکل ۵-۱۱ در این ولتاژ سه بیشنه برای ضریب عبور اسپین بالا در پنجره ولتاژ وجود دارد که شدت بیشینه ها در این ولتاژ نسبت به بقیه ولتاژها بیشتر است این بیانگر آن است که در این ولتاژ بیشترین مقدار جریان برای اسپین بالا را خواهیم داشت؛ سپس با افزایش ولتاژ به $0.75V$ جریان اسپین بالا کاهش می یابد و پدیده NDR رخ می دهد با توجه به نمودارهای ضریب عبور برای ولتاژ $0.75V$ می بینیم شدت بیشینه نمودار ضریب عبور برای اسپین بالا کاهش یافته است و به کمترین مقدار خود نسبت به بقیه ولتاژها می رسد، لذا انتظار می رود در این ولتاژ کمترین مقدار را برای جریان اسپین بالا داشته باشیم که طبق مقادیر بدست آمده برای این جریان در این ولتاژ کمترین مقدار جریان اسپین بالا را داریم. برای جریان اسپین پایین با توجه به نتایج بدست آمده، این جریان تا ولتاژ $0.75V$ افزایش می یابد و در این ولتاژ جریان اسپین پایین به بیشترین مقدار خود می رسد، با توجه به شکل ۵-۱۱ می بینیم که دو بیشنه برای ضریب عبور اسپین پایین در این ولتاژ وجود دارد که شدت آنها در این ولتاژ نسبت به بقیه ولتاژها بیشتر است این نشان می دهد در این ولتاژ بیشینه جریان برای اسپین پایین را خواهیم داشت. سپس با افزایش ولتاژ به $1V$ جریان اسپین تقریباً ثابت می ماند و در ولتاژ $1.25V$ این جریان کاهش می یابد و پدیده NDR رخ می دهد، نمودارهای ضریب عبور برای این ولتاژ نیز این نتایج را اثبات می کنند. بیشترین میزان فیلترینگ در ساختار پنج در ولتاژ $0.25V$ روی می دهد، میزان بالای فیلترینگ در این ساختار نشان می دهد این ساختار برای استفاده در دستگاه های اسپین فیلتر مناسب می باشد.



شکل ۵-۱۱: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار پنج

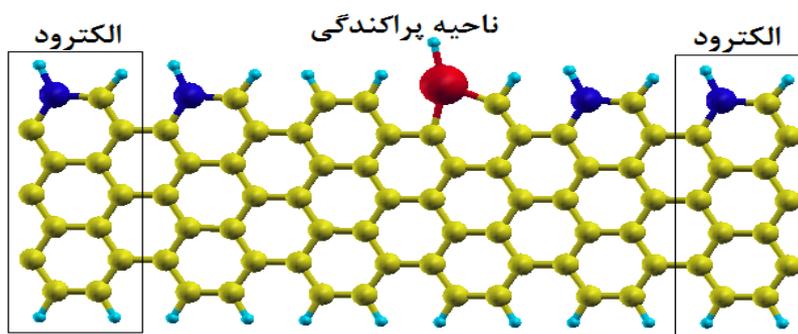
جدول ۵-۶: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار پنج

ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پایین (A)	۰	$۲/۵۳ \times ۱۰^{-۷}$	$۴/۶۳ \times ۱۰^{-۶}$	$۹/۵۱ \times ۱۰^{-۶}$	$۹/۳۱ \times ۱۰^{-۶}$	$۵/۲۵ \times ۱۰^{-۶}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$۳/۲۸ \times ۱۰^{-۶}$	$۸/۰۷ \times ۱۰^{-۶}$	$۲/۶۹ \times ۱۰^{-۶}$	$۳/۵۹ \times ۱۰^{-۶}$	$۳/۶۵ \times ۱۰^{-۶}$
میزان فیلترینگ	۰	% ۸۵/۸۳	% ۲۷/۰۸	% ۵۵/۹۰	% ۴۴/۳۴	% ۱۷/۹۷

۵-۳-۶- ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد واتم بورون جایگزین شده در لبه الکترو و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (II) (ساختار شش)

در این ساختار در ناحیه پراکندگی یک نیمرسانای مغناطیسی داریم که به دو الکترو با

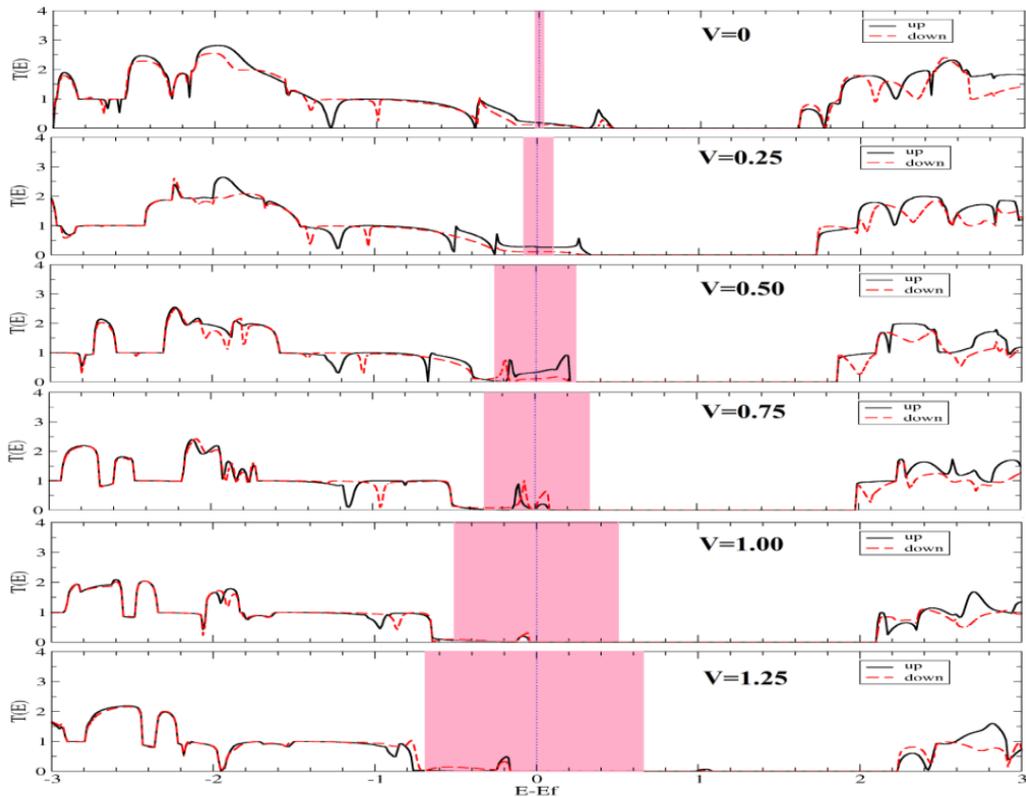
خاصیت فلز غیرمغناطیسی متصل شده است، شکل ۵-۱۲ این ساختار را نشان می دهد:



شکل ۵-۱۲: ساختار شش. ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد واتم بورون جایگزین شده در لبه الکتروُد و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (II)

در این ساختار اتم آهن در لبه نانوروبان جای اتم کربنی قرار گرفته است که با دو اتم کربن دیگر و یک اتم هیدروژن پیوند دارد همچنین الکترودها در این ساختار مشابه الکترودها در ساختار پنج هستند. نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار شش در شکل ۵-۱۳ و مقادیر جریان بدست آمده برای این ساختار در جدول ۵-۷ آورده شده است. طبق نمودارهای ضریب عبور برای اسپین بالا انتظار می رود با افزایش ولتاژ تا $0.50V$ جریان نیز افزایش یابد و سپس جریان در $0.50V$ برای اسپین بالا به بیشترین مقدار خود برسد زیرا شدت بیشینه نمودار در پنجره ولتاژ، در این ولتاژ بیشترین مقدار خود را دارد، سپس با افزایش ولتاژ شدت بیشینه ها در نمودارهای ضریب عبور در پنجره ولتاژ نیز کاهش می یابند بنابراین انتظار می رود جریان نیز کاهش یابد و در ولتاژ $1V$ شدت بیشینه ها به کمترین مقدار خود می رسد که این نشان می دهد جریان اسپین بالا در این ولتاژ باید به کمترین مقدار خود برسد و سپس در ولتاژ $1.25V$ دوباره شدت بیشینه ها افزایش می یابد لذا انتظار می رود جریان نیز زیاد شود، که مقادیر بدست آمده برای جریان اسپین بالا در جدول ۵-۷ این مطالب را تایید می کنند، طبق مقادیر ثبت شده در این جدول در ولتاژهای $0.75V$ و $1V$ برای اسپین بالا پدیده NDR روی می دهد. طبق مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین پایین، با افزایش ولتاژ تا $0.75V$ جریان نیز افزایش می یابد و سپس در ولتاژ $1V$ جریان کاهش یافته و پدیده

NDR رخ می دهد و سپس با افزایش ولتاژ دوباره جریان افزایش می یابد، نمودارهای ضریب عبور بدست آمده برای اسپین پایین در این ساختار نیز این نتایج را تایید می کنند.



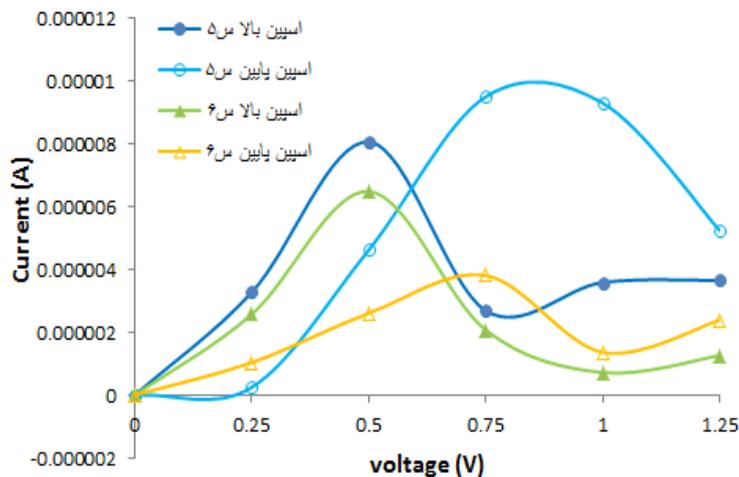
شکل ۵-۱۳: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار شش

جدول ۵-۷: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار شش

ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پایین (A)	۰	$۱/۰۴ \times ۱۰^{-۶}$	$۲/۶۱ \times ۱۰^{-۶}$	$۳/۸۱ \times ۱۰^{-۶}$	$۱/۳۶ \times ۱۰^{-۶}$	$۲/۳۹ \times ۱۰^{-۶}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$۲/۵۸ \times ۱۰^{-۶}$	$۶/۴۹ \times ۱۰^{-۶}$	$۲/۰۷ \times ۱۰^{-۶}$	$۷/۱۷ \times ۱۰^{-۷}$	$۱/۲۶ \times ۱۰^{-۶}$
میزان فیلترینگ	۰	% ۴۲/۵۴	% ۴۲/۶۳	% ۲۹/۵۹	% ۳۱/۰۵	% ۳۰/۹۵

در ساختارهای پنج و شش الکترودها مشابه هم و فلز غیر مغناطیسی هستند، تفاوت این دو

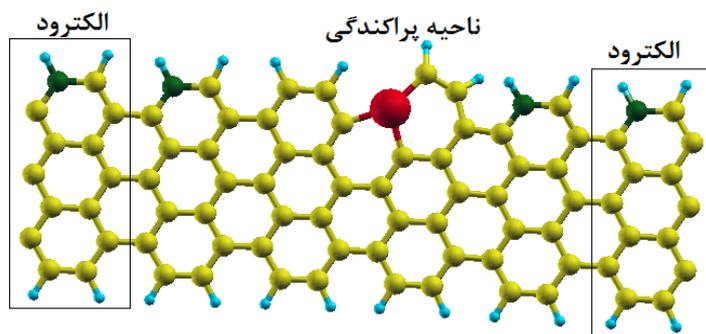
ساختار در ناحیه پراکندگی آنها می باشد در ساختار پنج، ناحیه پراکندگی یک فلز مغناطیسی و در ساختار شش، ناحیه پراکندگی یک نیمرسانای مغناطیسی است. مقادیر بدست آمده برای جریان های اسپین های بالا و پایین در دو ساختار پنج و شش در شکل ۵-۱۴ رسم شده است همانطور که در شکل می بینیم الف) بیشترین جریان در بین این دو ساختار مربوط به اسپین پایین در ساختار پنج است به عبارت دیگر وقتی ناحیه پراکندگی از جنس فلز باشد نسبت به ساختار مشابهی که در آن ناحیه پراکندگی، نیمرسانا است مقادیر جریان بدست آمده بیشتر است، ب) بیشترین جریان را برای هر دو اسپین، در ساختار پنج در ولتاژ $0.5V$ و در ساختار شش در $0.75V$ داریم و ج) برای هر دو اسپین در هر دو ساختار پدیده NDR رخ می دهد اما شدت NDR رخ داده در ساختار پنج بیشتر است لذا استفاده از آن در دستگاه های سوئیچینگ مناسب تر است.



شکل ۵-۱۴: نمودار های I-V برای اسپین های بالا و پایین در دو ساختار پنج و شش

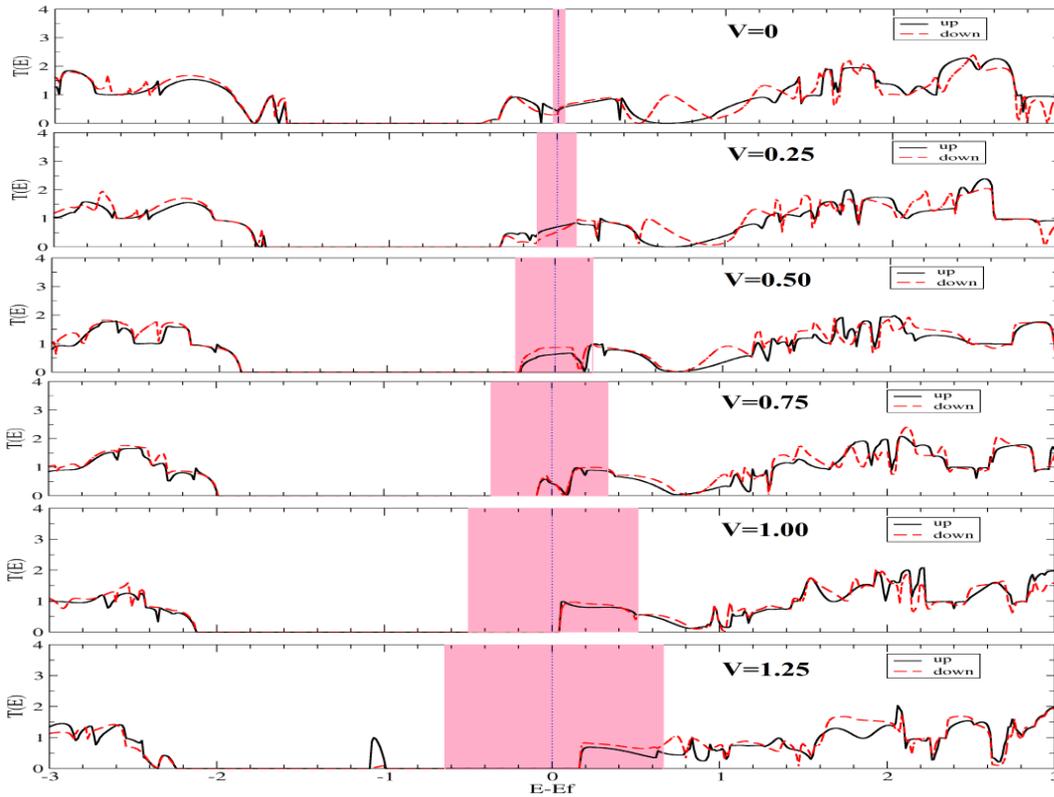
۵-۳-۷- ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد و نیتروژن جایگزین شده در لبه الکتروود و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (I) (ساختار هفت)

در این ساختار در ناحیه پراکندگی یک فلز مغناطیسی داریم که به دو الکتروود فلز غیرمغناطیسی متصل شده است. شکل ۵-۱۵ این ساختار را نشان می دهد:



شکل ۵-۱۵: ساختار هفت. اتم آهن با رنگ قرمز و اتم نیتروژن با رنگ سبز نشان داده شده اند.

این ساختار مشابه با ساختار پنج می باشد با این تفاوت که الکترودها بجای اتم بورون با اتم نیتروژن آرایش یافته اند. نمودارهای ضریب عبور در ولتاژهای مختلف برای این ساختار در شکل ۵-۱۶ و مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین به ازای ولتاژهای مختلف در این ساختار در جدول ۵-۸ آورده شده است. طبق مقادیر بدست آمده برای جریان اسپین بالا در جدول ۵-۸ با افزایش ولتاژ، جریان نیز افزایش می یابد ولی در ولتاژ 0.75 V جریان اسپین بالا کاهش پیدا می کند و NDR رخ می دهد سپس با افزایش ولتاژ جریان نیز زیاد می شود ولی در ولتاژ 1.25 V دوباره جریان کاهش می یابد و NDR روی می دهد، نمودارهای ضریب عبور این ساختار نیز این نتایج را تایید می کنند. طبق مقادیر بدست آمده برای جریان اسپین پایین در جدول ۵-۸ با افزایش ولتاژ، جریان اسپین پایین نیز افزایش می یابد ولی در ولتاژ 1.25 V این جریان کاهش پیدا می کند و NDR رخ می دهد. طبق نمودارهای ضریب عبور برای اسپین پایین نیز انتظار می رود با افزایش ولتاژ، جریان زیاد شود و در 1 V شدت بیشینه ها به بیشترین حد می رسد که این نشان می دهد در این ولتاژ باید بیشترین مقدار جریان اسپین پایین را داشته باشیم که طبق مقادیر بدست آمده برای جریان اسپین پایین این اتفاق رخ می دهد همچنین در ولتاژ 1.25 V شدت بیشینه نسبت به 1 V کاهش می یابد لذا انتظار می رود مقدار جریان اسپین پایین در 1.25 V از 1 V کمتر شود و NDR رخ دهد که طبق مقادیر ثبت شده برای جریان اسپین پایین در جدول ۵-۸ همینطور است.



شکل ۵-۱۶: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار هفت

جدول ۵-۸: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار هفت

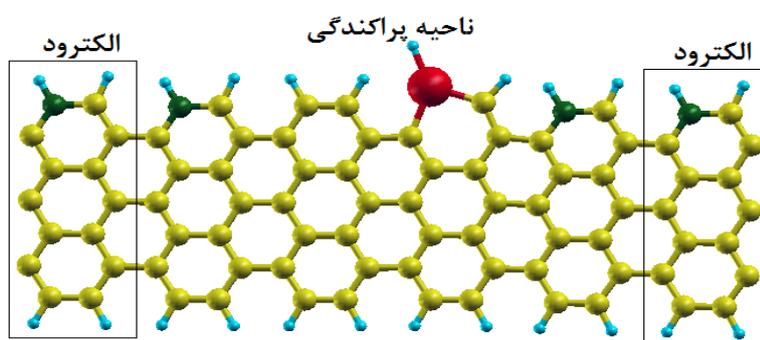
ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پایین (A)	۰	$۵/۰۷ \times 10^{-۶}$	$۱/۲۹ \times 10^{-۵}$	$۱/۲۵ \times 10^{-۵}$	$۱/۵ \times 10^{-۵}$	$۱/۲۸ \times 10^{-۵}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$۶/۴۳ \times 10^{-۶}$	$۹/۷۹ \times 10^{-۶}$	$۱/۱۳ \times 10^{-۵}$	$۱/۴۱ \times 10^{-۵}$	$۹/۹۲ \times 10^{-۶}$
میزان فیلترینگ	۰	% ۱۱/۸۲	% ۱۳/۷۴	% ۵/۰۴	% ۳/۰۹	% ۱۲/۹۸

با مقایسه مقادیر جریان بدست آمده در این ساختار با ساختار پنج نتیجه می گیریم وقتی ناحیه پراکندگی از جنس 7-AGNR-H با طول چهار سلول واحد و با خاصیت فلز مغناطیسی را به الکترودهایی از جنس ناحیه پراکندگی و آلایش یافته با اتم نیتروژن متصل می کنیم برای هر دو

اسپین بالا و پایین جریان بیشتری را خواهیم داشت، و همچنین میزان فیلترینگ جریان برای ساختار پنج که در آن الکترودها با اتم بورون آرایش یافته اند بیشتر است.

۵-۳-۸- ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد و اتم نیتروژن جایگزین شده در لبه الکتروود و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (II) (ساختار هشت)

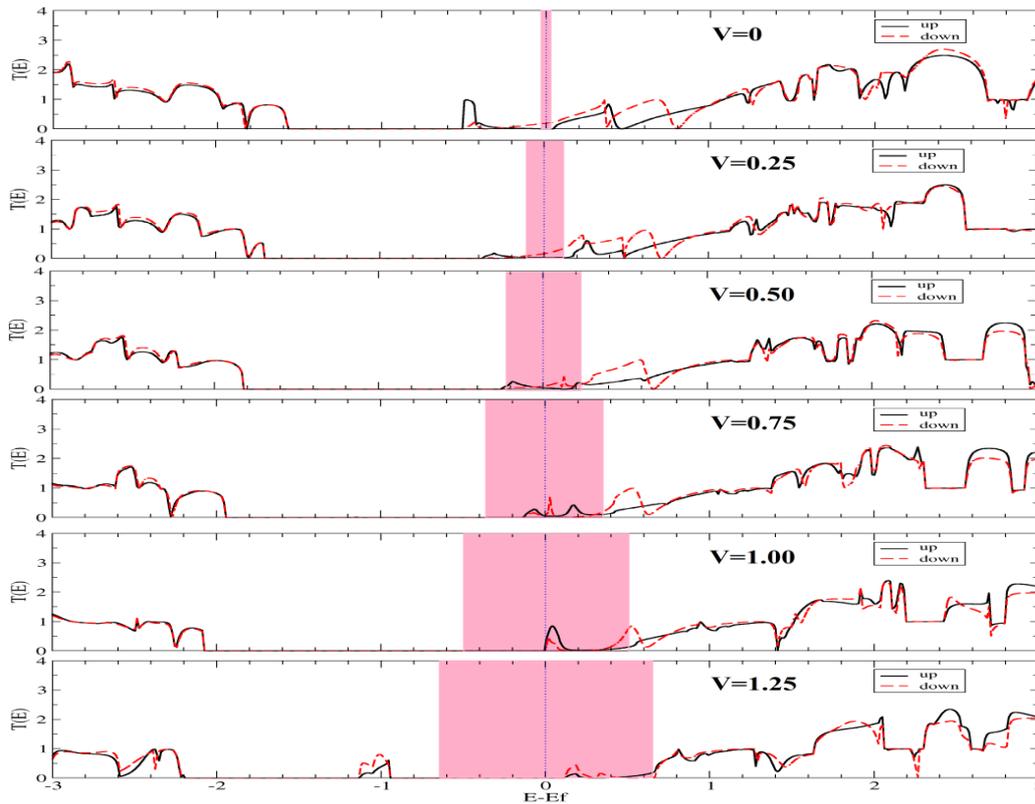
در این ساختار در ناحیه پراکندگی یک نیمرسانای مغناطیسی داریم که به دو الکتروود با خاصیت فلز غیرمغناطیسی متصل شده است. در شکل ۵-۱۷ این ساختار نشان داده شده است:



شکل ۵-۱۷: ساختار هشت. ابرسلول 7-AGNR-H با طول شش سلول واحد و اتم نیتروژن جایگزین شده در لبه الکتروود و اتم آهن جایگزین شده در لبه ناحیه پراکندگی (II)

الکترودهای این ساختار مشابه الکترودها در ساختار هفت هستند، همچنین این ساختار مشابه ساختار شش است با این تفاوت که الکترودهای این ساختار بجای اتم بورون با اتم نیتروژن آرایش یافته اند. نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار هشت در شکل ۵-۱۸ و مقدار جریان های بدست آمده به ازای ولتاژهای مختلف برای اسپین های بالا و پایین در این ساختار در جدول ۵-۹ آورده شده است. طبق مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین بالا در این ساختار با افزایش ولتاژ، جریان اسپین بالا افزایش می یابد و در ولتاژ ۱۷ این جریان بیشترین مقدار را دارد ولی در ولتاژ ۱/۲۵V جریان کاهش می یابد و پدیده NDR رخ می دهد. برای جریان اسپین پایین در این ساختار با افزایش ولتاژ تا ۰/۵۰ V جریان نیز افزایش می یابد ولی در ۰/۷۵ V جریان

کاهش یافته و NDR روی می دهد سپس با افزایش دوباره ولتاژ جریان افزایش یافته و در ۱V به بیشترین مقدار خود می رسد ولی در ولتاژ ۱/۲۵ V جریان کاهش می یابد و برای اسپین پایین در این ساختار برای دومین بار پدیده NDR روی می دهد. نمودارهای ضریب عبور که در شکل ۵-۱۸ آورده شده است نیز این نتایج را تایید می کند.

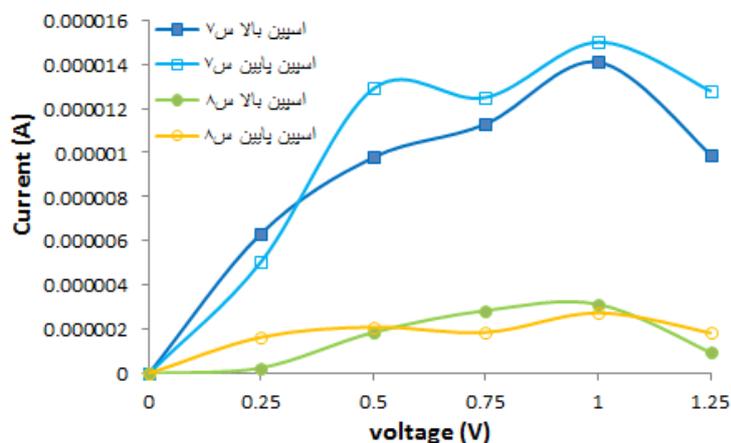


شکل ۵-۱۸: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار هشت

جدول ۵-۹: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار هشت

ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پایین (A)	۰	$۱/۶۴ \times ۱۰^{-۶}$	$۲/۱ \times ۱۰^{-۶}$	$۱/۸۶ \times ۱۰^{-۶}$	$۲/۷۴ \times ۱۰^{-۶}$	$۱/۸۴ \times ۱۰^{-۶}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$۲/۵۵ \times ۱۰^{-۷}$	$۱/۸۶ \times ۱۰^{-۶}$	$۲/۸۵ \times ۱۰^{-۶}$	$۳/۱۳ \times ۱۰^{-۶}$	$۹/۵۴ \times ۱۰^{-۷}$
میزان فیلترینگ	۰	٪ ۷۳/۱۵	٪ ۶/۰۶	٪ ۲۱/۰۱	٪ ۶/۶۴	٪ ۳۱/۸۵

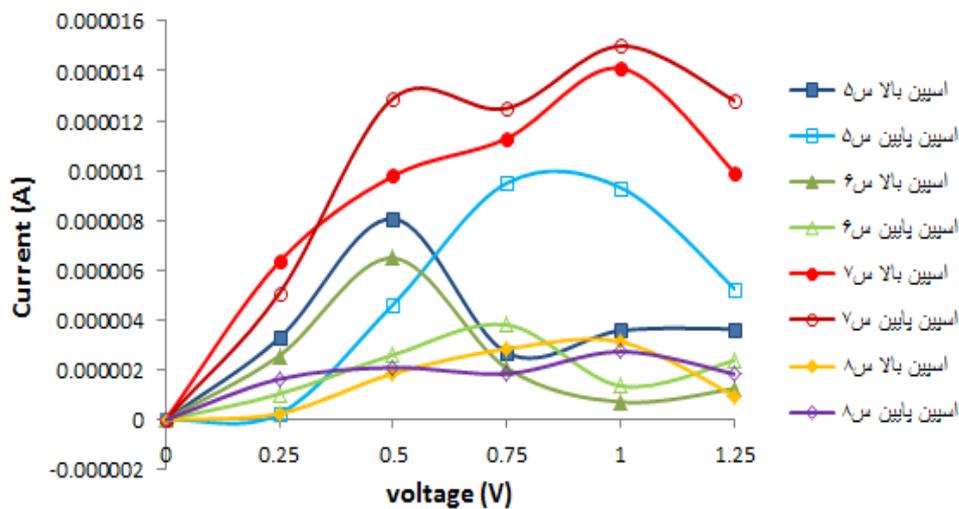
با توجه به مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در دو ساختار هفت و هشت که در جدول های ۵-۸ و ۵-۹ آورده شده اند و در شکل ۵-۱۹ رسم شده است نتایج زیر بدست می آید: الف) در هر دو ساختار بیشترین مقدار جریان برای هر دو اسپین در ولتاژ ۱۷ بدست می آید، ب) جریان هر دو اسپین در ساختار هفت، که ناحیه پراکندگی از جنس فلز مغناطیسی است، بیشتر است از ساختار هشت که در آن ناحیه پراکندگی از جنس نیمرسانای مغناطیسی است، د) در ولتاژ ۱/۲۵V برای هر دو اسپین بالا و پایین در هر دو ساختار پدیده NDR رخ می دهد و همچنین برای اسپین پایین در ولتاژ ۰/۷۵ V در هر دو ساختار برای دومین بار NDR روی می دهد، با توجه به شکل ۵-۱۹، شدت NDR رخ داده در ساختار هفت بیشتر است بنابراین استفاده از آن در دستگاه های سوئیچینگ مناسب تر است و ه) بیشترین میزان فیلترینگ در بین این دو ساختار در ولتاژ ۰/۲۵V برای ساختار هشت روی می دهد بنابراین استفاده از آن در دستگاه های اسپین فیلتر مناسب تر است.



شکل ۵-۱۹: نمودارهای I-V برای اسپین های بالا و پایین در ساختارهای هفت و هشت

با مقایسه مقادیر جریان در ساختارهای چهار تا هشت که در جداول ۵-۵ تا ۵-۹ آورده شده و در شکل ۵-۲۰ رسم شده است به نتایج زیر می رسیم: الف) در ساختار چهار که الکترودها نیمرسانای غیر مغناطیسی هستند جریان بسیار ناچیز است، اما با قرار دادن الکترودهای فلزی در ساختارهای پنج

تا هشت جریان به میزان چشمگیری افزایش یافت و جریان در محدوده میکرو آمپر بدست آمد، (ب) در بین این ساختارها بیشترین میزان فیلترینگ مربوط به ولتاژ ۰/۲۵V در ساختار پنج می باشد یعنی وقتی در الکترودها از اتم بورون به عنوان اتم آلاینده استفاده می کنیم میزان فیلترینگ نسبت به وقتی که در الکترودها از اتم نیتروژن به عنوان آلاینده استفاده می کنیم، بیشتر است، و (ج) در بین این ساختارها بیشترین مقدار جریان برای هر دو اسپین بالا و پایین در ساختار هفت اتفاق می افتد.

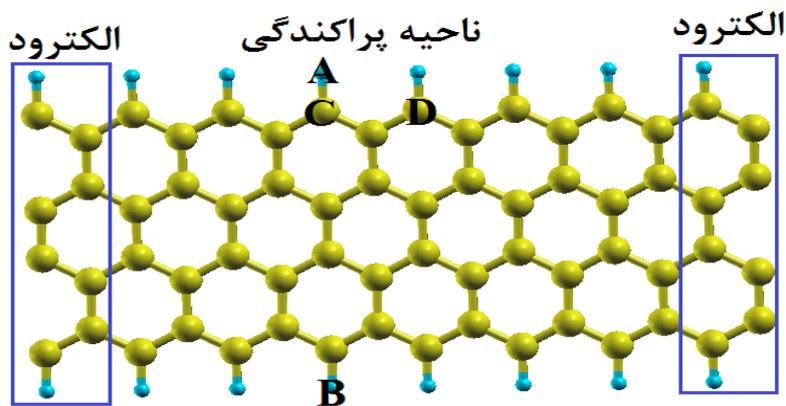


شکل ۵-۲۰: نمودارهای I-V برای اسپین های بالا و پایین در ساختارهای پنج تا هشت

۵-۳-۹-4-ZGNR-H با طول هشت سلول واحد (ساختار نه)

تا کنون به بررسی نانوروبان های گرافنی آرمچیر پرداختیم حال می خواهیم نانوروبان های گرافنی با لبه زیگزاگ شکل (ZGNR) را مورد بررسی قرار دهیم. در شکل ۵-۲۱، 4-ZGNR-H خالص نشان داده شده است، همچنین در این شکل ناحیه پراکندگی و الکترودها مشخص شده است و مکان های انتخاب شده برای جایگزینی اتم کربن با اتم های ناخالصی با حروف الفبای لاتین نمایش داده شده است. در این پایان نامه برای آلاینده نانوروبان 4-ZGNR-H اتم های آهن و منگنز را به

عنوان ناخالصی انتخاب کردیم.

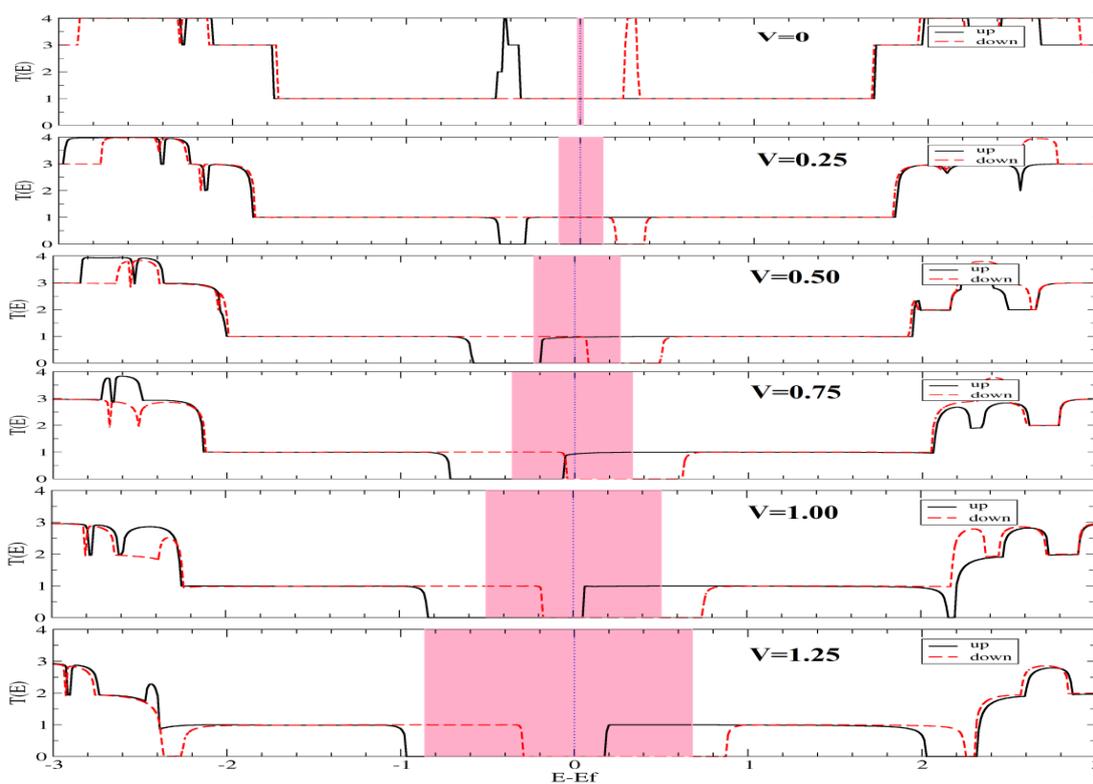


شکل ۵-۲۱: 4-ZGNR-H با طول هشت سلول واحد (ساختار نه)، حروف الفبای لاتین مکان های انتخاب شده برای جایگذاری اتم های آهن و منگنز را در ساختار نشان می دهند.

در ساختار نه، ناحیه پراکندگی و هر دو الکتروود فلز مغناطیسی می باشند. لازم به ذکر است الکتروودها در تمام ساختارهای نانوروبان گرافنی زیگزاگ مورد بررسی، مشابه با الکتروودها در این ساختار (ساختار نه) می باشند و خاصیت فلز مغناطیسی هستند. در جدول ۵-۱۰ مقادیر جریان محاسبه شده برای اسپین های بالا و پایین در ولتاژهای مختلف برای این ساختار آورده شده است. با توجه به مقادیر جریان بدست آمده می بینیم با افزایش ولتاژ، جریان برای هر دو اسپین در این ساختار افزایش می یابد اما در ولتاژ $0.75V$ برای هر دو اسپین جریان به مقدار ناچیزی کاهش می یابد و NDR بسیار ضعیفی در این ساختار روی می دهد، همچنین در تمام ولتاژها جریان اسپین بالا بیشتر از جریان اسپین پایین است.

جدول ۵-۱۰: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پايين در ولتاژهای مختلف برای ساختار نه

ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پايين (A)	۰	$9/21 \times 10^{-6}$	$1/25 \times 10^{-5}$	$1/24 \times 10^{-5}$	$1/25 \times 10^{-5}$	$1/25 \times 10^{-5}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$9/29 \times 10^{-6}$	$1/65 \times 10^{-5}$	$1/61 \times 10^{-5}$	$1/70 \times 10^{-5}$	$1/70 \times 10^{-5}$
میزان فیلترینگ	۰	% ۰/۴۳	% ۱۳/۷۹	% ۱۲/۹۸	% ۱۵/۲۵	% ۱۵/۲۵



شکل ۵-۲۲: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار نه

در شکل ۵-۲۲ نمودارهای ضریب عبور بدست آمده در ولتاژهای مختلف برای ساختار نه نشان داده شده است. طبق نمودارهای ضریب عبور بدست آمده انتظار می رود با افزایش ولتاژ، جریان نیز افزایش یابد زیرا همانطور که در شکل ۵-۲۲ می بینیم با افزایش ولتاژ، سطح زیر منحنی های ضریب

عبور که در پنجره ولتاژ قرار می گیرد افزایش می یابد. در ولتاژ صفر نمودار ضریب عبور بدست آمده دارای دو قله اطراف تراز فرمی است با مقایسه با دیگر کارهای انجام شده بر روی 4-ZGNR-H می بینیم [۴۶ و ۵۳] در ولتاژ صفر در اطراف تراز فرمی قله وجود دارد.

۵-۳-۱۰-4-ZGNR-H با طول هشت سلول واحد و دو اتم ناخالصی قرار گرفته در مکان های A و B

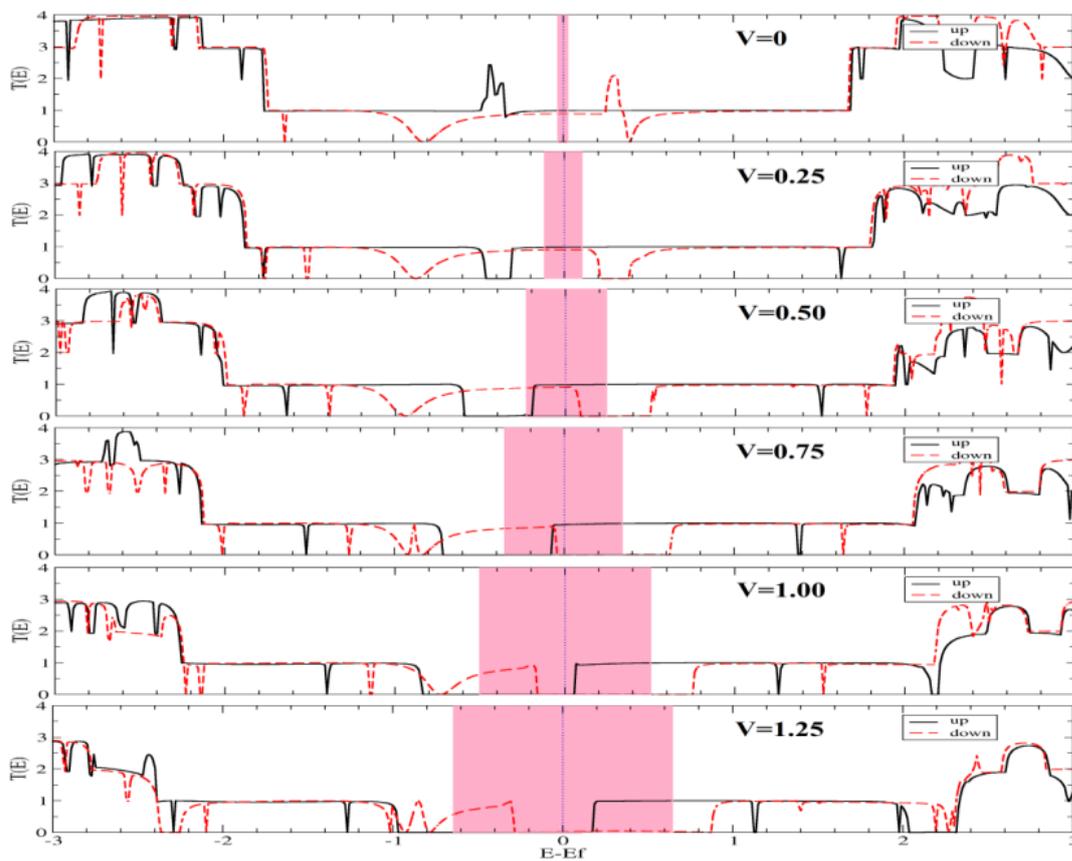
در 4-ZGNR-H که در آن، دو اتم آهن با وضعیت فرومغناطیس نسبت بهم در مکان های A و B جای دو اتم هیدروژن قرار می گیرند (ساختار ده)، ناحیه پراکندگی یک نیمرسانای مغناطیسی می باشد. جدول ۵-۱۱ مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین بالا و پایین را در ساختار ده و شکل ۵-۲۳ نمودارهای ضریب عبور را برای این ساختار نشان می دهد. همانطور که مقادیر جدول ۵-۱۱ نشان می دهد و نمودارهای ضریب عبور در شکل ۵-۲۳ آن را تایید می کند با افزایش ولتاژ تا ۰/۵۰۷V جریان برای هر دو اسپین بالا و پایین افزایش می یابد و در همین ولتاژ جریان برای هر دو اسپین در این ساختار بیشترین مقدار خود را دارد سپس با افزایش ولتاژ جریان هر دو اسپین به مقدار کمی کاهش می یابد و در ۰/۷۵۷V، NDR بسیار ضعیفی در این ساختار روی می دهد روند کاهش جریان تا ولتاژ ۱۷V ادامه می یابد سپس در ۱/۲۵۷V جریان افزایش می یابد.

در ساختار 4-ZGNR-H که دو اتم آهن در وضعیت پاد فرومغناطیسی نسبت بهم در مکان های A و B جای دو اتم هیدروژن قرار گرفته اند (ساختار یازده)، ناحیه پراکندگی یک نیمرسانای غیرمغناطیسی می باشد. در جدول ۵-۱۲ مقادیر جریان برای اسپین های بالا و پایین در ساختار یازده، و در شکل ۵-۲۴ نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای این ساختار آورده شده است. طبق مقادیر جریان در جدول ۵-۱۲، در ولتاژهای ۰/۷۵۷V و ۱/۲۵۷V جریان کاهش یافته و پدیده NDR در این ساختار روی می دهد، بیشترین مقدار جریان برای اسپین بالا در ۱۷V و برای اسپین پایین در ۰/۵۰V روی می دهند. نمودارهای ضریب عبور این ساختار نیز که در شکل ۵-

۲۴ آورده شده اند نتایج بدست آمده را تایید می کنند.

جدول ۵-۱: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار ده

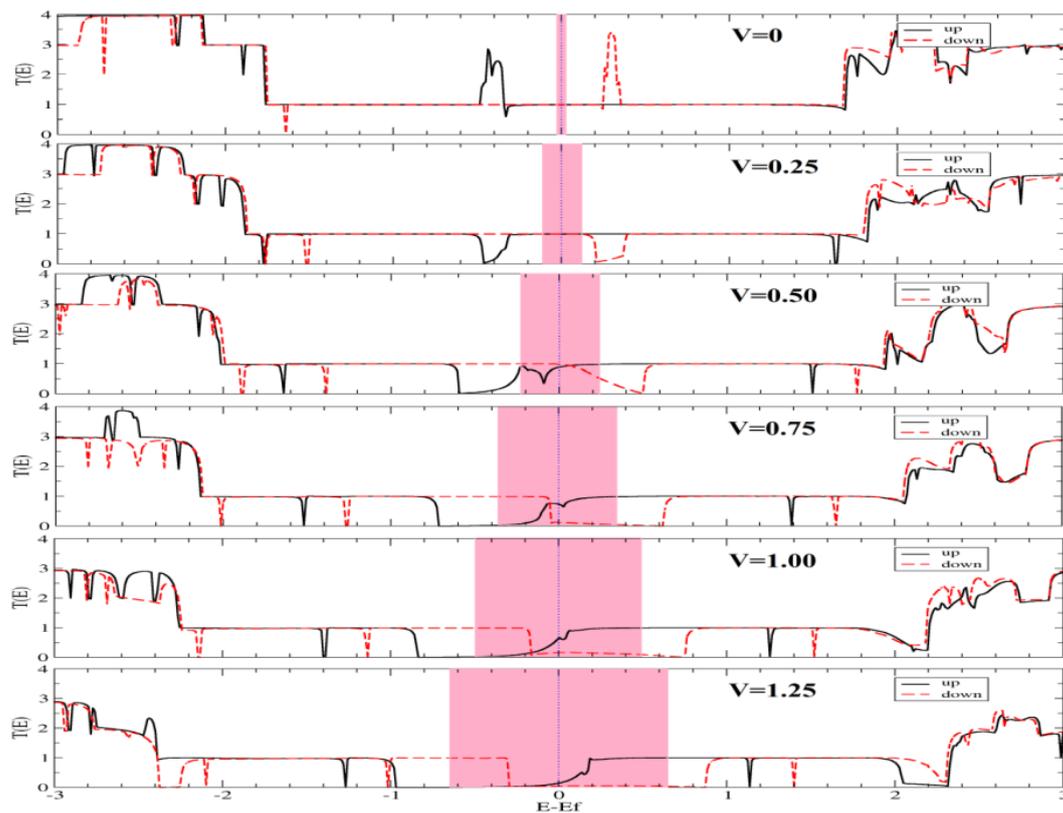
ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پایین (A)	۰	$۸/۲۸ \times ۱۰^{-۶}$	$۱/۱۵ \times ۱۰^{-۵}$	$۱/۰۸ \times ۱۰^{-۵}$	$۱/۰۲ \times ۱۰^{-۵}$	$۱/۱ \times ۱۰^{-۵}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$۹/۲۲ \times ۱۰^{-۶}$	$۱/۶۹ \times ۱۰^{-۵}$	$۱/۶۷ \times ۱۰^{-۵}$	$۱/۶۶ \times ۱۰^{-۵}$	$۱/۷۰ \times ۱۰^{-۵}$
میزان فیلترینگ	۰	% ۵/۳۷	% ۱۹/۰۱	% ۲۱/۴۵	% ۲۳/۸۸	% ۲۱/۴۲



شکل ۵-۲۳: نمودارهای ضریب عبور بر حسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار ده

جدول ۵-۱۲: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پايين در ساختار يازده

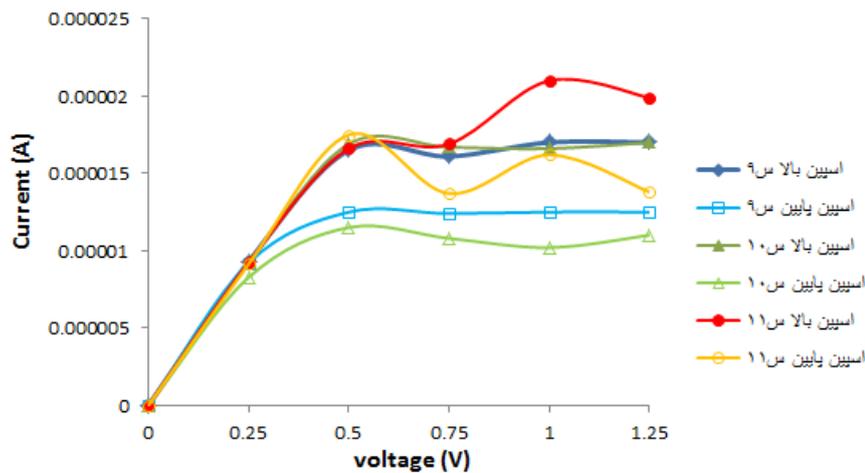
ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پايين (A)	۰	$9/15 \times 10^{-6}$	$1/75 \times 10^{-5}$	$1/37 \times 10^{-5}$	$1/62 \times 10^{-5}$	$1/38 \times 10^{-5}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$9/25 \times 10^{-6}$	$1/66 \times 10^{-5}$	$1/69 \times 10^{-5}$	$2/10 \times 10^{-5}$	$1/99 \times 10^{-5}$
میزان فیلترینگ	۰	% ۰/۵۴	% ۲/۶۳	% ۱۰/۴۵	% ۱۲/۹	% ۱۸/۱



شکل ۵-۲۴: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار يازده

مقادیر جریان ثبت شده در جدول های ۵-۱۰ تا ۵-۱۲ برای ساختارهای نه تا يازده در شکل

۲۵-۵ رسم شده است با توجه به این مقادیر به نتایج زیر می‌رسیم: الف) بیشترین مقدار جریان در این سه ساختار مربوط به جریان اسپین بالا در ساختار یازده است که در این ساختار ناحیه پراکندگی از جنس نیمرسانای غیرمغناطیسی می‌باشد، ب) در هر سه ساختار جریان اسپین بالا بیشتر از جریان اسپین پایین است، ج) در ولتاژ $0.75V$ در هر سه ساختار برای هر دو اسپین پدیده NDR روی می‌دهد اما در ساختار یازده شدت NDR رخ داده بسیار قویتر از دوساختار دیگر است همچنین برای ساختار یازده در $1.25V$ نیز دوباره NDR روی می‌دهد لذا از ساختار یازده در دستگاه‌های سوئیچینگ می‌توان استفاده کرد، علاوه بر این نتایج، با دقت در میزان فیلترینگ بدست آمده در جدول های ۵-۱۰ تا ۵-۱۲ می‌بینیم بیشترین میزان فیلترینگ در بین این سه ساختار در ولتاژ $1V$ ساختار ده می‌باشد لذا استفاده از آن در دستگاه‌های فیلترکننده اسپینی می‌توان استفاده کرد.



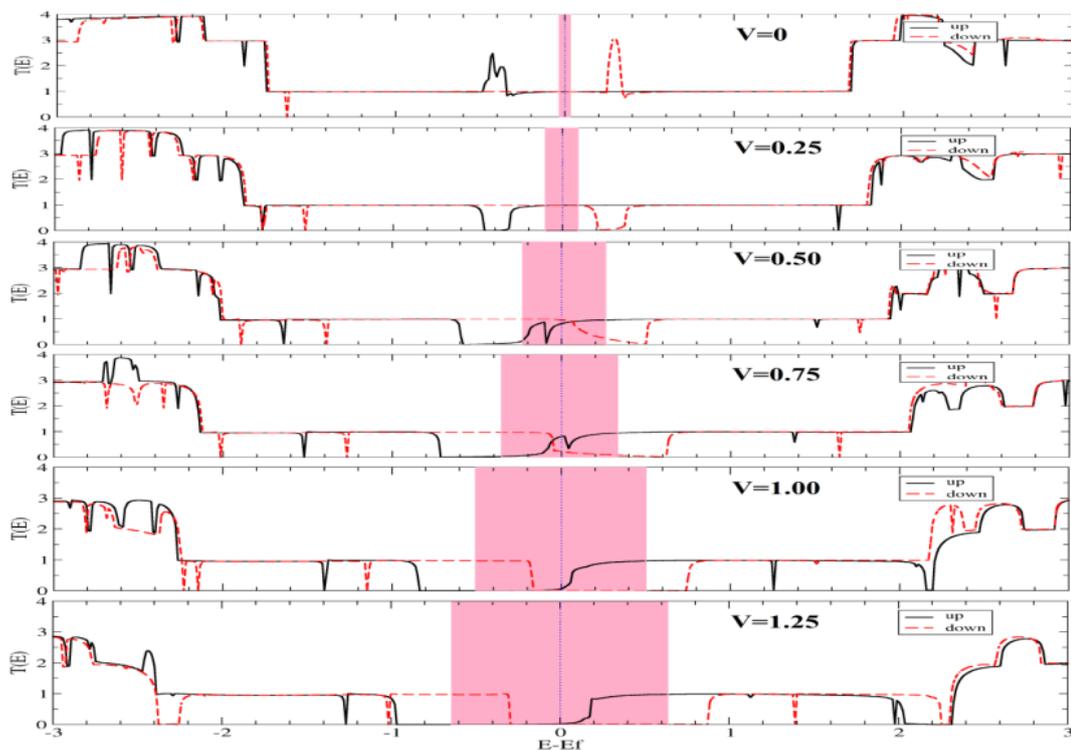
شکل ۲۵-۵: نمودارهای I-V برای اسپین بالا و پایین در ساختارهای نه، ده و یازده

در ساختار 4-ZGMR-H که دو اتم منگنز در وضعیت پاد فرومغناطیسی نسبت بهم در مکان های A و B جای دو اتم هیدروژن قرار گرفته اند (ساختار دوازده)، ناحیه پراکندگی دارای خاصیت نیمرسانای غیرمغناطیسی می‌باشد. در جدول ۵-۱۳ مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین بالا و پایین در ساختار دوازده آورده شده است. نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف

برای ساختار دوازده در شکل ۵-۲۶ آورده شده است. بر طبق مقادیر بدست آمده در جدول ۵-۱۳ که نمودارهای ضریب عبور این ساختار نیز آنها را تایید می کنند با افزایش ولتاژ جریان اسپین بالا نیز افزایش می یابد، برای اسپین پایین تا ولتاژ $V = 0.75$ با افزایش ولتاژ جریان نیز افزایش می یابد اما در ولتاژهای $1V$ و $V = 1.25$ با افزایش ولتاژ جریان اسپین پایین کاهش می یابد و پدیده NDR رخ می دهد. بیشترین میزان فیلترینگ در ساختار دوازده در ولتاژ $V = 1.25$ رخ داده است.

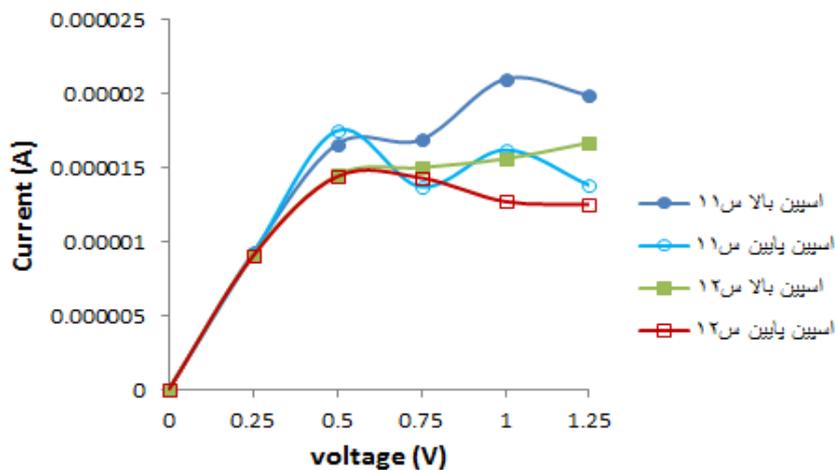
جدول ۵-۱۳: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار دوازده

ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پایین (A)	۰	$9/03 \times 10^{-6}$	$1/44 \times 10^{-5}$	$1/44 \times 10^{-5}$	$1/27 \times 10^{-5}$	$1/25 \times 10^{-5}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$9/07 \times 10^{-6}$	$1/45 \times 10^{-5}$	$1/50 \times 10^{-5}$	$1/56 \times 10^{-5}$	$1/67 \times 10^{-5}$
میزان فیلترینگ	۰	% ۰/۲۲	% ۰/۳۴	% ۲/۳۸	% ۱۰/۲۴	% ۱۴/۳۸



شکل ۵-۲۶: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار دوازده

در دو ساختار یازده و دوازده ناحیه پراکندگی از جنس نیمرسانای غیر مغناطیسی می باشد، منحنی های I-V برای اسپین های بالا و پایین مربوط به این دو ساختار در شکل ۲۷-۵ رسم شده است، با مقایسه جریان ها در این دو ساختار می بینیم جریان برای هر دو اسپین بالا و پایین در ساختار یازده که در آن دو اتم آهن برای آرایش استفاده کرده ایم از ساختار دوازده که با دو اتم منگنز آرایش یافته قویتر است، همچنین میزان فیلترینگ در ساختار یازده که با دو اتم آهن آرایش یافته است از ساختار دوازده بیشتر است لذا استفاده از ساختار یازده در دستگاه های اسپین فیلتر مناسب تر است.



شکل ۲۷-۵: نمودارهای I-V در ساختارهای یازده و دوازده

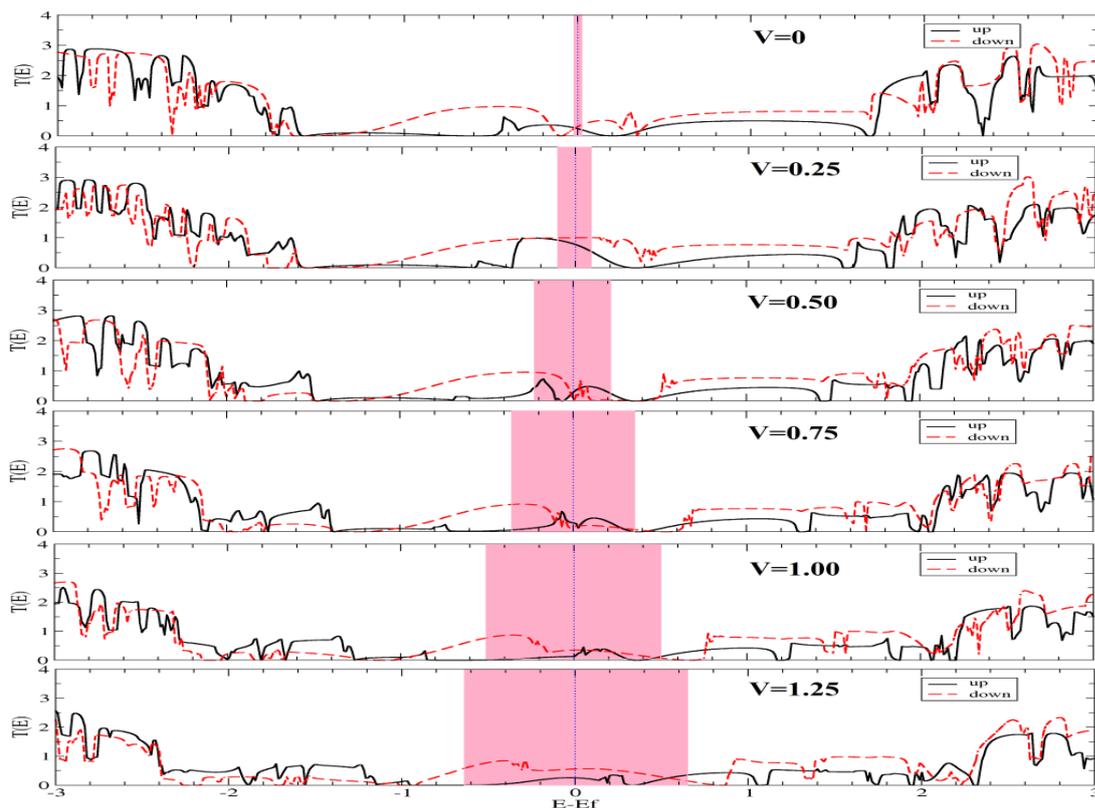
۵-۳-۱۱-4-ZGNR-H با طول هشت سلول واحد و دو اتم ناخالصی قرار گرفته در مکان های C و D

در ساختار 4-ZGNR-H که دو اتم آهن در وضعیت فرومغناطیسی نسبت بهم در مکان های C و D جای دو اتم کربن قرار گرفته اند (ساختار سیزده)، ناحیه پراکندگی دارای خاصیت فلز مغناطیسی می باشد. در جدول ۱۴-۵ مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در این ساختار آورده شده است. طبق مقادیر ثبت شده در این جدول، در ولتاژهای ۰/۵ V، ۰/۷۵ V و ۱ V جریان

اسپین بالا با وجود افزایش ولتاژ، کاهش می یابد یعنی در این ولتاژها پدیده NDR روی می دهد، همچنین در ۱۷ جریان اسپین بالا به کمترین مقدار خود می رسد و NDR رخ داده در این ولتاژ بیشترین شدت را دارد. جریان اسپین پایین در این ساختار، طبق مقادیر ثبت شده در این جدول با افزایش ولتاژ، افزایش می یابد، جز در ۰/۵۰V که کاهش جریان بسیار ضعیفی روی می دهد. نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای این ساختار در شکل ۵-۲۸ آورده شده است، با توجه به نمودارهای ضریب عبور برای اسپین های بالا و پایین انتظار می رود مقدار جریان اسپین پایین بیشتر از مقدار جریان اسپین بالا باشد که مقادیر جریان ثبت شده در جدول ۵-۱۴ این مطلب را تایید می کند.

جدول ۵-۱۴: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین های بالا و پایین در ساختار سیزده

ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پایین (A)	۰	$9/25 \times 10^{-6}$	$8/93 \times 10^{-6}$	$1/22 \times 10^{-5}$	$1/66 \times 10^{-5}$	$2/60 \times 10^{-5}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$6/95 \times 10^{-6}$	$6/87 \times 10^{-6}$	$6/85 \times 10^{-6}$	$4/81 \times 10^{-6}$	$7/54 \times 10^{-6}$
میزان فیلترینگ	۰	% ۱۴/۱۹	% ۱۳/۰۳	% ۲۸/۲۷	% ۵۵/۲۵	% ۵۵/۱۱



شکل ۵-۲۸: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار سیزده

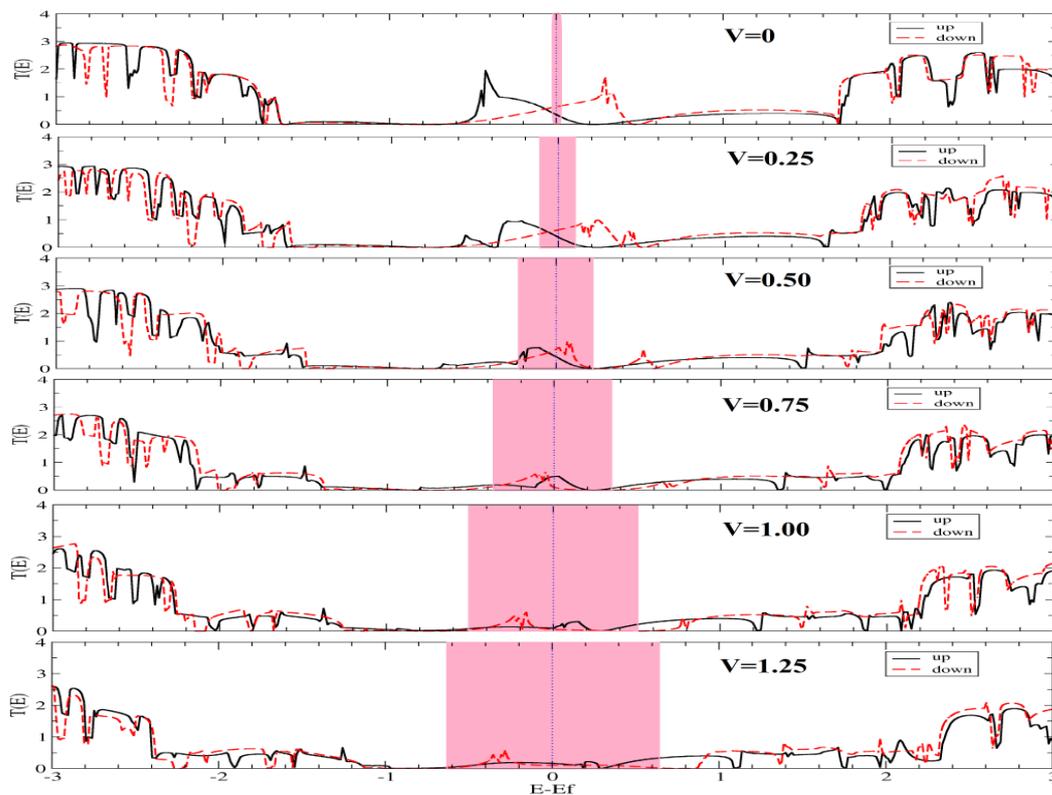
در بین ساختارهای 4-ZGNR-H مورد بررسی، این ساختار (ساختار سیزده) بیشترین میزان فیلترینگ را دارد لذا می توان از آن در دستگاه های اسپین ترونیکی استفاده کرد. در ساختارهای ده، یازده و سیزده اتم آهن به عنوان ناخالصی انتخاب شده در بین این سه ساختار بیشترین مقدار جریان در ساختار یازده بدست می آید که در آن دو اتم آهن در وضعیت پاد فرومغناطیسی نسبت بهم جای دو اتم هیدروژن قرار می گیرند.

در 4-ZGNR-H با دو اتم منگنز در وضعیت پاد فرومغناطیسی نسبت بهم در مکان های C و D جای دو اتم کربن (ساختار چهارده)، ناحیه پراکندگی دارای خاصیت فلز مغناطیسی می باشد. در جدول ۵-۱۵ مقادیر جریان برای اسپین بالا و پایین در ساختار چهارده و در شکل ۵-۲۹ نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای این ساختار آورده شده است طبق مقادیر جریان

در جدول ۵-۱۵ و تایید نمودارهای ضریب عبور این ساختار، برای هر دو اسپین بالا و پایین در ولتاژهای ۰/۷۵ V و ۱V با وجود افزایش ولتاژ، جریان کاهش می یابد یعنی در این ولتاژها در این ساختار برای هر دو اسپین پدیده NDR رخ می دهد، همچنین بیشترین مقدار جریان برای اسپین بالا در ۰/۵۰V و برای اسپین پایین در ۱/۲۵V اتفاق می افتد.

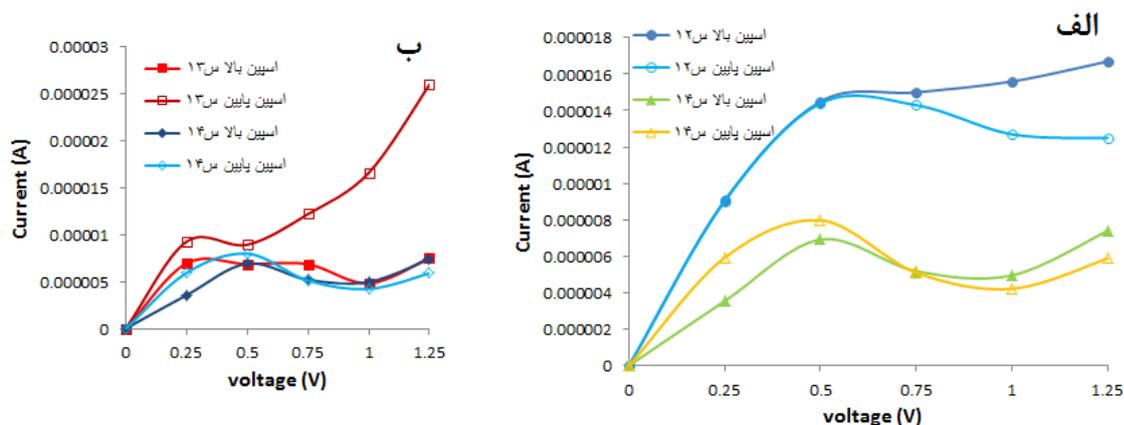
جدول ۵-۱۵: مقادیر جریان بدست آمده برای اسپین بالا و پایین در ساختار چهارده

ولتاژ (V)	۰	۰/۲۵	۰/۵۰	۰/۷۵	۱/۰۰	۱/۲۵
جریان اسپین پایین (A)	۰	$5/93 \times 10^{-6}$	$7/98 \times 10^{-6}$	$5/11 \times 10^{-6}$	$4/22 \times 10^{-6}$	$5/89 \times 10^{-6}$
جریان اسپین بالا (A)	۰	$3/55 \times 10^{-6}$	$6/92 \times 10^{-6}$	$5/19 \times 10^{-6}$	$4/96 \times 10^{-6}$	$7/41 \times 10^{-6}$
میزان فیلترینگ	۰	% ۲۵/۱۰	% ۷/۱۱	% ۰/۷۷	% ۸/۰۶	% ۱۱/۴۲



شکل ۵-۲۹: نمودارهای ضریب عبور برحسب انرژی در ولتاژهای مختلف برای ساختار چهارده

در ساختارهای دوازده و چهارده اتم منگنز به عنوان ناخالصی انتخاب شده است، با توجه به مقادیر ثبت شده در جدول های ۵-۱۲ و ۵-۱۵ می بینیم: الف) در ساختار دوازده بیشترین میزان فیلترینگ در ولتاژهای بالا روی داده است و برای ساختار چهارده بیشترین میزان فیلترینگ در ولتاژ ۰/۲۵ V است، ب) بیشترین میزان فیلترینگ در بین دو ساختار دوازده و چهارده، در ولتاژ ۰/۲۵ V ساختار چهارده روی داده است یعنی با قرار دادن دو اتم منگنز جای دو اتم کربن نسبت به وقتی که این دو اتم جای دو اتم هیدروژن قرار بگیرند ساختار قدرت بیشتری در فیلترینگ جریان دارد و ج) همانطور که در شکل ۵-۳۰ الف می بینیم در ساختار دوازده جریان برای هر دو اسپین بالا و پایین بیشتر از ساختار چهارده است. در ساختارهای سیزده و چهارده در مکان هایی یکسان دو اتم متفاوت به عنوان ناخالصی قرار گرفته اند با دقت در مقادیر بدست آمده در جدول های ۵-۱۴ و ۵-۱۵ که به ترتیب برای ساختارهای سیزده و چهارده می باشند می بینیم قدرت فیلترینگ در ساختار سیزده که اتم آهن به عنوان ناخالصی انتخاب شده است بسیار بیشتر است همچنین با توجه به شکل ۵-۳۰ ب و مقادیر ثبت شده در دو جدول ۵-۱۴ و ۵-۱۵ می بینیم جریان اسپین پایین در ساختار سیزده بسیار قویتر از ساختار چهارده است اما جریان اسپین بالا در هر دو ساختار تقریباً مشابه است.



شکل ۵-۳۰: نمودارهای I-V در ساختارهای الف) ۱۲ و ۱۴، و ب) ۱۳ و ۱۴

۵-۴- جمع بندی

در این فصل به بررسی خواص تراپردی، اثر اسپین فیلتر و پدیده NDR در نانوروبان های گرافنی با لبه زیگزاگ و آرمچیر پرداختیم. در این بررسی ها برای آرایش نانوروبان های گرافنی از عناصر واسطه آهن و منگنز به عنوان ناخالصی استفاده کردیم و اثر آنها را بر روی خواص تراپردی نانوروبان های گرافنی بررسی کردیم.

در نانوروبان های گرافنی آرمچیر، وقتی الکترودها و ناحیه پراکندگی را از جنس 7-AGNR-H خالص انتخاب می کنیم، هر دو الکترودها و ناحیه پراکندگی نیمرسانای غیر مغناطیسی می باشند، و افزایش طول ناحیه پراکندگی باعث کاهش جریان در هر دو اسپین بالا و پایین شد. وقتی ناحیه پراکندگی نیمرسانای غیر مغناطیسی را با ناحیه ای از جنس فلز مغناطیسی و یا نیمرسانای مغناطیسی جایگزین می کنیم ولی الکترودها هنوز نیمرسانای غیر مغناطیسی هستند تغییر قابل ملاحظه ای در جریان مشاهده نمی شود. ولی وقتی الکترودهای نیمرسانای غیر مغناطیسی را با الکترودهای فلزی جایگزین می کنیم جریان در محدوده میکرو آمپر بدست می آید. بیشترین میزان اسپین فیلتر در بین ساختارهای آرمچیر در ولتاژ 0.75 V در ساختار سه و به میزان $96/78\%$ بدست آمد و بهترین مقدار جریان همراه با بیشترین میزان فیلترینگ در ساختار پنج بدست آمد.

در نانوروبان های گرافنی زیگزاگ تمام الکترودها فلز مغناطیسی انتخاب شدند و آرایش فقط در ناحیه پراکندگی انجام شد. در نانوروبان های گرافنی زیگزاگ بیشترین جریان در ساختار سیزده وقتی دو اتم آهن را در وضعیت فرومغناطیس نسبت بهم جای دو اتم کربن در مکان های C و D قرار دادیم، برای اسپین پایین اتفاق افتاد. بیشترین میزان فیلترینگ در ساختار سیزده و در ولتاژ 1 V و به میزان $55/11\%$ بدست آمد. در نانوروبان های گرافنی زیگزاگ با قرار دادن دو اتم منگنز جای دو اتم هیدروژن (ساختار دوازده) هم جریان اسپین بالا و هم جریان اسپین پایین نسبت به وقتی که دو اتم منگنز جایگزین دو اتم کربن (ساختار چهارده) می شود بیشتر است. وقتی دو اتم آهن را جایگزین دو

اتم کربن (ساختار سیزده) می کنیم جریان اسپین پایین نسبت به زمانی که دو اتم منگنز را جایگزین دو اتم کربن (ساختار چهارده) می کنیم بیشتر می شود. با قرار دادن دو اتم آهن جای دو اتم هیدروژن در وضعیت پاد فرومغناطیس نسبت بهم (ساختار یازده) هم جریان اسپین پایین و هم جریان اسپین بالا قویتر از زمانی است که دو اتم منگنز را جایگزین دو اتم هیدروژن در وضعیت پادفرومغناطیس نسبت بهم (ساختار دوازده) می کنیم، همچنین با قرار دادن دو اتم آهن جای دو اتم هیدروژن در ولتاژ 0.75 V پدیده NDR مشاهده می شود که شدت پدیده NDR مشاهده شده برای اسپین پایین این ساختار از دیگر ساختارهای زیگزاگ مورد بررسی قوی تر است.

پیشنهادات

- استفاده از الکترودهای فرومغناطیسی برای بررسی مقدار جریان و تراپرد در نانوروبان های گرافنی.
- بررسی خواص الکترونی، مغناطیسی و تراپردی در نانوروبان های گرافنی با پهناهای بیشتر و مقایسه خواص مورد اشاره در آنها با موارد بدست آمده در این تحقیق.
- بررسی مقدار جریان و تراپرد در صفحات گرافنی و مقایسه با مقادیر بدست آمده در این تحقیق.
- استفاده از دیگر اتم های عناصر واسطه و بررسی تاثیر آنها بر روی جریان و تراپرد در نانوروبان های گرافنی.

- [1] Wu Y., (2011), PhD diss., "Simulation of graphene electronic devices", University of Birmingham
- [2] Allen M. J., Tung V. C. and Kaner R. B. (2009) "Honeycomb carbon: a review of graphene" *Chemical reviews*, 110(1), 132-145.
- [3] Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V. and Firsov A.A., (2004), "Electric field effect in atomically thin carbon films", *science*, 306(5696), pp.666-669.
- [4] Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Katsnelson M.I., Grigorieva I.V., Dubonos S.V. and Firsov A.A., (2005), "Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in grapheme", *nature*, 438(7065), pp.197-200.
- [5] Geim A.K. and Kim P., (2008), "Carbon wonderland", *Scientific American*, 298(4), pp.90-97.
- [6] Warner J. H., Schaffel F., Rummeli M. and Bachmatiuk A. (2012), "Graphene: Fundamentals and emergent applications" Elsevier Inc..
- [7] Arı O., (2011), master. thesis, "Electronic, spintronic and transport properties of carbon based nanowires.", School of Engineering and Sciences of Izmir Institute of Technology
- [8] Majumdar S., Majumdar H. S. and O`sterbacka R., (2011), "Organic Spintronics", Elsevier B.V.
- [9] Kheirabadi N., Shafiekhani A. and Fathipour M., (2014), "Review on graphene spintronic, new land for discovery", *Superlattices and Microstructures*, 74, 123-145.
- [10] Žutić I., Fabian J. and Sarma, S. D. (2004), "Spintronics: Fundamentals and applications", *Reviews of modern physics*, 76(2), 323
- [11] Smith C. H. (2004), "Commercial Applications of Spintronics Technology", *Nanomaterials 2004*.
- [12] Gregg J. F., Petej I., Jouguelet E. and Dennis C. (2002), "Spin electronics—a review", *Journal of Physics D: Applied Physics*, 35(18), R121.
- [13] Sugahara S. and Tanaka M. (2006), "Spin MOSFETs as a basis for spintronics", *ACM Transactions on Storage (TOS)*, 2(2), 197-219.

- [14] Stefanita C. G. (2012), "Introduction to Spintronics", In Magnetism (pp. 235-281). Springer Berlin Heidelberg.
- [15] Melissa M., (2013), " *Giant Magnetoresistance*", Physics 141A – Spring 2013.
- [16] Kitchin J., (2012), "Modeling materials using density functional theory" GNU Free Documentation License.
- [17] Hohenberg P. and Kohn W., (1964). "Inhomogeneous Electron Gas ", Phys. Rev. B, 136, pp .864.
- [18] Sholl D. S. and Steckel J. A., (2009). "Density Functional Theory: A Practical Introduction", John Wiley & Sons, Inc., USA.
- [19] Perdew J. P. and Wang Y., (1992). "Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy ", Phys. Rev. B, 45, pp.13244.
- [20] Perdew J. P., Burke K., and Ernzerhof M., (1997). "Generalized Gradient Approximation Made Simple", Phys. Rev. Lett, 77, pp .3865.
- [21] Soler J. M., Artacho E., Gale J. D., Garcia A., Junquera J., Ordejon P. and Sanchez-Portal D., (2002). "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation", J. Phys : Condens. Matter, 14, pp. 2745.
- [22] Gonze X., Beuken I. M., Caracas R., Detraux F., Fuchs M., Rignanese G. M., Sindic L., Verstraete M., Zerah G., Jollet F., et al, (2002). "First-principles computation of material properties: the ABINIT software project", Comput. Mat. Science, 25, pp .478.
- [23] Vienna ab-initio simulation package, URL <http://cms.mpi.llnivia.ac.at/lvasp>.
- [24] Blaha P., Schwarz K., Madsen G., Kvasnicka D. and Luitz.Wienzk J., URL <http://www.wien2k.at>.
- [25] Quantumpresso, URL <http://www.quantum-espresso.org>.
- [26] Openmx, URL <http://www.openmx-square.org>.
- [27] Ordejon P., (1998). "Order-N tight-binding methods for electronic-structure and molecular dynamics"., Comput. Mater. Sci, 12, pp .157.
- [28] Ordejon P., Artacho E. and Soler J., (1996). "Self-consistent order-N density-functional calculations for very large systems", Phys. Rev. B, 53, pp .10441.
- [29] Ordejon P., Drabold D. A., Grumbach M. P. and Martin R. M., (1997)., Phys. Rev. B 48, 65,453.
- [30] Troullier N. and Martins J., (1991). "Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations", Phys. Rev. B, 43, pp .1993.
- [31] Troullier N. and Martins J., (1991). "Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. II. Operators for fast iterative diagonalization", Phys. Rev. B, 43, pp. 8861.

- [32] Kleinman L. and Bylander D.,(1982)."Efficacious Form for Model Pseudopotentials", Phys. Rev. Lett, 48, pp .1425.
- [33] Fulde 1P., (1995). "Electron Correlations in Molecules and Solids Springer, Berlin".
- [34] Datta S.,(1995). "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", (Cambridge University Press)
- [35] Haug H. and Jauho A.-P., (1996). "Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors Springer- Verlag, Berlin",
- [36] Datta S., (1995). "Electronic Transport in Mesoscopic Systems, edited by H. Ahmed, M. Pepper, and A. Broers Cambridge University Press, Cambridge, England."
- [37] Brandbyge M., Stokbro K., Taylor J., Mozos J.L. and Ordejo'n P.,(2001). "Nonlithography and Lithographic Methods of Nanofabrication—From Ultralarge-Scale Integration to Photonics to Molecular Electronics.", edited by L. Merhari, J.A. Rogers, A. Karim, D.J. Norris, and Y. Xia, MRS Symposia Proceed Proceedings, Vol. 636 Materials Research Society, Boston, p. D9.25.
- [38] Ozan ARI, (2011), master thesis, "Electronic, Spintronic and Transport properties of carbon based nanowires", the Graduate School of Engineering and Sciences of Izmir Institute of Technology.
- [39] Economou E., (1995). "Green's Functions in Quantum Physics (Spinger-Verlag, Berlin).".
- [40] Jauho A. P.,(2003). "Progress in nonequilibrium Green's functions II (World Scientific Publishing Co., Singeapore).".
- [41] Haug H. and Jauho A. P., (1996). "Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors(springer, Berlin).".
- [42] Treske U., Ortmann F., Oetzel B., Hannewald K. and Bechstedt F. (2010), "Electronic and transport properties of graphene nanoribbons", physica status solidi (a), 207(2), 304-308.
- [43] Geim A. K. and Novoselov K. S. (2007), "The rise of graphene", Nature materials, 6(3), 183-191.
- [44] Bolotin K. I., Sikes K. J., Jiang Z., Klima M., Fudenberg G., Hone J., ... and Stormer H. L. (2008). "Ultrahigh electron mobility in suspended graphene" Solid State Communications, 146(9), 351-355.
- [45] Yang L., Park C. H., Son Y. W., Cohen M. L. and Louie S. G. (2007),

"Quasiparticle energies and band gaps in graphene nanoribbons" *Physical Review Letters*, 99(18), 186801.

[46] Chauhan S. S., Srivastava P. and Shrivastava A. K. (2014), "Electronic and transport properties of boron and nitrogen doped graphene nanoribbons: an ab initio approach." *Applied Nanoscience*, 4(4), 461-467.

[47] Son Y. W., Cohen M. L. and Louie S. G. (2006), "Energy gaps in graphene nanoribbons", *Physical review letters*, 97(21), 216803.

[48] Barone V., Hod O. and Scuseria G. E. (2006), "Electronic structure and stability of semiconducting graphene nanoribbons", *Nano letters*, 6(12).

[49] Hou Z. and Yee M., (2007, August), "Electronic and transport properties of graphene nanoribbons", In 2007 7th IEEE Conference on Nanotechnology (IEEE NANO), pp. 554-557. IEEE, 2007.

[50] Sohbatzadeh Z., Roknabadi M. R., Shahtahmasebi N. and Behdani M. (2015), "Spin-dependent transport properties of an armchair boron-phosphide nanoribbon embedded between two graphene nanoribbon electrodes.", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 65, 61-67.

[51] https://en.wikipedia.org/wiki/Negative_resistance

[52] Pati R., McClain M. and Bandyopadhyay A., (2008). "Origin of negative differential resistance in a strongly coupled single molecule-metal junction device" *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 100, no. 24, pp. 2-5.

[53] Zhang C. X., He C., Xue, L., Zhang K. W., Sun L. Z. and Zhong J. (2012), "Transport properties of zigzag graphene nanoribbons with oxygen edge decoration.", *Organic Electronics*, 13(11), 2494-2501.

[۵۴] م. شعبانی، (۱۳۹۳). پایان نامه کارشناسی ارشد، "بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی

نانولوله‌های گالیوم نیتراید آلاییده با عناصر واسطه توسط رهیافت نظریه تابعی چگالی".

Abstract

One of the most important materials for electronic and spintronic devices are graphene nanoribbons that have attracted much attention. Compared to carbon nanotubes, graphene has a simple structure and it is also possible to prepare a lot easier. Graphene is of interest to the semiconductor industry because of the high electron mobility exhibited and it is planar. In this thesis, the electronic, magnetic and transport properties of armchair and zigzag graphene nanoribbons as well as the effects of doping impurities on the physical properties of nanoribbons will be examined.

At first, the electronic and magnetic properties of pure graphene nanoribbons and doped with transition metals (Cr, Mn and Fe) , have been investigated by the approach of density functional theory (DFT) and generalized gradient approximation (GGA) with SIESTA computational code. The results show that armchair graphene nanoribbons in its pure form are non-magnetic semiconductor, and zigzag graphene nanoribbons are magnetic metal in its pure form, doped with transition metal atoms with respect to the location of impurity can be converted them to the magnetic or non-magnetic semiconductors or non-magnetic or magnetic metal. Then, using non-equilibrium Green's function method (NEGF) and generalized gradient approximation (GGA) by computational TRANSIESTA code, transport properties of zigzag and armchair graphene nanoribbons were investigated. The results show that, in armchair graphene nanoribbons by changing the semiconductor electrodes to the metal electrodes within the micro-ampere current is achieved and in Zigzag graphene nanoribbons current is micro-amp range. The current and simultaneously the best filtering in armchair graphene nanoribbons examined in this study in the five structure and in zigzag graphene nanoribbons in the thirteen structure was observed. Also the NDR phenomenon was observed in some of the examined structures.

Key words: Zigzag graphene nanoribbon, Armchair graphene nanoribbon, spintronics, SIESTA code , Density functional theory (DFT) , TRANSIESTA code , Non-Equilibrium Green's Function(NEGF)



Shahrood University of Technology

Faculty of Physics

Nano physics

**Transport properties of grapheme nanoribbons: a DFT
investigation**

By

Parvin Zanganeh

Supervisor

Dr. Tayebeh Movlarooy

July 2016