

مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۲۱، شمارهٔ ۴، زمستان ۱۴۰۰

ساختار الکترونی و خواص رسانش الکتریکی ساختار دو بعدی آرسنین

فرهاد فردوسي و اسماعیل عبدالحسینی سارسری

دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

پست الكترونيكي: abdolhosseini@cc.iut.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۰٬۰۴/۰۱ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۴۰۰٬۰۶/۱۱)

چکیدہ

آرسنین یکی از اعضای گروه بزرگی از ساختارهای دو بعدی است که در پروژهٔ حاضر ساختار تکلایه و نانونوارهای آن را بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی مورد بررسی قرار دادهایم. در این بررسی پس از محاسبهٔ ساختار نواری تکلایه، اثر عرض را بر ساختار نواری نانونوارها از زاویهٔ پدیدهٔ محدود شدگی کوانتمی مورد بحث قرار دادهایم. نتایج اثر متفاوت پدیدهٔ محدود شدگی کوانتمی بر نقاط مختلف هر نوار در ساختار نواری را نشان میدهد که عامل گذار گاف غیر مستقیم به مستقیم در اثر کاهش عرض نانونوارهای آرمچیر است. همچنین خواص رسانندگی الکتریکی تکلایهٔ آرسنین از طریق محاسبهٔ تحرکپذیری حاملهای بار به دست آمده و اثر کرنش تک محوری ساختار بلوری بر آنها بررسی شده است. برای بررسی تحرکپذیری، از نقصهای ساختار بلوری صرف نظر شده و تنها پراکندگی فونونی بر مبنای رابطهٔ تاکاگی مد نظر قرار گرفته است. در این روند تمرکز بر دقت کمی مقادیر به دست آمده برای تحرکپذیری حاملهای بار نبوده و ناهمسانگردی موجود بین تحرکپذیری در دو راستای آرمچیر و زیگراگ محوریت بحث را به خود اختصاص داده است. نتایج محاسبات حاکی از ناهمانگردی موجود بین تحرکپذیری در دو راستای آرمچیر و زیگراگ محوریت بحث را به خود اختصاص داده است. نتایج محاسبات حاکی از ناهمسانگردی قابل توجه تحرکپذیری در دو راستای آرمچیر و زیگراگ محوریت بحث را به خود اختصاص داده است. نتایج محاسبات حاکی از ناهمسانگردی قابل توجه تحرکپذیری الکترونها و حفرهها در راستای آرمچیر و زیگراگ و تاثیر بسزای کرنش تک محوری ساختار بلوری بر آن است. همچنین تفاوت چشمگیری بین تحرکپذیری الکترونها

واژەھاي كليدى: تكلايە، نانونوار، ساختار نوارى، آرسنين، تحركپذيرى، ناھمسانگردى

۱. مقدمه

موضوع باعث آغاز تحقیقات گستردهای برای یافتن ساختارهای تک لایهٔ اتمی شد که گاف انرژی ذاتی دارند. در این مسیر ساختارهای تک لایهٔ لانه زنبوری خانوادهٔ کربن مانند سیلیسین، ژرمانین و استانین توجه زیادی را به خود جلب کردند [۳]. ساختار اتمی این مواد به دلیل ترکیب شدن اربیتالهای ³ و sp⁷ و به صورت خمیده است و در نتیجه گاف انرژی آنها با

1. Hybridization

۲. buckled

گرافین، که ساختار اتمی تک لایهٔ مسطح و لانه زنبوری دارد، یکی از جذاب ترین مواد عصر حاضر است [۱و۲]. این ماده از تحرک پذیری حامل های بار زیاد، هدایت گرمایی و همچنین مقاومت مکانیکی بالایی برخوردار است اما با این حال به طور ذاتی فاقد گاف انرژی است، که استفاده آن در ابزارهای الکترونیکی را با محدودیت ها و دشواری هایی مواجه می کند. این

جلد ۲۱، شمارهٔ ۴

اعمال میدان الکتریکی عمودی قابل کنترل است [۴ و ۵]. هرچند که این ساختارها به کمک زیرلایه به طور موفقیت آمیز ساخته شده است [۶ و ۷]، ساخت این ساختارها به صورت آزاد چندان سهل الوصول نیست. از دیگر ساختارهای مورد توجه که خواص منحصر به فردی دارد فسفرین است که با توجه به خواص ویژه آن گزینهٔ مناسبی برای استفاده در ترانزیستورهای اثر میدان است [٨]. آرسنین از لحاظ ساختار اتمی و خواص شباهت زیادی به فسفرین داشته و این یکی از دلایل مورد توجه قرار گرفتن آن است. همچنین تحقیقات صورت گرفته بر روی ساختار چروکیده' این ماده نشان دهندهٔ ناهمسانگردی در خواص رسانش گرمایی آن بوده است [۹]. همین موضوع یکی از انگیزههای پژوهش حاضر است. در این بررسی علاوه بر بررسی ساختار نواری تک لایه و نانونوارهای آرسنین، برخی خواص این ماده در دو جهت اصلی را محاسبه کرده و ناهمسانگردی. ای موجـود را مورد بررسی قرار دادهایم. در ابتدا خواص مکانیکی مانند ضریب الاستیک دو بعدی و پتانسیل تغییر شکل را در دو راسـتا محاسـبه کرده و در نهایت به کمک مقادیر به دست آمده برای جـرم مـؤثر الکترون و حفره، تحرک پذیری حامل های بار در دو راستا محاسبه شده است. در ادامه اثر کرنش ساختار در دو راستای اصلی را بـر خواص ذکر شده مورد بررسی قرار دادهایم.

۲. نتايج

در این پروژه برای محاسبات ابتدا به ساکن از بستهٔ محاسباتی کوانتوم اسپرسوا^۲ استفاده کردهایم. این بسته محاسبات را بر اساس نظریهٔ تابعی چگالی انجام داده اما بر خلاف بسته های محاسباتی تمامالکترونی، تنها به محاسبهٔ ترازهای لایهٔ ظرفیت می پردازد و پتانسیل نواحی نزدیک به هسته های (ناحیهٔ هسته) اتمی را با پتانسیل هایی که از پیش برای هر اتم محاسبه شدهاند جایگزین می کند. این پتانسیل ها، شبه پتانسیل^۳ نامیده می شوند و بر اساس روشی که برای تقریب پتانسیل ناحیهٔ هسته استفاده

کردهاند، انواع مختلفی دارند. یکی از انواع این شبه پتانسیل ها که در این پروژه از آن استفاده شده، شبه پتانسیل PAW است. همچنین در این تحقیق از تابعی PBE که بر اساس نوعی از تقريب شيب تعميم يافته (GGA) (براي محاسبة برهمكنش هاي تبادلی-همبستگی) طراحی شده است، استفاده کردهایم. در ابتدای محاسبات، مقادیر پارامترهای انرژی جنبشی قطع برای توابع موج (ecut wfc)، انرژی جنبشی قطع برای چگالی بار و يتانسيل (ecut rho) و تراكم نمونه برداري از ناحيهٔ اول بريلوئن (k-grid mesh) را بھینے کردہاہے. از آنجایی کے انرژی چسبندگی معمول ترین و اولین متغیری است که از لحاظ دقت همگرایی بررسی شده و (حمداقل در شروع محاسبات) معیار انتخاب پارامترهای محاسباتی قرار می گیرد، ما نیز به منظور همگرایی انرژی چسبندگی با دقتی از مرتبه eV-۰-۳e مقادیر بهینه پارامترهای ذکر شده را به ترتیب *۴۰۰Ry، ۴۰۰*و ۱×۱۰×۱۰ انتخاب کردیم (معمولا مقدار انرژی جنبشی قطع برای چگالی بار و پتانسیل را بین ۸ تا ۱۰ برابر انرژی جنبشی قطع برای توابع موج در نظر می گیرند). با این حال در روند محاسبات دقت همگرایی برخی متغییرهای مورد نظر را در موارد لزوم به صورت جداگانه بررسی کردهایم.

۱,۲. ساختار اتمی

آرسنیک که موضوع بررسی این پژوهش است دو ساختار اتمی کپهای تشکیل شده از صفحات اتمی دارد. در دو ساختار اتمی این ماده که ساختار پاکرد و باکلد نامیده میشوند، بر خلاف معروف ترین ساختار دو بعدی یعنی گرافین، کاملا در یک صفحه قرار نگرفتهاند. این سه نوع ساختار در شکل ۱ نشان داده شدهاند. در پروژهٔ حاضر قصد بررسی خواص ساختار پاکرد آرسنین را داریم که تاکنون در مقایسه با ساختار باکلد کمتر به آن پرداخته شده است (در ادامه جز در مواردی که خلاف آن ذکر شود، منظور ساختار پاکرد است). از آنجایی که بستهٔ محاسباتی کوانتوم اسپرسوا محاسبات را صرفاً برای ساختارهای تکرار شونده و تناوبی انجام میدهد، برای شبیه سازی شرایط ۷۹۴



۱. puckered

۲. Pseudopotential

۳. Quantum espresso

۴. Cohesive energy

V۹۵

ساختار الکترونی و خواص رسانش الکتریکی ساختار دو بعدی آرسنین



شکل ۱. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) سه نوع ساختار بلوری باکلد، مسطح و پاکرد.



شکل ۲. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (الف) ابریاختهٔ ساختار تک لایهٔ پاکرد آرسنین و (ب) تصاویر بخشی از ساختار تک لایهٔ پاکرد آرسـنین از سه نما.

> انزوای تکلایه از لایههای مجاور، ابریاختهای شامل ناحیهای تهی در نظر می گیریم به گونهای که به علت فاصلهٔ به وجود آمده بین لایههای تکرار شوندهٔ مجاور، بتوان از برهم کنش بین آنها صرفنظر کرد. معمولا در فواصل بیش از ۱۰ آنگستروم می توان برهم کنش های بین اتمی را ناچیز و قابل صرفنظر در نظر گرفت ولی ما در محاسبات از طرفی به جهت حصول اطمینان از کیفیت انزوای لایهها و از طرف دیگر به دلیل این که در روند پروژه به نقطهای در میانهٔ خلاً، که پتانسیل آن به عنوان مرجع ثابت پتانسیل قابل اتکا باشد، نیاز داریم طول ناحیهٔ خلاً را در حدود ۲۰ آنگستروم در نظر گرفتهایم (با توجه به ضخامت تقریبی ۲ آنگسترومی تک لایه، اندازهٔ ارتفاع ابریاخته را ۲۲/۴ آنگستروم انتخاب کردهایم). تصویر سه بعدی به همراه

تصویر مقطع افقی این ابریاخته (که شامل ۴ اتم آرسنیک است) در شکل ۲. الف نشان داده شدهاست.

همانطور که در شکل مشخص شده است مقادیر طول و عرض ابریاخته پس از واهلش ساختار ۴/۷۵۲ و ۳/۶۷۸ آنگستروم به دست آمده است. با تکرار این ابریاخته در جهتهای درون صفحهای (جهتهای x و y) بلور تکلایهٔ آرسنین ساخته می شود. تصاویر بخشی از این ساختار تکلایه از سه نمای x y و z در شکل ۲. ب قابل مشاهده است.

به همین ترتیب در مورد نانونوارهای آرسنین، ابریاخته را به گونهای در نظر گرفتیم که علاوه بر ناحیهٔ تهی در راستای z، دو ناحیهٔ تهی در دو طرف نانونوار داشته باشد تا با ایجاد فاصلهٔ

۱. Nanoribbon



جلد ۲۱، شمارهٔ ۴

عرضي كافي بين نانونوارهاي مجاور، شرايط يك نانونوار منزوی به خوبی شبیه سازی شود. نانونوارها را می توان بخش بریده شدهای از یک ساختار تک لایه دانست. با توجه به جهت برش ساختار تکلایه، دو نوع نانونوار به وجود میآید که بر اساس شکل لبه، نانونوارهای آرمچیر و زیگراگ نامیده می شوند. باید به این نکته توجه داشت که اتمهایی کـه در لبـهٔ نـوار قـرار دارند برخلاف دیگر اتمها، که به سه اتم آرسنیک متصل هستند، تنها با دو اتم آرسنیک پیوند دارند و این مسئله باعث میشود که این اتمها یک پیوند آزاد داشته باشند که بـه پیونـد آویـزان ا معروف است. وجود پیوندهای آویزان در لبهٔ نانونوارها باعث ناپایداری و واکنش پذیری بالای لبهها می شود. برای غلبه بر این مشکل و افزایش پایداری نانونوارها، معمولا به وسیلهٔ تکنیکهای آزمایشگاهی متفاوتی، اتمهایی از دیگر عناصر را به لبهٔ نانونوارها متصل میکنند. این عمل را خنثی سازی لبهها ً و اتمهای متصل شونده به لبهها را اتمهای خنثی کننده^۳ مینامند. لازم به ذکر است که در حالت کلی اتمهای خنثی کننده می توانند در مکانهای متفاوتی نسبت به لبهٔ نانونوارهای قرار بگیرنـد کـه منجر به تغییراتی در میزان پایداری و خواص نانونوار حاصله شود. اما با توجه به این که از طرفی هدف پروژهٔ حاضر تمرکز بر جزییاتی از این دست در خنثی سازی نانونوارها نیست و از طرف دیگر تغییرات ناشی از محل قرار گیری اتم های خنثی کننده معمولا چندان قابل توجه و اساسی نیست، معمولترین و محتمل ترین مکان را برای قرار گیری اتم های خنثی کننده انتخاب کردہایم. محتمل ترین محل قرارگیری اتم خنثی کنندہ در محل همان اتمی است که در ساختار تک لایه به اتم لبه متصل بوده است و جای آن در لبهٔ نانونوار خالی است.

نانونوارها می توانند عرضهای متفاوتی داشــته باشــند و آنهـا را بر اساس تعداد ابریاختهٔ تکلایه که در عرض خود دارند نامگــذاری کردهایم. در ادامه از اســامی n-AsxPANR و n-AsxPZNR

به ترتیب برای نامگذاری نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ آرسنین استفاده میکنیم. در این نامگذاری n تعداد ابریاختهٔ تـکلایـه در عرض نانونوار و x نوع اتم ختثی کننده است.

۲. ۲. ساختار الکترونی

ساختار نواری در واقع ترازهای انرژی بلوری برای نقاط مختلف منطقهٔ اول بریلوئن در فضای وارون است. اما مسیرهای خاصی در فضای وارون وجود دارد که از نقاط پرتقارن منطقهٔ اول بریلوئن عبور میکنند و معمولاً بخش مهمی از اطلاعات ساختار نواری را در بر دارند. از این رو اغلب ساختار نواری را در طول این مسیرها محاسبه و رسم میکنند. مسیر پرتقارن ابریاختهٔ پاکرد آرسنین، همان طور که در مقالات برای رسم ساختار نواری این ماده و مواد مشابه استفاده شده است، از نقاط ساختار نواری این ماده و مواد مشابه استفاده شده است، از نقاط نواری تک لایه آرسنین را در طول این مسیر محاسبه کردیم که در شکل ۳. ب قابل رویت است.

همانطور که در شکل دیده میشود ساختار نواری آرسنین گاف نواری غیرمستقیم به اندازهٔ ۷۹۲ eV، دارد. پایین ترین نقطهٔ نوار رسانش در نقطـهٔ Γ فضـای وارون و بـالاترین نقطـهٔ نوار ظرفیت در نقطهای از مسیر فضای وارون اتفاق می افتد کـه آن را نقطهٔ R نامیدهایم. با توجه به این که ساختار نواری تنها در راستاهایی از بلور که تکرار شونده هستند قابل رسم است، در هر نانونوار تنها یک مسیر در فضای وارون برای رسم ساختار نواری وجود دارد. بنابراین ساختار نواری را برای نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ به ترتیب در جهت های y و x (جه ت های طول هر نانونوار) محاسبه و رسم کردهایم. شکل ۴ و شکل ۵، به ترتیب ساختار نواری نانونوارهای آرسنین آرمچیر و زیگراگ خنثی شده با هیدروژن را برای عرض های مختلف (بـر حسـب تعداد ابریاختهٔ تکلایه در عرض نانونوار) نشان میدهد. در این تصاویر گاف نواری ساختارهای نواری با پیکان مشخص شدهاند (رنگ آبی و قرمز پیکانها به ترتیب به معنی مستقیم و غیرمستقیم بودن گاف نواری است). اندازه و نوع (از لحاظ مستقیم یا غیر مستقیم بودن) گاف نواری این

۱. Dangling bond

۲. Edge passivation

۳. Passivating atom

^{*.} Arsenene x Passivated Armchair NanoRibbon

۵. Arsenene x Passivated Zigzag NanoRibbon

ساختار الکترونی و خواص رسانش الکتریکی ساختار دو بعدی آرسنین



شکل ۳. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (الف) مسیر انتخاب شده در منطقهٔ اول بریلوئن فضای وارون و (ب) ساختار نواری تک لایهٔ آرسنین.



شکل ۴. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) ساختار نواری برای عرض مختلف نانونوار آرمچیـر آرسـنینِ خنثـی شـده بـا هیـدروژن (در جهـت طـول نانونوار).

Archive of SID.ir

۷۹۷

جلد ۲۱، شمارهٔ ۴



شکل ۵ (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) ساختار نواری برای عرض مختلف نانونوار زیگزاگ آرسنینِ ختمی شده با هیدروژن (در جهت طول نانونوار).

نوع گاف نواری		اندازه گاف نواری		عرض
نانونوار	نانونوار	نانونوار	نانونوار	نانونوار
زیگزاگ	آرمچير	زيگزاگ	آرمچير	
غير	-	1/419	1/308	4
مستقيم	مستقيم	eV	eV	2
غير		1/400	1/164	2
مستقيم	مستفيم	eV	eV	
غير	-	1/171	۱/۰۷۰	
مستقيم	مستفيم	eV	eV	^
غير	-	1/180	1/.74	
مستقيم	مستفيم	eV	eV	1.
-		1/•9•	۱/۰۰۱	١٢
مستفيم	مستفيم	eV	eV	
-	غير	1/9	•/9V1	١٤
مستعيم	مستقيم	eV	eV	
-	غير	1/998	./941	
مستقيم	مستقيم	eV	eV	רי
		1		

جدول ۱. اندازه و نوع گاف نواری نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ آرسنین خنثی شده با هیدروژن بر حسب عرض.

ساختارهای نواری در جدول ۱ آورده شده است. اندازهٔ گاف نواری هـر دو نـوع نـانونوار بـا کـاهش عـرض

افزایش می یابد و این اتفاق با توجه به اثرات محدودیت کوانتمی کاملا قابل انتظار است. اما با توجه به شکل های ۴ و ۵

٧٩٨

V99



شکل ۶. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (الف) مقطع افقی ابریاختهٔ نانونوار آرمچیر عرض ۸ خنثی شده با هیدروژن، شامل نامگذاری یکی در میان ردیفهای اتمی و (ب) نسبت چگالی حالات هر ردیف اتمی به مجموع چگالی حالات پنج ردیف نامگذاری شده (در نقاط مختلف ساختار نواری نانونوار (الف)).

نوارهای انرژی متعدد غیر تبهگن در ساختار نواری نانونوارها است. صحت این موضوع را میتوان به طور کیفی با بررسی چگالی حالات وابسته به بردار موج ⁽ نانونوارها تحقیق کرد.

با نگاه به شکل ۶. ب (که به عنوان مثال به یکی از نانونوارها پرداخته است) می توان دریافت که با وجودی که هر نوار انرژی به طور کامل به یک ردیف اتمی متعلق نیست، اما در هر نوار انرژی یک ردیف اتمی سهم بیشتری را نسبت به سایر ردیفها به خود اختصاص داده است.

می توان دید که بالاترین نوار ظرفیت و پایین ترین نوار رسانش ساختار نواری نانونوارها شباهت زیادی به بالاترین نوار ظرفیت و پایین ترین نوار رسانش ساختار نواری تکلایه دارن. می توان دید که ساختار نواری نانونوارها در مقایسه با بخش هم مسیر خود در ساختار نواری تکلایه (مسیر $X - T \ e \ Y - T$) دچار تغییرات دیگری نیز شده است. در مقایسه با ساختار نواری تکلایه در ساختار نواری نانونوارها، تعداد بیشتری نوار انرژی در بازهٔ انرژی یکسان وجود دارد که با عریض تر شدن نانونوارها تعداد آنها افزایش می یابد. علت این موضوع را می توان در وجود شرایط متفاوت برای اتمهای قرار گرفته در هر ردیف از عرض نانونوار (با توجه به فاصلهٔ متفاوتی که از لبه دارند) جستجو کرد. تبهگن شدن نوارهای آنها می شود. اما در نانونوارها وجود شرایط متفاوت برای ردیفهای مختلف اتمها باعث بر هم خوردن تبهگنی نوارهای اتمهای مربوطه می شود که نتیجهٔ آن حضور

1. K resolved DOS

جلد ۲۱، شمارهٔ ۴

نتایج به دست آمده از بررسی های چگالی حالات وابسته به بردار موج در توجیه این پدیده نیز می توانند تا حدودی مفید واقع شوند به شکلی که علت این شباهت را می توان به سهم نسبی بالای ردیف های مرکزی نانونوارها در این نوارهای انرژی مورد بحث نسبت داد. از آنجایی که ردیف های اتمی مرکزی نانونوارها (به علت فاصلهٔ بیشتر از لبه ها) شرایطی شبیه تر به شرایط اتم های قرار گرفته در تکلایه را تجربه می کنند می شود انتظار داشت که نوارهای انرژی وابسته به این اتم ها تا حدودی به نوارهای انرژی ساختار نواری تکلایه شبیه باشند. از طرف دیگر با توجه به نانوارها کمرنگ تر می شود به گونه ای که تغییر شکل بالاترین نوار ظرفیت باعث گذار گاف نواری غیر مستقیم به مستقیم برای نانونوارهای زیگزاگ در اثر کاهش عرض

هر چند که اثر گذاری عوامل متعددی در این تغییر شکل محتمل است، اما برای مثال با دقت در روند تغییرات بـالاترین نـوار ظرفیت نانونوار آرمچیر می توان حدس زد که اثر محدودیت کوانتمی عمده ترین عامل مؤثر در این تغییرات باشد. در اکثر مواقع از محدود شدگی کوانتمی به عنوان عامل افزایش دهنده گاف نواري در اثر كاهش اندازه ياد مي شود (همان طور كه در يروژه حاضر چنین است). اما افزایش گاف نواری تنها پیامد محدودیت کوانتمی نبوده و گاهی بررسی دقیقتر آن میتواند به درک و توضيح برخي ديگر از پديدهها كمك كند. با توجه به مباني پديـدهٔ محدودیت کوانتمی، چه در چاه کوانتمی کاملا آرمانی (چاه پتانسیل با عمق بینهایت) و چه در چاه کوانتمی اصلاح شده (چاه پتانسیل با عمق محدود) انرژی ترازهای گسسته با عکس جرم مؤثر (دست كم با عكس تواني از جرم مؤثر) متناسب است. همچنين همين شکل از وابستگی انرژی ترازها به جـرم مـؤثر (بـا توجـه بـه تـاثير جهت تقعر هر نقطه از نوار انرژی در علامت جرم مؤثر آن نقط.ه) به عنوان عامل بالا رفتن درهٔ نوار رسانش و پایین آمدن قلـه نـوار ظرفیت در اثر کاهش اندازهٔ ماده (و در نتیجه افزایش گاف نواری) مطرح شده است. اما مد نظر قرار دادن مقادیر جرم مؤثر در نقاط دیگر ساختار نواری (از جمله در نقاط مختلف بالاترین نوار

ظرفیت و پایین ترین نوار رسانش)، در کنار اثرات محدودیت کوانتمی، گاهی توضیح خوبی برای تغییر شکل نوارهای انرژی نیز ارائه میدهد. در ادامهٔ این روش بررسی را در مورد بالاترین نوار ظرفیت نانونوارهای آرمچیر به کار گرفتهایم.

همان طور که می دانیم جرم مؤثر نسبت داده شده به هر نقطه از ساختار نواری با مشتق دوم آن نقط ه از ساختار نواری بر حسب تغییرات بردار موج در جهت مورد نظر رابط هٔ عکس داشته و از رابطهٔ زیر به دست می آید:

(۱) $m^* = \frac{\hbar^{v}}{\partial^{v} E / \partial^{v} k}$, (۱) از رابطهٔ فوق برای به دست آوردن جرم مؤثر در جهت x به oecr $m_{x} = \frac{\hbar^{v}}{\partial^{v} E / \partial^{v} k_{x}}$ e r decor net for the construction of the construct

این تقریب همان تقریبی مرسومی است که افزایش اندازهٔ گاف نواری را به خوبی توضیح می دهد. با این حال توجه به نتایج بررسی چگالی حالات وابسته به بردار موج که نشان دهندهٔ سهم عمدهٔ اتمهای ردیفهای مرکزی نانونوارها (یعنی همان اتمهایی که شرایط نسبتا مشابهی با اتمهای ساختار تکلایه دارند) در نوارهای انرژی مورد بحث است، منجر به قابل اتکاتر به نظر رسیدن این تقریب (دست کم در تحلیلهای کیفی) می شود. در مورد نانونوارهای آرمچیر مهمترین مشخصهٔ تغییرات بالاترین نوار ظرفیت در مورد نانونوارهای آرمچیر مهمترین مشخصه ی تغییرات بالاترین نوار ظرفیت کاهش انرژی سریعتر نقطه R در مقایسه با نقطه Γ در اثر کاهش عرض نانونوار است. این موضوع منجر به مستقیم شدن گاف



شکل ۷. (الف) رویهٔ بالاترین نوار ظرفیت تک لایهٔ آرسنین در مش بندی منظمی از فضای وارون است و (ب) نمودار بـالاترین نـوار ظرفیـت در امتداد دو مسیر سبز و زرد رنگ.

۲,۳ تحر کپذیری حامل های بار تک لایهٔ آرسنین در این بخش قصد داریم تحر کپذیری حامل های بار تکلایهٔ آرسنین را در جهت های آرمچیر و زیگزاگ (جهت های x و y) مورد بررسی قرار دهیم. یکی از معتبرترین روش های محاسبهٔ تحر کپذیری حامل های بار (بدون در نظر گرفتن تاثیر نقص های بلوری) استفاده از رابطهٔ تاکاگی است [۱۰و ۱۱]. این رابطه به صورت زیر است:

$$\mu_{\gamma D} = \frac{e\hbar' C_{\gamma D}}{k_B T m^* m_d (E_l)^{\gamma}},\tag{(Y)}$$

در این رابطه C_{rD} ضریب کشسانی دو بعدی، E_l پتانسیل تغییر شکل و m_d و m_d به ترتیب جرم مؤثر در جهت حرکت حامل های بار و جرم مؤثر میانگین هستند. تحرک پذیری حامل ها بسته به این که در چه انرژی قرار داشته و چه بردار نواری در ساختار نواری نانونوارهای با عرض کمتر شده است. با توجه به شکل شماره ۷ می توان دید که در راستای محور x (در امتداد خطوط رنگی) نقطهٔ R تقعر بیشتری در مقایسه با نقطهٔ ۲ دارد. با توجه به رابطهٔ ۱، تقعر بیشتری نقطهٔ R در راستای x به معنی جرم مؤثر کوچک تر این نقطه در این راستا است. بنابراین همان طور که حدس زده بودیم اثر متفاوت است. بنابراین همان طور که حدس زده بودیم اثر متفاوت محصور شدگی کوانتمی بر نقاط مختلف ساختار نواری، علت گذار گاف نواری غیر مستفیم به مستقیم در اثر کاهش عرض در نانونوارهای آرمچیر است. این روش برای تحلیل و پیش بینی کیفی پیامدهای کاهش عرض بر قسمت های دیگر ساختار نواری نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ نیز قابل استفاده است که در این بخش به همین مقدار بسنده می کنیم.





شکل ۸ (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) نمودار تغییرات انرژی نقاط VBM و CBM ساختار نواری تکلایهٔ آرسنین بر حسب کرنش ساختار بلوری در دو راستای x و .y.

موجی داشته باشند متفاوت است، به گونهای که می توان به نقاط مختلف ساختار نواری تحرکپذیری متفاوتی نسبت داد. الکترونها در هر نوار انرژی تمایل به قرار گرفتن در کم انرژی ترین حالات ممکن آن نوار را دارند. در نتیجه در نیمه رساناها الکترونهای انتقال یافته به نوار رسانش در پایین ترین نقاط این نوار و حفرههای به وجود آمده در نوار ظرفیت در بالاترین نقاط این نوار تجمع می یابند. بنابراین در ادامه پارامترهای این رابطه را به صورت جداگانه بررسی کرده و سپس به کمک آنها تحرکپذیری را برای بالاترین نقطهٔ نوار ظرفیت (VBM) و پایین ترین نقطهٔ نوار رسانش (CBM)

پتانسیل تغییر شکل E_l معیاری از وابستگی انرژی نقاط مختلف ساختار نواری به تغییر شکل ساختار بلوری است و برای هر نقطه از ساختار نواری به کمک رابطهٔ زیر قابل محاسبه است. $E_l^i = \Delta V_i / (\Delta l / l_*),$ (۳)

در این رابطه *یا و Δ* به ترتیب طول اولیه و تغییر طول یاختهٔ واحد در راستای مورد نظر، Δ*V* تغییر انرژی نقطهٔ مشخصی از ساختار نواری (نقطهٔ *i*) و *E*^{*i*} پتانسیل تغییر شکل آن نقطه است. برای این منظور ابریاختهٔ تک لایهٔ آرسنین را یک بار در جهت x (جهت زیگزاگ در ساختار بلوری) و بار دیگر در جهت y (جهت آرمچیر در ساختار بلوری) به اندازهٔ نیم و یک درصد کشیده و فشرده کرده و با آزاد گذاشتن پارامتر شبکه در

جهت عمود بر جهت کشیدگی و فشردگی به کمک ابزار pw.x و محاسبات وی سی- رلکس'، واهلش شد. سپس با محاسبهٔ ساختار نواری برای ابریاختههای واهلش یافته، تغییرات انرژی نقاط CBM و VBM بر حسب کرنش در دو راستا قابل محاسبه است که نتایج در شکل ۸ قابل مشاهده است.

برای هر جهت، پتانسیلهای تغییر شکل با محاسبهٔ شیب بهترین خط گذرنده از نقاط مربوطه در نمودار فوق به دست می آید و مقادیر آن برای CBM و VBM به ترتیب برابر با ۳/۳۲ و ۷/۶۸ الکترون ولت است. دیگر پارامترهای مؤثر در تحرک پذیری حاملهای بار، جرم مؤثر در جهت حرکت حاملها * m و جرم مؤثر میانگین m_d هستند که مقادیر به دست آمده در جدول ۲ قابل مشاهده است.

آخرین پارامتری که برای محاسبهٔ تحرک پذیری مورد نیاز است ضریب کشسانی دو بعدی (C_{rD}) تکلایهٔ آرسنین در دو راستای x و y است که بر خلاف دو پارامتر قبلی به نقطهٔ مورد بررسی در ساختار نواری وابسته نیست. روش محاسبهٔ ضریب بر مبنای بررسی تغییرات انرژی کل ماده در اثر کشیدگی و فشردگی ساختار بلوری استوار است. با برازش دادن معادلهٔ درجه دو $H = a\epsilon^r + b$

 $C_{\gamma D} = \frac{\gamma a}{S_{\circ}},\tag{(f)}$

۱. vc-relax

۸۰۳

ارسنین در دو راستای x و y .	ى تكلاية	CBI ساختار نواری	ط VBM و M	جرم مؤثر نقاء	جدول ۲ . مقادير
-----------------------------	----------	------------------	-----------	---------------	------------------------

m_d	m_y^*	m_x^*	
\cdot /dyd m_e	۰/۲۳ m _e	$1/r \cdot m_e$	CBM
$\cdot/$ ۱۸ m_e	-•/•٩ me	-•/٣9 me	VBM

جدول ۳. مقادیر ضریب کشسانی به همراه مقادیر جرم مؤثر، پتانسیل تغییر شکل و تحرکپذیری نقاط VBM و CBM ساختار نـواری تـک لایـهٔ آرسنین در دو راستای x و y.

ت زیگزاگ)	جهت x (جهہ	جهت y (جهت آرمچير)		
CBM (الكترون)	VBM (حفر ہ)	CBM (الكترون)	VBM (حفر ہ)	
۳/۳۲ eV	۸/۲۲ <i>eV</i>	-•/٣^ eV	-Y/?^eV	پتانسيل تغيير شکل
۱/۲۰ m _e	-•/*?m _e	$\cdot / {}^{rr} m_e$	$-\cdot/\cdot {}^{\eta}m_e$	جرم موثر
•/37 m _e	•/1^ m _e	$\cdot/$ ۵۲ m_e	•/\^ m _e	جرم موثر میانگین
45/44 N/m	42/94N/m	$N \cdot / \Lambda \Delta N / m$	N ∕M	ضریب کشسانی دو بعدی
1.4% $cm^2/_{V\cdot s}$	$\frac{1}{cm^2}$	$\frac{1.96.7}{cm^2}$	$\frac{1}{cm^2}/_{V\cdot s}$	تحرک پذیری (در دمای اتاق)

واکنش بسیار متفاوتی در مقابل کشیدگی و فشردگی ساختار بلوری در دو راستای مختلف از خود نشان می دهد که باعث تفاوت چند برابری پتانسیل تغییر شکل این نقطه در دو راستای x و y شده است. در دو نقطهٔ مورد بررسی ساختار نواری جرم مؤثر نیز در راستای x حدودا ۴ الی ۵ برابر بزرگتر از جرم مؤثر در راستای y است. برایند همه این پارامترهای ناهمسانگرد در نهایت منجر به ناهمسانگردی تحرکپذیری شده که مقدار این ناهمسانگردی برای نوار ظرفیت بسیار قابل توجه است. واضح است که به علت توان دو پتانسیل تغییر شکل در رابطهٔ تحرکپذیری، این پارامتر نسبت به دیگر پارامترها نقش تعیین کنندهتری در تحرکپذیری حاملهای بار (چه از لحاظ اندازه و چه از لحاظ ناهمسانگردی) دارد.

۲. ۴. اثر کرنش بر ساختار الکترونی و تحرک پذیری حاملهای بار تک لایهٔ آرسنین اعمال کرنش یکی از روشهای شناخته شده برای ایجاد تغییر در خواص ساختارهای دو بعدی محسوب می شود. با این حال در این رابطه S مساحت سطح مقطع افقی ابریاختهٔ تکلایه در حالت بدون کرنش است. با استفاده از این روش، در جهت y ضریب کشسانی دو بعدی تکلایهٔ آرسنین ۱۰/۸۵ N/m و در جهت x برای کرنش مثبت (کرنش کششی) ۳۳/۳۴ N/m و برای کرنش منفی (کرنش فشاری) ۵۷/۹۴ N/m به دست می آید.

به کمک پارامترهای محاسبه شده، تحرکپذیری الکترونها (که به خواص CBM وابسته است) و حفرهها (که به خواص VBM وابسته است) برای تکلایهٔ آرسنین در دمای اتاق قابل محاسبه است. مقادیر به دست آمده برای تحرکپذیری و پارامترهای مؤثر در آن، که در بالا محاسبه شد، در جدول ۳ خلاصه شده است.

با نگاهی به این جدول ناهمسانگردی قابل توجهی را بین مقادیر برخی پارامترها در دو راستای x و y می توان دیـد. یکی از این ناهمسانگردیها در مورد رفتار کشسانی متفاوت تک لایهٔ آرسنین در مقابل کشش و فشار در دو راستای متعامد است بـه گونهای که نیروی لازم بـرای ایجـاد تغییـر طول مشخصی در راستای x حدودا ۴/۵ برابر نیروی لازم برای ایجاد همـین تغییـر طول در راستای y است. همچنین نقطهٔ CBM در ساختار نواری

جلد ۲۱، شمارهٔ ۴



شکل ۹. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (الف) و (ب) به ترتیب پتانسیل تغییر شکل در دو راستای x و y برای نقاط مختلف سـاختار نـواری تـک لایهٔ آرسنین. (مقادیر مربوط به هر رنگ در ستون رنگی کنار هر نمودار مشخص شده است) .

چگونگی تاثیر کرنش بر خواص همهٔ مواد یکسان نبوده و گاهی منجر به تأثیرات بسیار منحصر به فردی در برخی از ساختارهای بلوری می شود.

با توجه به نتایج بخش قبل و ناهمسانگردی قابل توجه مشاهده شده در مورد پارامترهای تکلایهٔ آرسنین، پاسخ ناهمسانگرد و جالب توجه خواص این ساختار به کشیدگی و فشردگی در راستاهای مختلف دور از ذهن نیست. در بخش قبل پتانسیل تغییر شکل نقاط VBM و CBM را به منظور محاسبهٔ تحرکپذیری حاملهای بار قرار گرفته در این نقاط مورد بررسی قرار دادیم. اما با توجه به تعریف پتانسیل تغییر شکل، این پارامتر همچنین میتواند دید خوبی از چگونگی واکنش ساختار نواری به کرنش ساختار بلوری به دست داده و به پیش بینی تغییرات آن کمک کند. بنابراین پتانسیل تغییر شکل را برای تمام نقاط نوارهای بالایی نوار ظرفیت و نوارهای پایینی نوار رسانش محاسبه کردیم که نتیجهٔ آن در شکل ۹ قابل

با توجه به رابطهٔ ۴، انرژی نقاط با پتانسیل تغییر شکل مثبت

در اثر کشیدگی ساختار بلوری افزایش و در اثر فشردگی ساختار بلوری کاهش مییابد و این روند در مورد نقاط با پتانسیل تغییر شکل منفی برعکس است. از این رو با نگاهی بـه شکل ۹ می توان پیش بینی کرد که در اثر میزان کافی کشیدگی ساختار بلوری در راستای x به علت پتانسیل تغییر شکل منفی در راستای x نوار رسانش در بـردار مـوج R و پتانسـیل تغییـر شکل مثبت در راستای x در بردار موج ۲، بردار موج کمینهٔ این نوار (CBM) از Γ به R تغییر یابد. هرچند که پتانسیل تغيير شكل جهت y اين نقاط هم علامت هستند اما به علت بزرگتر بودن مقدار آن در بردار موج R، همین اتفاق برای فشردگی ساختار بلوری در راستای y نیز محتمل است. به همین ترتیب در مورد نوار ظرفیت جابهجایی بردار موج بیشینه این نوار از R به Γ برای فشردگی ساختار بلوری در جهت x و کشیدگی ساختار بلوری در جهت y (هر دو به علت اختلاف در بزرگی پتانسیل تغییر شکل) قابل پیش بینی است. نتیجهٔ محاسبهٔ ساختار نواري تک لايهٔ کرنش يافته آرسنين تحت مقادير ۱ تا ۴ درصدی کرنش کششی و فشاری تک محوری در دو راستای x

٨٠۵

ساختار الکترونی و خواص رسانش الکتریکی ساختار دو بعدی آرسنین



شکل ۱۰. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (الف) ساختار نواری تک لایهٔ آرسنین برای مقادیر منفی کرنش (فشردگی) در راستای x و (ب) ساختار نواری تک لایهٔ آرسنین برای مقادیر مثبت کرنش (کشیدگی) در راستای x.



شکل ۱۱. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (الف) ساختار نواری تک لایهٔ آرسنین برای مقادیر منفی کرنش (فشردگی) در راستای y و (ب) سـاختار نواری تک لایهٔ آرسنین برای مقادیر مثبت کرنش (کشیدگی) در راستای y.

ظرفیت می تواند عامل تغییرات چشمگیر و ناگهانی جرم مؤثر مورد استفاده در محاسبهٔ تحرکپذیری باشد. برای مشخص شدن چگونگی این تغییرات مقادیر جرم مؤثر، پتانسیل تغییر شکل و تحرکپذیری را در دو راستای x و y مورد بررسی قرار دادهایم. در شکلهای ۱۲ و ۱۳ مقادیر محاسبه شدهٔ این پارامترها برای کرنش ۴- تا ۴ درصدی قابل مشاهده است. در نموارهای مربوط به پتانسیل تغییر شکل و جرم مؤثر مقادیر مربوط به بردار موج R و T (در کرنشهای مربع و دایره مربوط به بردار موج R و T (در کرنشهای مربع و دایره مشخص شدهاند. برای مقادیر مختلف کرنش، بردار موج نقاط مشخص شداد. برای مقادیر مختلف کرنش، بردار موج نقاط موج R و T جابهجا میشوند. بردار موج مربوط به WBM د موج R و T جابهجا میشوند. بردار موج مربوط به WBM در هر کرنش با دنبال کردن مسیر خطچین در نمودارها قابل تشخیص است. توجه به تغییر ناگهانی بردار موج مربوط به و ۷ به ترتیب در شکلهای ۱۰ و ۱۱ به نمایش در آمده است. مطابق با انتظار، نتایج محاسبهٔ ساختار نواری برای ساختارهای بلوری کرنش یافته تک لایهٔ آرسنین سازگاری خوبی را با پیشبینیهای متکی بر پتانسیل تغییر شکل نشان می دهد. بحث اخیر نکتهٔ جالب توجهی از نقطه نظر بررسی خواص تحرکپذیری در خود دارد. اگر علت تغییر بردار موج مربوط به کمینهٔ نوار رسانش (یا بیشنه نوار ظرفیت) تفاوت پتانسیل تغییر شکل کمینهٔ (یا بیشینهٔ) جدید و سابق است، با توجه به وابستگی تحرکپذیری حاملهای بار به پتانسیل تغییر شکل، همین تفاوت (احتمالا) میتواند عامل تغییرات قابل در اثر کرنش باید به نقش جرم مؤثر نیز دقت شود. هرچند در اثر اعمال کرنش به ساختار بلوری معمولا جرم مؤثر نقاط مختلف ساختار نواری دچار تغییرات ملایمی می شوند اما در واقع، تغییر بردار موج نقاط کمینهٔ نوار رسانش و بیشینهٔ نوار

جلد ۲۱، شمارهٔ ۴



شکل ۱۲. نمودارهای مقادیر جرم مؤثر راستاهای x و y، پتانسیل تغییر شکل راستاهای x و y و مقادیرتحرکپذیری حاملهای بار در راستاهای x و y مربوط به پایینترین نقطهٔ نوار رسانش (حفرهها) و بالاترین نقطهٔ نوار ظرفیت (الکترونها) بر حسب مقادر مختلف کرنش ساختار بلـوری در راستای x.

اثر اعمال کرنش به ساختار بلوری، تحرک پذیری تغییرات μ_x^{CBM} در زیادی را تجربه میکند. در مواردی مانند تغییرات μ_x^{CBM} در (۱% - % - % - % - %) که شاهد تغییر (۱% - % - % - % - %) که شاهد تغییر .

VBM و CBM (انتقال از R به Γ و برعکس) برای درک دلیل تغییرات ناگهانی مقادیر جرم مؤثر، پتانسیل تغییر شکل و در نهایت تحرک پذیری سودمند است. نتایج نشان میدهد که در

٨٠۶



شکل ۱۳. نمودارهای مقادیر جرم مؤثر راستاهای x و y، پتانسیل تغییر شکل راستاهای x و y و مقادیرتحرکپذیری حاملهای بار در راسـتاهای x و y مربوط به پایینترین نقطهٔ نوار رسانش (حفرهها) و بالاترین نقطهٔ نوار ظرفیت (الکترونها) بر حسب مقادر مختلف کرنش سـاختار بلـوری در راستای y.

مربوط به VBM و CBM رخ نداده، تغییرات ملایم اما تأثیر گذار پتانسیل تغییر شکل و جرم مؤثر منجر به افزایش چشمگیر تحرک پذیری شده است. کاهش قابل توجه m_y^* برای بالاترین نوار ظرفیت و پایین ترین نوار رسانش در بردار موج R بر اثر ناگهانی و قابل توجه تحرکپذیری هستیم، تغییر بردار موج مربوط به VBM و CBM مسئولیت اصلی را به عهده دارد. در μ_y^{vBM} ، μ_x^{CBM} ، μ_y^{CBM} ، μ_y^{vBM} ، μ_x^{cBM} ، μ_x^{cBM} ، μ_x^{vBM} در ($\cdot \, \ll \, \ll \, \ll \, \ll \, \ll \, (\varepsilon_x > \%)$), با وجودی که تغییری در بردار موج

آرسنیک لبه سهم ناچیزی دارند. این موضوع باعث می شود که

در ساختار نواری، نوارهای نزدیک به سطح فرمی در نانونوارها

و تک لایه شباهت قابل مشاهدهای داشته باشند. به عنوان

يديدهاي شناخته شده، اثرات محدود شدگي كوانتمي باعث

افزایش گاف نواری نانونوارها با کاهش عرض آنها میشود. اما

بررسی دقیق تر نشان داد که کیفیت متفاوت اثرات محدود

شدگی کوانتمی بر بخشهای مختلف ساختار نواری منجر به

گذار گاف غیر مستقیم به مستقیم در نانونوارهای آرمچیر با

كاهش عرض نيز مي شود. همچنين محاسبات تحرك پذيري،

تحرك پذيري بسيار بالاي الكترونها در پايين تـرين نقطـهٔ نـوار

رسانش در راستای y را نشان میدهد که مهم ترین عامل آن را

مي تـوان مقـدار بسـيار كوچـك پتانسـيل تغييـر شـكل مربوطـه

دانست. با وجودی که تحرکپذیری حفرهها در دو راستای x و

y تقریبا برابر است، ناهمسانگردی قابل توجهی در

تحرک پذیری الکترون ها در این دو راستا وجود دارد. از طرف

دیگر تفاوت بسیار زیادی بین تحرک پذیری الکترون ها و

حفرهها در راستای y وجود دارد که شرایط خوبی را برای

جداسازی مؤثر الکترون و حفره در موارد لزوم فراهم میآورد.

نتایج به دست آمده از ساختارهای کرنش یافته نشان میدهد که

کرنش ساختار بلوری با ایجاد تغییر در انحنای نوارهای انرژی

موجب تغییرات جرم مؤثر و در نتیجه تحرکپذیری می شود. از

طرف دیگر جابهجاییهای بردار موج مربوط به بیشینه انرژی

نوار ظرفیت و کمینه انرژی نوار رسانش در اثر کرنش، تغییرات

قابل توجه و ناگهانی را در تحرک پذیری حامل های بار موجب

میشوند. از مهمترین نتایج اعمال کرنش بر ساختار بلوری

مي توان به كاهش شديد ناهمسانگردي تحرك پذيري الكترون هـ ا

در کرنش ۴- درصدی در راستای x و افزایش شدید این

ناهمسانگردی در کرنش ۴– درصدی در راستای y اشاره کرد.

جلد ۲۱، شمارهٔ ۴

کشش ساختار بلوری در راستای x، در شکل ۱۰ الف مشهود است (به تیز شدگی تدریجی نوارهای ذکر شده در بردار موج R با افزایش کشش ساختار بلوری در راستای x دقت کنید).

در واقع محاسبهٔ دقیق رسانایی الکتریکی امری بسیار پیچیده است. این در حالی است که محاسبات فوق که بر اساس رابطـهٔ تاكاگی انجام شده شكل سادهای از جفت شدگی الكترون-فونون را در نظر گرفته است و بنابراین تنها تخمینی از حد بالای تحرک پذیری به دست میدهد. در شرایط واقعی عوامل خارجی بسیاری وجود دارد که باعث کاهش این مقادیر بیش از حد براورد شده می شود. با این وجود نتایج به دست آمده از رابطهٔ تاکاگی از نقطه نظر مقایسهٔ تحرک پذیری نسبی راستاهای مختلف به منظور بررسی ناهمساگردی های موجود به اندازهٔ کافی قابل اعتماد است[۱۲]. به جهت درک بهتر از ناهمسانگردی تحرکیذیری تک لایهٔ آرسنین در دو راستای x و y و اثرات کرنش ساختار بلوری بر آن، نسبت تحرک پذیری در دو راستا را برای مقادیر مختلف کرنش محاسبه کردیم که نتایج در شکل ۱۴ قابل مشاهده است. نتایج، وابستگی ناهمسانگردی تحرکپذیری حامل های بار به کرنش تک محوری ساختار بلوري را نشان ميدهـد كـه ايـن وابسـتگي بـراي الكتـرونهـا (CBM) بسيار شديد و قابل توجه است.

۳. نتیجه گیری

محاسبات نشان می دهد که اگرچه ساختار تک لایهٔ آرسنین گاف غیر مستقیم دارد، در اثر فشردگی بیش از ۲ درصدی در راستای x و کشیدگی بیش از ۳ درصدی در راستای y شاهد گذار گاف غیر مستقیم به مستقیم خواهیم بود. اتصال اتمهای هیدورژن به لبهٔ نانونوارها به خوبی اثر لبه را خنثی میکنند به شکلی که در نزدیکی سطح فرمی اتمهای هیدروژن و اتمهای

مراجع

- Cambridge (2012).
- 3. C Liu, H Jiang, and Y Yao, *Phys. Rev.* B **84** (2011) 195430.
- 4. N D Drummond, V Zolyomi, and V I Fal'ko, *Phys. Rev.* B **85** (2012) 075423.
- H Castro Neto, F Guinea, N M R Peres, K S Novoselov, and A K Geim, *Rev. Mod. Phys.* 81 (2009) 109.
- 2. M I Katsnelson,, "Graphene: Carbon in Two Dimensions", Cambridge University Press,

٨٠٩

- M Zeraati, S M Vaez Allaei, I Abdolhosseini Sarsari, M Pourfath, and D Donadio, *Phys. Rev.* B 93, 8 (2016) 85424.
- 10. S Takagi, A Toriumi, M Iwase, and H Tango, *IEEE Trans. Electron Devices*, **41**, 12 (1994) 2363.
- 11. J Qiao, X Kong, Z X Hu, F Yang, and W Ji, *Nat. Commun.* **5** 1 (2014) 4475.
- 12. R Fei and L Yang, Nano Lett. 14, 5 (2014) 2884.
- 5. M Ezawa, New J. Phys. 14 (2012) 033003.
- 6. P Vogt, P De Padova, C Quaresima, J Avila, E Frantzeskakis, M C Asensio, A Resta, B Ealet, and G Le Lay, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 155501.
- A Fleurence, R Friedlein, T Ozaki, H Kawai, Y Wang, and Y Yamada-Takamura, *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012) 245501.
- 8. L Li, Y Yu, G J Ye, Q Ge, X Ou, H Wu, D Feng, X H Chen, and Y Zhang, *Nat. Nanotechnol.* 9 (2014) 372.