

Geometrical effects on the thermoelectric properties of single/bilayer graphene junctions

Nadia Salami^{1,2}, Aliasghar Shokri^{2,}

¹Department of Physics, Yasooj Branch, Islamic Azad University, Yasooj, Iran

²Department of Physics, Payame Noor University (PNU), P.O.Box 19395-3697, Tehran, Iran

Received: 28.02.2019 Final revised: 09.03.2020 Accepted: 02.11.2020

Doi link: [10.22055/JRMBS.2020.16179](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2020.16179)

Abstract

In this work, using the tight-binding approximation and kinetic coefficient matrix, the electrical and thermoelectric properties of four different configurations of single/bilayer graphene junctions with armchair and zigzag edges are studied. These electrical transport properties include the electrical conductivity coefficients (G), thermal conductivity (κ_e), thermoelectric power (S) and figure of merit (ZT_e), which are suitable for designing thermoelectric devices. The numerical results show that the system can exhibit a metallic or semiconductive behavior with a special edge under different geometric conditions. This makes it possible to exhibit that the thermoelectric power and thermoelectric performance of a relatively large size under particular conditions. In addition, the role of carriers (electron or hole) is clearly demonstrated in terms of electrical and thermoelectric properties. The results may be useful in designing nanoelectronic devices based on two-dimensional layers.

Keywords: Thermoelectric properties, Seebeck coefficient, Bilayer graphene junctions, Tight-binding approximation

*Corresponding Author: aashokri@pnu.ac.ir



اثرات هندسی بر روی خواص ترموالکتریکی در اتصالات گرافینی تک لایه‌ای/دو لایه‌ای

نادیا سلامی¹، علی اصغر شکری^{2*}

¹گروه فیزیک، واحد یاسوج، دانشگاه آزاد اسلامی، یاسوج، ایران

²گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه پیام نور، ص. پ. 19395-3697، تهران، ایران

دریافت: 1397/12/09 ویرایش نهایی: 1398/12/19 پذیرش: 1399/08/12

Doi link: [10.22055/JRMBS.2020.16179](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2020.16179)

چکیده

در این مقاله با استفاده از تقریب بستگی قوی و ماتریس ضرایب جنبشی، خواص الکتریکی و ترموالکتریکی چهار پیکربندی مختلف از نانونوار گرافینی اتصالات تک‌لایه‌ای/دو لایه‌ای با لبه‌های صندلی شکل و زیگزاگی مطالعه می‌شود. این خواص ترابرد الکتریکی شامل ضرایب رسانش الکتریکی (G)، رسانندگی گرمایی (K_e)، توان ترموالکتریکی (S) و شاخص شایستگی (ZT_e) می‌باشند که برای طراحی ادوات ترموالکترونیکی مناسب هستند. نتایج محاسبات عددی نشان می‌دهد که تحت شرایط هندسی مختلف سیستم می‌تواند رفتار فلزی و نیم‌رسانایی با گاف قابل تنظیم از خود نشان دهد. این باعث می‌شود که توان ترموالکتریکی و کارایی ترموالکتریکی مختلف و نسبتاً بزرگی تحت شرایط خاص اتصالات از خود نشان دهند. همچنین نقش نوع حامل‌ها (الکترون یا حفره) نیز در ایجاد خصوصیات الکتریکی و ترموالکتریکی به‌وضوح نشان داده می‌شود. نتایج این مقاله ممکن است در طراحی ادوات نانوالکترونیکی مبتنی بر لایه‌های دو بعدی مفید باشد.

کلیدواژگان: خواص ترموالکتریکی، توان ترموالکتریکی، اتصالات دو لایه‌ای گرافین، تقریب بستگی قوی

مقدمه

سولفاید، بورن نیتراید و غیره تولید نمایند به طوری که خواص منحصر به فردی را نسبت به حالت توده از خود نشان می‌دهند.

در این بین، گرافین یکی از آلوتروپ‌های کربن [2] به دلیل داشتن خواص فوق‌العاده در رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی، چگالی بالا و تحرک‌پذیری حامل‌های بار الکتریکی، رسانندگی اپتیکی [3] و خواص مکانیکی [4] به ماده‌ای ویژه تبدیل شده است. از جمله خواص آن، خواص الکتریکی و ترموالکتریکی می‌باشد که در این مقاله به

فناوری نانو به‌عنوان یک علم میان رشته‌ای، یکی از دانش‌های کاربردی است که معمولاً در ساختارهای با ابعاد کمتر از یک میکرومتر (حدود 1 تا 100 نانومتر) بررسی می‌شوند. اهداف آن دست‌کاری مواد در مقیاس اتمی و تولید مواد و قطعات، به‌وسیله کنترل آنها در سطح اتم‌ها و مولکول‌ها است [1]. بر همین مبنا و با گسترش روزافزون دستگاه‌های ساخت و اندازه‌گیری با دقت بالا، محققین توانستند ساختارهای دوبعدی مانند گرافین، فسفرین، سیلیسین، ژرمنین، مولیبدن دی

* نویسنده مسئول: aashokri@pnu.ac.ir

و خواص الکترونی، شیمیایی و مغناطیسی متفاوتی نسبت به حالت توده، برحسب نوع و اندازه این مرزها، می‌شوند [7]. به‌طور کلی ساختار لبه‌ها در این نانونوارها می‌تواند به‌صورت صندلی دسته‌دار، زیگزاگ و یا ترکیبی از این دو باشد. وجود این الگوهای لبه‌ای همچنان که پهنای نوارها افزایش می‌یابد، سبب تغییر پیوسته خواص از نیم‌رسانا به شبه‌فلز (گذار فاز) می‌شود [8].

با توجه به خواص الکتریکی و ترموالکتریکی گرافین، کاربردهای زیادی برای آن به‌خصوص در ادوات الکترونیکی مانند ترانزیستورها پیش‌بینی کرده‌اند. برای این کار نیاز است که بر روی گاف نواری گرافین کنترل داشته باشیم [9 و 5-4]. به‌عنوان مثال، با اعمال میدان الکتریکی خارجی عمود بر صفحه دولایه‌ای گرافین، به‌کارگیری اتصالات (ابرشبکه) گرافین تک‌لایه‌ای/دولایه‌ای، انباشت ناخالصی، ایجاد نانو حفره (پاد نقطه) در آن و غیره می‌تواند در گرافین گاف نواری ایجاد نمایند [10 و 11].

در این مقاله، با توجه به اهمیت علم ترمودینامیک در ادوات الکترونیکی مبتنی بر گرافین، خواص الکتریکی و ترموالکتریکی نانونوارهای گرافین در اتصالات تک‌لایه‌ای/دولایه‌ای با پیکربندی‌های مختلف را بررسی می‌کنیم. ترتیب‌بندی مقاله به این صورت است: بعد از مرور مختصری بر پیشرفت‌های اخیر بر روی گرافین و نانونوار آن، فرمول‌بندی مورد نظر برای بررسی خواص ترابرد الکتریکی و گرمایی نانو ساختار مبتنی بر آن بررسی می‌شود. از روی آن‌ها، ضرایب مختلف شامل رسانش الکتریکی (G)، رسانایی گرمایی (k_e)، توان ترموالکتریکی (S) و شاخص شایستگی (ZT_e) استخراج و برای چهار پیکربندی مقایسه می‌شوند. این

آنها می‌پردازیم. گرافین صفحه‌ای متشکل از اتم‌های کربن با ساختار شبکه‌ای لانه زنبوری است که به دلیل داشتن خواص رسانندگی، امروزه بسیار مورد توجه قرار گرفته است. طول پیوند کربن-کربن در گرافین در حدود 0/142 نانومتر است. تک‌لایه گرافین، ساختار زیربنایی برای ساخت نانو ساختارهای کربنی است که از روی هم قرار گرفتن همین تک‌لایه گرافین، گرافین دو لایه‌ای، چند لایه‌ای و در نهایت توده سه بعدی گرافیت تشکیل می‌شود. برهم‌کنش این صفحات از نوع واندروالسی و فاصله بین صفحات 0/335 نانومتر است. لایه‌های گرافینی از 5 تا 10 لایه را گرافین کم لایه و بین 20 تا 30 لایه را گرافین چند لایه یا گرافین ضخیم می‌نامند. گرافین خالص تک‌لایه خاصیت شبه‌فلزی (گاف نواری صفر) نشان می‌دهد [5]. در گرافین طیف حامل‌ها شبیه به طیف فرمیون‌های دیراک بدون جرم می‌باشد [6].

خصوصیات گرافین به‌طور مستقیم به تعداد لایه‌های گرافین موجود بستگی دارد. با برش صفحه گرافین به‌صورت یک نوار باریک و محدود کردن الکترون‌ها در یک نوار، گاف نواری در ساختار الکترونی گرافین ایجاد می‌شود (بعضی اوقات به آن مهندسی گاف نواری گفته می‌شود). در این حالت، حامل‌های بار الکتریکی در یک سیستم شبه یک بعدی محدود می‌شوند. از طرفی دیگر، وجود شرایط مرزی و محدودیت در مرزها سبب محدودیت کوآتومی برای تابع موج الکتریکی می‌شود. این محدودیت کوآتومی در طیف انرژی، گاف ایجاد می‌کند. نانونوارهای گرافینی در واقع بلورهای کربنی یک بعدی با هیبریداسیون sp^2 و در مرزهای لبه‌ها¹ اتم‌های کربنی قرار گرفته‌اند که دارای پیوندهای آویزان² هستند. این نوارهای باریک و کشیده کربنی حاوی لبه‌هایی هستند که سبب ایجاد حالت‌های لبه‌ای

² Dangling Bonds¹Edges

به‌واسطهٔ اختلاف ولتاژ بایاس ΔV و اختلاف دما ΔT جاری می‌شوند به‌صورت معادلهٔ ماتریسی [12]

$$\begin{pmatrix} J_e \\ J_Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q^2 L_0 & \frac{q}{T} L_1 \\ q^2 L_1 & \frac{1}{T} L_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta V \\ \Delta T \end{pmatrix}, \quad 2$$

نوشته می‌شوند. در اینجا، L_n با $(n=0-2)$ ضریب جنبشی است که با رابطهٔ ذیل داده می‌شود.

$$L_n = -\frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE T(E) (E - \mu)^n \frac{\partial f}{\partial E} \quad 3$$

در این رابطه، $T(E)$ تابع احتمال عبوردهی الکترون فرودی با انرژی E است. با داشتن احتمال عبوردهی، ضرایب جنبشی مختلف با انتگرال‌گیری بر روی انرژی به‌دست می‌آید. پس از آن می‌توان سهم الکترونی را در ضریب رسانش الکتریکی $(G = q^2 L_0)$ و ضریب رسانش گرمایی به‌صورت

$$\kappa_e = \frac{1}{T} \left(L_2 - \frac{L_1^2}{L_0} \right). \quad 4$$

محاسبه نمود. همچنین، توان ترموالکتریکی (ضریب سبیک) که نسبت میدان الکتریکی $(\Xi = -\Delta V)$ به اختلاف دما است وقتی که جریان الکتریکی صفر باشد، با رابطهٔ زیر داده می‌شود:

$$S = -\frac{\Delta V}{\Delta T}. \quad 5$$

با استفاده از معادلهٔ ماتریسی 2 و رابطهٔ 5، ضریب توان ترموالکتریکی می‌تواند براساس رابطهٔ زیر محاسبه شود:

$$S = -\frac{L_1}{qTL_0}. \quad 6$$

علامت توان ترموالکتریک در یک ساختار می‌تواند نوع حامل بار را تعیین کند. وقتی که حامل بار الکترون‌ها هستند، گرادیان دما و میدان الکتریکی، در جهت‌های

نتایج و توصیف آنها در بخش سوم آمده است. در بخش آخر مقاله جمع‌بندی و نتیجهٔ کلی ارائه می‌شود.

کارهای محاسباتی

در این قسمت، فرمولبندی نظری بر روی خواص ترموالکتریکی ساختار مبتنی بر تک‌لایه‌ای و همچنین دولایه نانووار گرافینی (چهار پیکربندی مطابق شکل 1) بررسی می‌کنیم. برای این کار یک وسیلهٔ متناهی که به‌وسیلهٔ دو الکتروند نیم‌بی‌نهایت محدود شده است را در نظر می‌گیریم که در آن جریان الکتریکی و جریان گرمایی به‌ترتیب به‌دلیل اختلاف ولتاژ و اختلاف دما بین دو الکتروند ایجاد می‌شود. برای سادگی از اثرات الکترون-فونون و اثرات اسپینی صرف‌نظر می‌کنیم. هنگامی که در دو طرف دستگاه ترموالکتریکی (شکل 2) اختلاف دما (ΔT) و اختلاف ولتاژ (ΔV) وجود داشته باشد حامل‌های بار از انتهای منطقهٔ گرم به انتهای منطقهٔ سرد می‌روند و جریان الکتریکی بوجود می‌آید. در سیستم‌های ترموالکتریکی شارش بار به‌وجود میدان الکتریکی و شارش گرما به گرادیان دما وابسته است. با استفاده از معادلهٔ انتقال نیمه‌کلاسیک بولتزمان، جریان بار و جریان گرمایی به‌صورت [12]

$$J = q \int v(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d\mathbf{k},$$

$$J_Q = q \int v(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) d\mathbf{k}. \quad 1$$

محاسبه می‌شوند که در آن $q = |e|$ بار الکتریکی الکترون، $g(\mathbf{k})$ چگالی حالت‌ها، $v(\mathbf{k})$ سرعت حامل‌ها، $f(\mathbf{k}) = [1 + \exp(\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu))]^{-1}$ تابع توزیع اشغال حامل‌ها در نمونه T ، $\beta = 1/k_B T$ ، دما و μ پتانسیل الکتروشیمیایی الکترونها می‌باشند. در رژیم خطی، جریان‌های الکتریکی و گرمایی که از ساختار مورد نظر از الکتروند چپ به الکتروند راست

نانونوار صندلی شکل با تعداد یاخته های (خط های دوتایی، N_d) 14 نشان داده شده است، که به ترتیب دارای پهناهای 1,563، 1,619 نانومتر هستند.

بحث و نتیجه گیری

در این بررسی مطابق شکل 1، چهار پیکربندی مبتنی بر تک لایه و دولایه نانونوار گرافینی مورد مطالعه قرار گرفته است. پیکربندی C1 متشکل از دولایه نانونوار گرافینی ایده آل در هر سه ناحیه (الکترودهای راست و چپ و ناحیه میانی) با ساختار و پهنای مشابه است. پیکربندی C2 شامل یک دو لایه ای در ناحیه میانی است به گونه ای که لایه بالایی (یا لایه پایینی) به هر دو الکترودهای راست و چپ متصل است. پیکربندی C3 مشکل از دولایه ای نانونوار گرافینی است که لایه بالایی به الکترودهای راست و چپ اما لایه پایینی به الکترودهای راست متصل است. در این حالت، حامل ها می توانند تنها از طریق برهم کنش های عمودی از طریق دولایه ای نانونوار گرافینی عبور کنند (به آن ترانزیستور گسیل میدانی تونل زنی¹ TFET نیز گفته می شود). ناحیه میانی پیکربندی C4 از تک لایه نانونوار گرافینی تشکیل شده است در حالی که الکترودهای راست و چپ از دولایه ای نانونوار گرافینی تشکیل شده اند.

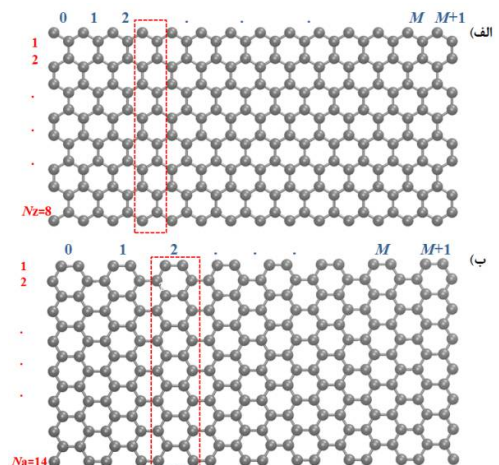
در این مقاله، به منظور تحقیق و طراحی ادوات ترموالکتریک مبتنی بر نانونوارهای گرافینی با کارایی بالا محاسبات عددی انجام شده است. در این راستا، خواص ترموالکتریک از قبیل رسانندگی الکتریکی، سهم الکترونی رسانندگی گرمایی، توان ترموالکتریکی یا ضریب سیبک و شاخص شایستگی در هر یک از چهار پیکربندی معرفی شده با دو نوع پایانه متفاوت زیگزاگی و صندلی شکل در لایه محاسبه می شوند. با بردن تک لایه گرافین دو بعدی در دو جهت خاص و

مختلف قرار می گیرند و در این حالت علامت توان ترموالکتریک مثبت می شود.

بازده حرارتی یک ماده (تبدیل انرژی حرارتی به انرژی الکتریکی)، از طریق یک کمیت بدون بعد که به صورت شاخص شایستگی (ZT_e) شناخته شده، تعیین می شود. کارایی یا بازده ترموالکتریکی یخچال ها و ژنراتورها با افزایش ZT_e بالا می رود، بنابراین تلاش های زیادی برای یافتن ساختارهای مناسبی از نیم رساناها، با ZT_e بالا انجام شده است [13]. شاخص شایستگی را به صورت

$$ZT_e = \frac{GS^2}{\kappa_e} T. \quad 7$$

تعریف می کنیم که توسط سه پارامتر رسانایی الکتریکی، توان ترموالکتریکی و رسانش گرمایی تعیین می شود. ضریب عبوردهی وسیله در رابطه 2 با استفاده از روش بستگی قوی تک نواری بر اساس فرمالیزم تابع گرین در رژیم همدوس و با در نظر گرفتن تقریب برهم کنش های نزدیکترین همسایه انجام شده است [14-15].



شکل 1. نمای طرحواره نانونوارهای الف: زیگزاگی و ب: صندلی شکل. نانونوار زیگزاگی با تعداد یاخته های (خط های زیگزاگی، N_z) 8 و

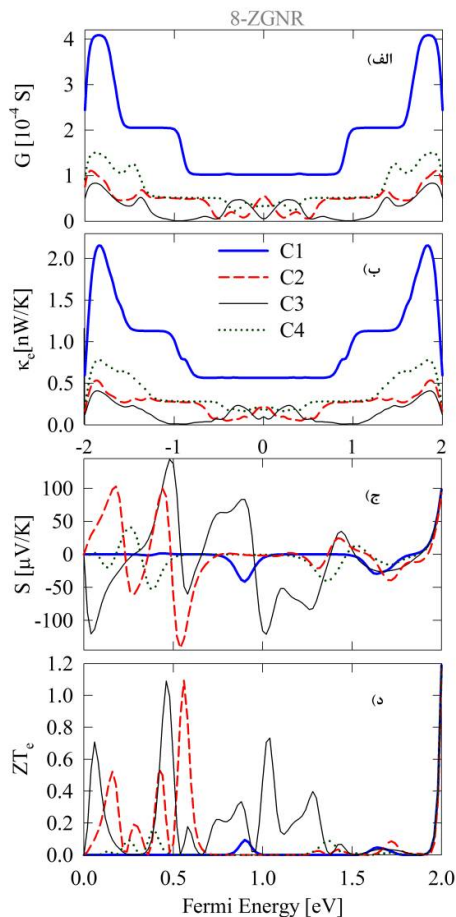
¹ Tunneling field emission transistor (TFET)

الکترون‌ها در پیکربندی C3 به‌عنوان پیکربندی ویژه در این مطالعه، تنها از طریق برهم‌کنش‌های عمودی ضعیف و اندروالسی صورت می‌گیرد. رسانش الکتریکی در این پیکربندی در اغلب انرژی‌های فرودی کمتر از دو پیکربندی دیگر C2 و C4 است. نکته جالب در مورد این ساختار این است که مقدار رسانش الکترون‌ها به‌طول ناحیه میانی بستگی دارد به‌نحوی که به‌نظر می‌رسد، با افزایش طول ناحیه میانی، مقدار رسانش الکترون‌ها در این پیکربندی برخلاف سایر پیکربندی‌ها افزایش می‌یابد.

سهم الکترونی رسانندگی گرمایی در پیکربندی‌های C2، C3 و C4 نسبت به پیکربندی C1 تا حدی مشابه رسانندگی الکتریکی است. در منحنی‌های رسانش الکتریکی و گرمایی در هر چهار پیکربندی، تقارن الکترون-حفره مشاهده می‌شود. علاوه بر این، نتایج نشان می‌دهند که توان ترموالکتریکی (یا ضریب سیبک) به‌شدت به انرژی پتانسیل شیمیایی در سیستم‌ها بستگی دارد. به‌خوبی مشخص است، که یک اختلاف دما در دو الکتروود راست و چپ در حالت پایا منجر به اختلاف پتانسیل شیمیایی در دو الکتروود و در نتیجه باعث ایجاد شار پخشی حامل‌ها می‌شود. بنابراین غلظت حامل‌ها در دو الکتروود سرد و گرم تغییر می‌کند و باعث ایجاد یک ولتاژ ترموالکتریک می‌شود.

سه نانونوار گرافینی در نظر گرفته شده در این مطالعه دارای پهناهای تقریباً مشابه اما خواص فیزیکی متفاوتی دارند. محاسبات عددی نشان می‌دهد که اتصالات تک‌لایه و دولایه‌ای نانونوار زیگزایگی مورد مطالعه، رفتار فلزی با رابطه پاشندگی سهموی از خود نشان می‌دهند. جرم مؤثر حامل‌ها در دومین نوار اطراف تراز فرمی در تک‌لایه این نانونوار زیگزایگی $0,155m_0$ تخمین زده شده است. در مقابل نانونوار صندلی‌شکل با پهنای $1,619$ نانومتر خاصیت فلزی از خود نشان می‌دهد که سرعت فرمی حامل‌های نسبییتی فاقد جرم تک‌لایه و همچنین دولایه $2,984 \times 10^5$ متر بر ثانیه به‌دست آمده است. این در حالی است که تک‌لایه نانونوار آرمچیری با پهنای $1,743$ نانومتر شبیه یک نیم‌رسانا با اندازه گاف نواری حدود $0,6$ الکترون‌ولت رفتار می‌کند. این رفتار پیش‌بینی می‌کند که حامل‌های بار نسبییتی دارای جرم $0,014m_0$ می‌باشند [15]. در شکل 3، خواص ترموالکتریکی نانونوار زیگزایگی با پهنای $1,563$ نانومتر در چهار پیکربندی معرفی شده C1، C2، C3 و C4 مطابق شکل 2 در دمای 300 کلوین ارائه شده است. در هر چهار پیکربندی خاصیت رسانایی مشاهده می‌شود. همان‌طوری که انتظار می‌رود رسانش الکتریکی تا حد زیادی در ساختارهای C2، C3 و C4 نسبت به ساختار C1 کاهش می‌یابد. دلیل این کاهش می‌تواند به‌صورت زیر توضیح داده شود: الکترون‌ها در یک نوار انرژی معین در یک ساختار دوره‌ای ایده‌آل مانند C1 در نتیجه تداخل سازنده می‌توانند عبور کنند. در حالی که اگر تناوب سیستم در سه ناحیه مانند C2، C3 و C4 حفظ نشود، رسانش الکترون‌ها کاسته خواهد شد. اگر چه که رسانندگی الکتریکی پیکربندی C1 در دمای نزدیک به صفر کلوین رفتار پله‌گونه خواهد داشت که افزایش دما باعث می‌شود از این رفتار تا حدی انحراف پیدا کند. انتقال

متفاوت و قابل تنظیمی را می‌توان انتظار داشت. از طرفی دیگر، انرژی پتانسیل شیمیایی به وسیله آرایش، ولتاژ اعمالی و همچنین دمای اعمالی می‌تواند تغییر کند. به طور مثال، آرایش نوع گیرنده¹ سیستم باعث می‌شود که پتانسیل شیمیایی به سمت نوار ظرفیت جابه‌جا شود که این منجر به پتانسیل شیمیایی منفی می‌شود. وقتی $\mu < 0$ و $\mu > 0$ ، توان ترموالکتریکی مطابق با معادله 4 و توضیحات بالا مثبت (منفی) می‌شود و در مواد نیمه‌هادی به مقادیر نسبتاً بزرگ حول لبه نوار ظرفیت (رسانش) می‌رسد. یعنی علامت توان ترموالکتریکی می‌تواند تعیین کننده نوع حامل‌ها باشد. در این ساختارها، مقدار قدرمطلق بیشینه توان ترموالکتریکی وقتی ظاهر می‌شود که پتانسیل شیمیایی در فاصله‌ای از مرتبه چند $k_B T$ از لبه گاف باشد [20]. به طور کلی، توان ترموالکتریکی غیرصفر تنها در نواحی ظاهر می‌شود که شیب منحنی رسانش غیرصفر باشد. همچنین، تغییر سریع رسانش منجر به توان ترموالکتریکی بزرگی می‌شود. به همین دلیل در ساختار C1 که رسانش در بازه انرژی حدوداً بین [1 و -1] الکترون‌ولت ثابت باقی می‌ماند، توان ترموالکتریکی در این محدوده صفر است و همچنین مشاهده می‌شود در محدوده چند $k_B T$ در انرژی‌هایی که رسانش تغییرات قابل توجهی داشته است، توان ترموالکتریکی دارای مقدار قابل توجهی است. در همین راستا، از آنجا که رسانش الکتریکی در پیکربندی‌های C2 و C3 تغییرات بیشتری نسبت به سایر ساختارها دارد، بنابراین محاسبات عددی ما پیش‌بینی می‌کنند، که توان ترموالکتریکی در این پیکربندی‌ها، مقدار بیشتری به خصوص در اطراف تراز فرمی دارد، که به طور عددی مقدار آن به 141/93- میکروولت بر کلون و 143/96 میکروولت بر کلون در آرایش نوع دهنده



شکل 3. وابستگی الف: رسانایی الکتریکی ب: سهم الکترونیکی رسانندگی گرمایی، ج: توان ترموالکتریکی و د: سهم الکترونیکی شاخص شایستگی (کارایی ترموالکتریکی) برحسب تابعی از انرژی پتانسیل شیمیایی در پیکربندی‌های مختلف مبتنی بر نانونوار زیگزاکسی گرافینی به پهنای 1.563 نانومتر.

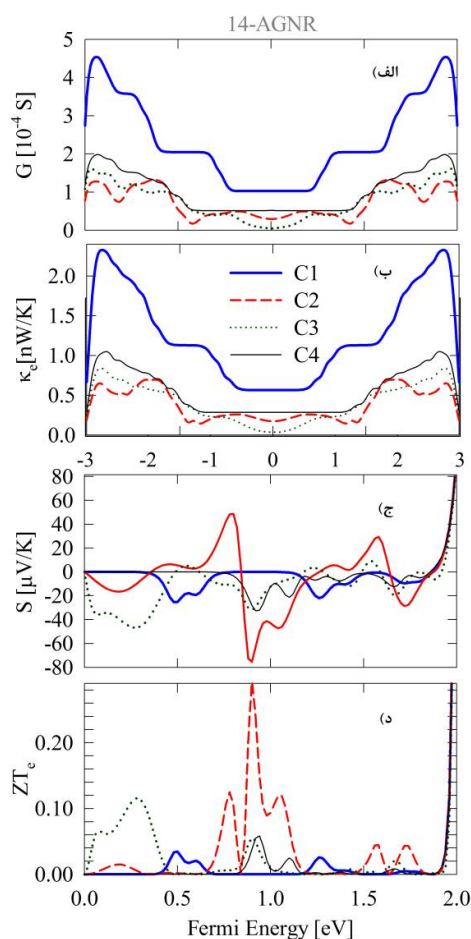
تمام این رفتارها وابسته به چگالی حالت‌های حامل‌ها است. از این رو ضریب سیبک می‌تواند از طریق اعمال میدان الکتریکی خارجی [17]، آرایش جانشینی [18]، آرایش جذب شیمیایی [18]، آرایش از طریق جای‌تهی، کرنش [19] و غیره تنظیم شود. از آنجا که سیستم‌های پیشنهاد شده دارای چگالی حالت‌های به شدت وابسته به انرژی و متنوعی هستند، بنابراین توان ترموالکتریکی

¹ p-type doping

همچنین با ارزش است که به این موضوع اشاره شود که در سیستم‌هایی که تقارن الکترون-حفره وجود دارد (ندارد)، حول انرژی فرمی صفر (حول مرکز گاف-نواری)، ضریب سی بک پاریده فرد دارد. در شکل 3د، پارامتر بی بعد شاخص شایستگی هر چهار ساختار برحسب انرژی فرمی رسم شده است. از شکل دیده می‌شود که نانونوار زیگزاگی به پهنای 1/563 نانومتر در پیکربندی‌های C2 و C3 دارای بیشترین کارایی ترموالکتریکی (البته با احتساب سهم الکترونیکی به تنهایی) در مقادیر کوچک انرژی فرمی است. درحالی‌که همان‌طور که از محاسبات ضریب پیکربندی C1، در انرژی پتانسیل شیمیایی حدود کمتر از 0.7 الکترون‌ولت کارایی تبدیل انرژی حرارتی به انرژی الکتریکی و برعکس را ندارد.

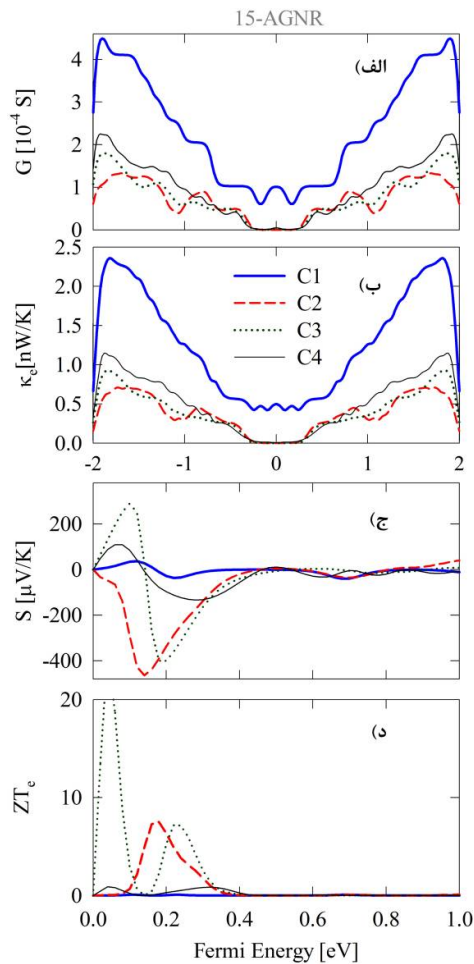
محاسبات مشابهی برای نانونوار صندلی شکل با دو پهنای 1/619 و 1/743 نانومتر در چهار پیکربندی معرفی شده C1، C2، C3 و C4 در دمای 300 کلوین انجام شده است که نتایج آن به ترتیب در شکل‌های 4 و 5 ارائه شده‌اند. شکل 4 نشان می‌دهد، که برخلاف سه ساختار C1، C2 و C4 که خاصیت رسانایی در آنها مشاهده می‌شود، در ساختار C3 در انرژی‌های نزدیک صفر رسانش به صفر می‌رسد. بهتر است به آن اشاره شود که یک عامل مؤثر، تعیین کننده و قابل تنظیم در خواص ترابرد پیکربندی C3، طول ناحیه میانی (اتصال¹) است، در واقع این پارامتر مؤثری برای انتقال عمودی الکترون‌ها و عبور آنها از وسیله مورد نظر است. به نظر می‌رسد با افزایش طول ناحیه میانی، رسانندگی وسیله با این ساختار افزایش یابد. وضعیت مشابهی در خصوص سهم الکترونی رسانندگی گرمایی مشاهده

به ترتیب در $\mu = 0.54$ الکترون‌ولت در ساختار C2 و $\mu = 0.48$ الکترون‌ولت در ساختار C3 در دمای 300 کلوین می‌رسد. علاوه براین، رفتار نوسانی مشاهده شده در توان ترموالکتریکی به رقابت بین الکترون‌ها و حفره‌ها در سیستم نسبت داده می‌شود، که آنها به ترتیب وقتی $S < 0$ و $S > 0$ باشد، سهم‌های غالبی در ضریب سیبک دارند.



شکل 4. وابستگی الف: رسانایی الکتریکی ب: سهم الکترونیکی رسانندگی گرمایی، ج: توان ترموالکتریکی و د: سهم الکترونیکی شاخص شایستگی (کارایی ترموالکتریکی) برحسب تابعی از انرژی پتانسیل شیمیایی در پیکربندی‌های مختلف مبتنی بر نانونوار صندلی شکل گرافینی به پهنای 1/619 نانومتر.

¹junction



شکل 5. وابستگی الف: رسانایی الکتریکی ب: سهم الکترونیکی رسانندگی گرمایی، ج: توان ترموالکتریکی و د: سهم الکترونیکی شاخص شایستگی (کارایی ترموالکتریکی) برحسب تابعی از انرژی پتانسیل شیمیایی در پیکربندی‌های مختلف مبتنی بر نانونوار صندلی شکل گرافینی به پهنای 1/743 نانومتر.

بحث و نتیجه‌گیری

در این مقاله خواص ترموالکتریکی چهار پیکربندی مختلف از نانونوار گرافینی اتصالات تک‌لایه‌ای/دولایه‌ای در چهار قالب پیکربندی متفاوت با لبه‌های صندلی‌شکل و زیگزاگی مطالعه شدند. نانونوارهای گرافینی مورد مطالعه دارای پهنای تقریبی مشابه اما خواص فیزیکی متفاوتی هستند. محاسبات

می‌شود. همچنین از آنجا که پیکربندی‌های C1 و C4، رسانندگی ثابتی در انرژی‌های کوچک دارند، به همین دلیل ضریب سیبک در محدوده انرژی مورد نظر، مقدار کمیینه صفر از خود نشان می‌دهد. در مقابل توان ترموالکتریکی در پیکربندی C2 نسبت به سایر پیکربندی‌ها مقدار بیشتری دارد که مقدار آن به $75/22$ میکروولت بر کلون می‌رسد. همچنین محاسبات پیش بینی می‌کنند که سهم الکترونیکی کارایی ترموالکتریکی نانونوار صندلی شکل با پهنای $1/619$ نانومتر در پیکربندی C3 نسبت به سایر پیکربندی‌ها بیشینه مقدار خواهد داشت که در پتانسیل شیمیایی $0,90$ الکترون‌ولت به مقدار $0,30$ در دمای 300 کلون می‌رسد. مطابق شکل 5، رسانندگی الکتریکی فقط در پیکربندی C1 برای نانونوار صندلی شکل با پهنای $1/743$ نانومتر در همه انرژی‌های مورد بررسی مشاهده می‌شود. در مقابل، به دلیل تغییرات قابل ملاحظه در رسانش الکتریکی در هر چهار پیکربندی، توان ترموالکتریکی غیرصفری مشاهده می‌شود که مقادیر قابل توجهی در آرایش‌هایی با پتانسیل شیمیایی کمتر از $0,4$ الکترون‌ولت برای توان ترموالکتریکی تخمین زده می‌شود. از لحاظ عددی مقدار آنها در دو پیکربندی C2 و C3 به ترتیب به مقادیر بیشینه $463/94$ و $400/68$ میکروولت بر کلون می‌رسند. به عنوان یک نتیجه با ارزش در این مطالعه، مقدار الکترونیکی کارایی ترموالکتریکی در نانونوار صندلی شکل با پهنای $1/743$ نانومتر در دو پیکربندی C2 و C3 به ترتیب به مقادیر قابل توجه $7/51$ و $24/94$ در دمای 300 کلون می‌رسد که بسیار بیشتر نسبت به همه ساختارهای مورد مطالعه است.

10453.

<https://doi.org/10.1073/pnas.0502848102>

[7] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence, *Physical Review B* **54** (1996) 17954. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.17954>

[8] X. Jia, M. Hofmann, V. Meunier, B.G. Sumpter, J. Campos-Delgado, J.M. Romo-Herrera, H. Son, Y. Hsieh, A. Reina, J. Kong, M. Terrones, M.S. Dresselhaus, Controlled formation of sharp zigzag and armchair edges in graphitic nanoribbons, *Science* **323** (2009) 1701. <https://doi.org/10.1126/science.116686>

[9] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M. R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, The electronic properties of graphene, *Reviews of Modern Physics* **81** (2009) 109. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>

[10] B. Sahu, H. Min, A.H. MacDonald, S.K. Banerjee, Energy gaps, magnetism, and electric-field effects in bilayer graphene nanoribbons, *Physical Review B* **78** (2008) 045404. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.045404>

[11] B. Sahu, H. Min, S.K. Banerjee, Effects of edge magnetism and external electric field on energy gaps in multilayer graphene nanoribbons, *Physical Review B* **82** (2010) 115426. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.115426>

عددی نشان دادند، که مقدار الکترونیکی کارایی ترموالکتریک در نانونوار صندلی شکل با پهنای 1/743 نانومتر در دو پیکربندی C2 و C3 به ترتیب به مقادیر قابل توجه 7/51 و 24/94 در دمای 300 کلوین می‌رسد که بسیار بیشتر نسبت به همه ساختارهای مورد مطالعه است.

مرجع‌ها

[1] H. Nejo, *Nanostructure-Fabrication and Analysis*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2007).

<https://www.springer.com/gp/book/9783540375777>

[2] A.K. Geim and K.S. Novoselov, The rise of graphene, *Nature Materials*, **6** (2007) 183-191.

<https://doi.org/10.1038/nmat1849>

[3] R.R. Nair, P. Blake, A.N. Grigorenko, K.S. Novoselov, T.J. Booth, T. Stauber, N.M.R. Peres, A.K. Geim, Fine structure constant defines visual transparency of graphene. *Science* **320** (2008) 1308. [10.1126/science.1156965](https://doi.org/10.1126/science.1156965)

[4] A.K. Geim, and P. Kim. Carbon wonderland. *Scientific American* **298** (2008) 90-97.

<https://www.jstor.org/stable/26000566>

[5] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, A.A. Firsov, Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, *Nature* **438** (2005) 197-200. <https://doi.org/10.1038/nature04233>

[6] K.S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T.J. Booth, V.V. Khotkevich, S.V. Morozov, A.K. Geim, Two-dimensional atomic crystals, *Proceedings of the National Academy of Sciences of USA* **102** (2005) 10451-

- [17] M. Buscema, M. Barkelid, V. Zwiller, H.S.J. van der Zant, G.A. Steele, A. Castellanos-Gomez, Large and tunable photothermoelectric effect in single-layer MoS₂, *Nano Letters* **13** (2013) 358-363. <https://doi.org/10.1021/nl303321g>
- [18] Gh. Adessi, S. Thebaud, R. Bouzerar, G. Bouzerar, First principle investigation on thermoelectric properties of transition metal dichalcogenides: beyond the rigid band model, *Journal of Physical Chemistry C* **121** (2017) 12577-12584. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b02570>
- [19] G. Huai-Hong, T. Yang, P. Tao, Z.-D. Zhang, Theoretical study of thermoelectric properties of MoS₂, *Chinese Physics B* **23** (2014) 017201. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/23/1/017201>
- [20] A. Shokri, N. Salami, Thermoelectric properties in monolayer MoS₂ nanoribbons with Rashba spin-orbit interaction, *Journal of Materials Sciences* **54** (2019) 467-482. <https://doi.org/10.1007/s10853-018-2837-8>
- [12] N.W. Ashcroft, N. David. Mermin, Solid-state physics, New York, Holt, Rinehart and Winston (1976).
- [13] G.D. Mahan, Figure of merit for thermoelectrics, *Journal of Applied Physics* **65** (1989) 1578. <https://doi.org/10.1063/1.342976>
- [14] T.C. Li, S.-P. Lu, Quantum conductance of graphene nanoribbons with edge defects, *Physical Review B* **77** (2008) 085408. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.085408>
- [15] A. Shokri, M. Esrafilian, N. Salami, Quantum transport of tunnel field effect transistors based on bilayer-graphene nanoribbon heterostructures, *Physica E* **119** (2020) 113908. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2019.113908>
- [16] A.V. Rozhkova, A.O. Sboychakova, A.L. Rakhmanova, F. Noria, Electronic properties of graphene-based bilayer systems, *Physics Reports* **648** (2016) 1-104. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2016.07.003>