هدایت گرمایی دینامیکی گرافین دولایه نوع AB در حضور ولتاژ بایاس و تزریق الکترون: رهیافت تابع گرین

محسن یارمحمّدی | حامد رضانیا ۲

۱-دانشکده فیزیک، مرکز تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان ۲-دانشکده فیزیک، دانشگاه رازی کرمانشاه، کرمانشاه

چکیدہ

رفتار هدایت گرمایی گرافین دولایه نوع AB که الکترون به آن تزریق شده است و تحت ولتاژ بایاس قرار – گرفته است بعنوان تابعی از بسامد فوتونی را با استفاده از مدل هامیلتونی تنگ – بست بررسی کرده ایم. در این تحقیق، گرادیان دما وابسته به بسامد در نظر گرفته شده است. هدایت حرارتی این دستگاه با استفاده از رهیافت تابع گرین در تقریب پاسخ خطی کوبو مورد بررسی قرارگرفته است. بسته به نواحی متفاوت بسامد، رفتارهای مختلفی برای هدایت گرمایی دیده می شود. همچنین وابستگی هدایت گرمایی دینامیکی به ولتاژ بایاس و دما بررسی شده است. با افزایش پتانسیل شیمیایی، ولتاژ بایاس و دما هدایت گرمایی دینامیکی سیستم کاهش یافته است، درصورتیکه با افزایش بسامد، این کمیت در پتانسیل بایاس و دمای بالا دارای یک افت وخیز نسبی می باشد.

واژگان کلیدی: هدایت گرمایی دینامیکی؛ گرافین دولایه؛ تابع گرین.

۱ مقدمه

در گرافین، به دلیل طیف الکترونی منحصربه فرد آن، رسانش الکتریکی در نقطه ی دیراک^۱ دارای یک کمینه $\frac{4e^2}{h}$ است[۱]. این موضوع استفاده از ماده فوق را در قطعات الکترونیکی دشوار کرده است. به این خاطر از گرافین دولایه که این مشکل را ندارد استفاده می شود[۲]. خواص گرمایی گرافین از موضوعات مورد علاقه محققان است و یک بحرانی در کنترل اجرا و پایداری لوازم گرافینی از خود نشان می دهد[۲]. بر خلاف خواص الکتریکی و

مکانیکی، خواص گرمایی گرافین دولایه در سطح میکروسکوپی اندازهگیری نمیشوند. خواص الکتریکی گرافین دولایه با تزریق الکترون و ولتاژ بایاس کنترل میشوند. در مقاله حاضر، اثر تزریق الکترون و ولتاژ بایاس روی هدایت گرمایی دینامیکی نوع AB گرافین دولایه بررسی شدهاست. رهیافت تابع گرین برای محاسبه هدایت گرمایی دینامیکی مورد استفاده قرار میگیرد. سپس از نظریه پاسخ خطی که رسانش گرمایی را بر اساس تابع همبستگی جریان–جریان گرمایی مینویسد، نتایج عددی این کمیت براساس رفتار پتانسیل شیمیایی، ولتاژ بایاس و دما بدست میآید[۵،۴].

۲ مدلسازی

گرافین دولایه که از دو گرافین تک لایه مشابه تشکیل شده است را در نظر می گیریم [۶]. به منظور استخراج خواص الکترونی، ابتدا باید ساختار نواری را بررسی و تابع گرین AB گرافین دولایه الکترونی را بدست آوریم طبق ساختار شبکه لانه زنبوری، هر لایه دارای دو اتم مشابه A و B مشخص شدهاند. این ساختار در شکل ۱ نشان دادهشده است. بردار واحد یک تک لایه به صورت زیر می باشد: (i و زبه ترتیب بردار یکه در جهت x و لایه به صورت زیر می باشد: (i و زبه ترتیب بردار یکه در جهت x و کربن ها می باشد).

$$a_1 = a\mathbf{j}$$
, $a_2 = \frac{a}{2}(-\mathbf{j} + \sqrt{3}\mathbf{i})$ (1)

برای چینش AB یک اتم (B) A در لایه ی بالاتر دقیقاً روی مرکز شبکه لانه زنبوری در لایه ی پایین تر قرار میگیرد. در مدل تنگ-بست تحت تقریب پرش بین نزدیکترین همسایگان، هامیلتونی به صورت زیر می باشد:

101

1. Dirac

ســـال دوم | شـمـاره ی ســـوم | پــايــيــز ۱۳۹٤

۲)

 $H = -t_1 \sum_{i,j,k} (b_{1,j+k}^{\dagger} a_{1,j} + h.c.) + \gamma \sum_i (a_{1,j}^{\dagger} b_{2,j} + h.c.) + \frac{V}{2} \sum_i (b_{1,j}^{\dagger} b_{1,j} + a_{1,j}^{\dagger} a_{1,j}) - \frac{V}{2} \sum_i (b_{2,j}^{\dagger} b_{2,j} + a_{2,j}^{\dagger} a_{2,j})$

در این حالت دو صفحه با ۱و ۲ مشخص می شوند. در رابطه ی بالا I شماره ی صفحه و $_{\parallel} t$ دامنه ی پرش درون لایه ای می باشد. δ یکی الکترون را در سایت i ایجاد (نابود) می کند. δ یکی از سه بردار ($_{0}, a_{0}, a_{0}, a_{0}$) که در شکل ۱ نشان داده شده است، می باشد. دامنه ی پرش بین لایه ای از اتم (A(B) یک لایه به نزدیکترین اتم (B) A لایه دیگر ۷-0.4 و γ می باشد V نیز اختلاف انرژی پتانسیل بین دولایه ناشی از اعمال ولتاژ بایاس می باشد.



شکل۱ 🏹 شبکه گرافین تکلایه

با استفاده از تبدیل فوریه و در نظرگرفتن بردار آفریننده ی فرمیونی به صورت $\phi_k^{\dagger} = (a_{1,k}^{\dagger}, b_{2,k}^{\dagger}, a_{1,k}^{\dagger}, b_{1,k}^{\dagger})$ شکل ماتریسی تبدیل فوریه هامیلتونی معادله (۲) به صورت زیر می باشد:

$$H_{0}(k) = \begin{pmatrix} \frac{V}{2} & f(\mathbf{k}) & \gamma & 0\\ f^{*}(\mathbf{k}) & \frac{V}{2} & 0 & \gamma\\ 0 & 0 & -\frac{V}{2} & f(\mathbf{k})\\ \gamma & 0 & f^{*}(\mathbf{k}) & -\frac{V}{2} \end{pmatrix}$$
(\mathcal{Y})

که $(f(\mathbf{k}) = -t_{\parallel}(1 + e^{i\mathbf{k}.a_{1}} + e^{i\mathbf{k}.a_{2}})$ است. با توجه به اینکه سلول واحد گرافین دولایه چهاراتمی است، تابع گرین به صورت یک ماتریس ۴×۴ نوشته می شود. در نمایش ماتسوبارا^۲ هر عنصر تابع گرین و تبدیل فوریه ی آن به صورت زیر می باشد[۹]:

$$G_{\mathscr{A}}(k,\tau) = \langle T_{\tau} c_{k,\alpha}(\tau) c^{\dagger}{}_{k,\beta}(\tau) \rangle$$
$$G_{\mathscr{A}}(k,i\omega_n) = \int_{0}^{\beta} e^{i\omega_n \tau} G_{\mathscr{A}}(k,\tau)$$

 τ که α و β می تواند مقادیر (A_1, B_1, A_2, B_2) را اختیار کند و τ زمان موهومی است. $\frac{(2n+1)\pi}{\beta} = \omega$ بسامد ماتسوبارای فرمیونی می باشد. تابع گرین در حالت بدون تزریق ناخالصی به صورت زیر بدست می آید:

$$G_0(k,i\omega_n) = \frac{1}{(i\omega_n + \mu)I - H_0(k)}$$

با یک تحلیل ساده و استفاده از $\phi + \phi + \phi$ هدایت $\delta_n \to \omega + \phi$ هدایت گرمایی دینامیکی گرافین دولایه در حضور ولتاژ بایاس و تزریق الکترون در چارچوب مدل تنگ–بست به صورت تابعی از بسامد در دماهای مختلف بدست میآید.

انرژی و هدایت گرمایی دینامیکی

هدایت گرمایی که به صورت پاسخ جریان گرمایی به یک گرادیان دمایی توصیف میشود، از نظریه کوبو محاسبه میشود. در این کار گرادیان دمایی، تابعی از بسامد الکترونی میباشد که در نهایت هدایت گرمایی دینامیکی بدست میآید. به منظور بدست آوردن فرم عملگری جریان گرمایی از معادله پیوستگی به صورت $(0 = {}^{3}_{J} + \nabla_{J} + {}^{0}_{O})$ استفاده میشود. برای این منظور از تعریف یک تابع کمکی به صورت زیر بهره میگیریم:

 $R_E = \sum_i R_i h_i$

در رابطه بالا *h_i* هامیلتونی دستگاه الکترونی مورد نظر میباشد که بصورت زیر نمایش داده میشود:

(Y

$$h_{i} = \sum_{l,\delta} a_{l,l+\delta}^{\dagger} b_{l,l} + \gamma \sum_{i} (a_{l,l}^{\dagger} b_{2,i} + h.c) + \gamma + \frac{V}{2} \sum_{i} (b_{l,l}^{\dagger} b_{1,i} + a_{l,l}^{\dagger} a_{1,l}) - \frac{V}{2} \sum_{i} (b_{2,l}^{\dagger} b_{2,i} + a_{2,l}^{\dagger} a_{2,l})$$

$$e \delta_{1} = \frac{1}{\sqrt{3}} \mathbf{j}, \quad \delta_{2,3} = \frac{1}{\sqrt{3}} (+(-)\frac{1}{2}\mathbf{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{j}) \qquad (A$$

بر طبق معادله حرکت، عملگر جریان انرژی به صورت زیر بدست می آید:

$$\mathbf{J}^{E} = \frac{d\mathbf{R}_{E}}{d} = i[H, \mathbf{R}_{E}] = i\sum_{i,l} \mathbf{R}_{i}[h_{l}, h_{i}] \qquad (\mathbf{A})$$

پس از جاگذاری (۷) و (۸) در معادله (۹) به رابطه زیر برای چگالی جریان گرمایی بر حسب تبدیل فوریه عملگرهای خلق و فنا به صورت زیر در میآید:

www.SID.ir

۴)

 $\mathbf{J}_{x}^{E} = \mathbf{i}_{\parallel}^{2} \sum_{k} \mathbf{i}_{k} \mathbf{R}_{k,\sigma}^{\dagger} b_{k,\sigma} e^{\mathbf{k}_{k,\sigma}} - \mathbf{i}_{\parallel} \gamma \sum_{k} \mathbf{i}_{k} \Delta^{\prime} (e^{\mathbf{k}_{\perp} \Delta^{\prime}} a_{1,k}^{\dagger} a_{2,k} - e^{-\mathbf{k}_{\perp} \Delta^{\prime}} a_{1,k}^{\dagger} + e^{\mathbf{k}_{\perp} \Delta^{\prime}} b_{2,k}^{\dagger} b_{1,k} - e^{-\mathbf{k}_{\perp} \Delta^{\prime}} b_{1,k}^{\dagger} b_{2,k})$

بطوریکه R_i به عنوان چهار بردار واصل به نزدیکترین همسایگان سلول واحدی به صورت $(i + \frac{1}{2}i)^{\pm} = \frac{\sqrt{3}}{2}i + \frac{1}{2}i)$ و $R_{i=1,\dots,4} = 0, (\pm \frac{\sqrt{3}}{2}i + \frac{1}{2}i)$ و $(j + \frac{\sqrt{3}}{2}i + \frac{1}{2}i) = 0$ می باشد. با استفاده از قانون پیوستگی بار نیز رابطه ای برای شکل عملگری چگالی جریان باری بدست می آوریم. نتیجه نهایی برای جریان الکتریکی به صورت زیر در می آید:

$$\mathbf{J}_{x}^{e} = -\mathbf{i}_{\parallel} \sum_{i,\sigma,\delta} \mathbf{i} \cdot \delta(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{\delta}} a_{k,\sigma}^{\dagger} b_{k,\sigma} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{\delta}} b_{k,\sigma}^{\dagger} b_{k,\sigma}) \quad (\mathbf{W}$$

جریان گرمایی با استفاده از روابط (۱۰) و (۱۱) از رابطه $J^{\varrho} = J^{E} + \mu J^{e}$ بدست میآید. نظریه خطی کوبو ضرایب ترابری را بصورت زیر نتیجه میدهد:

$$L_{\phi}(\omega) = \frac{1}{\not{B}} \lim_{\iota \omega_{a} \to \omega + \phi^{+}} \int_{0}^{\infty} d\tau e^{i\omega_{a}\tau} \langle T_{\tau}(J_{x}^{a}(\tau)J_{x}^{b}(0) \rangle$$
 (1)

با استفاده از روابط عملگری، چگالی جریان ها و قضیه لهمن و همچنین بهرهگیری از قضیه ویک، نتایج زیر برای عناصر ماتریس ترابری بدست میآید[۱۰،۹]:

• در حضور گرادیان دمایی غیریکنواخت (w) و در و فر وضعیت مداری باز، جریان گرمایی به گرادیان دما از طریق $J(w) = -\kappa(w) \nabla T(w)$

• ضریب هدایت گرمایی از طریق عبارت زیر به عناصر ماتریس ترابری وابسته میشود.

$$\kappa(\omega) = \frac{1}{T^2} (L_2 - \frac{L_2^2}{L_1}) \tag{17}$$

در بخش بعد، نتایج عددی هدایت گرمایی دینامیکی برای گرافین دولایه نوع AB بیان میشود.



شکل ۲ ۷) هدایت گرمایی دینامیکی گرافین دولایه نوع ABبر حسب پتانسیل شیمیایی برای مقادیر متفاوت ولتاژبایاس در دماو بسامد ثابت.

۳ نتایج و بحث

در نتایج بدست آمده با استفاده از حل عددی، پارامتر پرش بین نزدیکترین همسایه ها ۱ در نظر گرفته شده است، بنابراین پارامترهای دیگر در مدل هامیلتونی به صورت ۲ در نظر گرفته شده است. در شکل $\gamma_{a(b)}/t_1, V/t_1, \mu/t_1, k_B T/t_1, \omega/t_1$ هدایت گرمایی درون صفحه ای بر حسب یتانسیل شیمیایی برای مقادیر متفاوت ولتاژ بایاس ($V/t_{\parallel} = 0, 0.5, 0.3$) در بسامد ثابت رسم شدہ است. این شکل نشان میدھد کہ ھدایت $\omega/t_{\parallel}=2$ گرمایی با افزایش تعداد الکترون ناشی از تزریق الکترون برای همه مقادیر ولتاژ بایاس کاهش می یابد. در نزدیکی نقطه دیراک ، دوباره مشخصه های یک نیم رسانا نمایان می شود $\mu/t_{\parallel} = 0$ همچنین این شکل نشان میدهد که برای $1 < \mu/t_{\parallel}$ هدایت گرمایی صفر می شود که پراکندگی ناشی از افزایش جمعیت الکترونی دلیل اصلی آن میباشد. در شکل ۳ هدایت گرمایی بر حسب دما برای مقادیر متفاوت ولتاژ بایاس (1.5,2, 1.5,2 = 0,0.5,0.5 در μ/t_{\parallel} در بسامد ثابت $2 = \frac{\omega}{t_{\parallel}} = 2$ رسم شدہ است که یک وابستگی ضعیف $\mu/t_{\parallel} > 1$ به یتانسیل شیمیایی در $k_B T/t_{\parallel} > 0.016$ دارد و برای صفر می شود که افزایش جمعیت الکترونی همراه با افزایش نرخ یراکندگی با افزایش یتانسیل شیمیایی موجب کاهش هدایت گرمایی می شود. این نتایج با کارنظری انجام شده در [۶] همخوانی دارد و از طرفی به دلیل اینکه در دمای بالا کار میکنیم، اثرات كوانتومي تقريباً حذف مي شوند و كاهش داريم. اثر بسامد ناشي از گرادیان دمایی روی هدایت گرمایی گرافین دولایه نوع AB در . حضور پتانسیل شیمیایی $\mu/t_{\rm L} = 1$ در شکل (۴) بررسی شده است ازآنجاییکه با افزایش انرژی الکترونها، دامنه افت وخیز نسبی ذرات هنگام ترابرد تغییر میکند، هدایت گرمایی کاهش می یابد و در بسامدهای خیلی بالا عملاً هدایت گرمایی متاثر نمیشود.





www.SID.ir

ســـال دوم | شــمـاره ی ســـوم | پــايــيـــز ۱۳۹٤

در دماهای پایین، دما به برانگیختگی الکترونها از نوار ظرفیت به رسانش کمک میکند و به عنوان یک پارامتر مؤثر بخاطر کاهش پراکندگی الکترونی، در افزایش هدایت گرمایی مطرح میشود. همانطور که دیده میشود، اثر پراکندگی الکترونها در اثر تزریق الکترون منجر به کاهش هدایت گرمایی در همه ی دماها میشود. ویژگی دیگر منحنیها تفاوت بین رفتار هدایت گرمایی با افزایش مقدار ولتاژ بایاس میباشد. شکل ۵ نشان میدهد که هدایت گرمایی با افزایش ولتاژ بایاس کاهش میابد و در $2 = \frac{1}{V}$ شاهد یک قله هستیم، این نتیجه از این حقیقت ناشی میشود که اعمال ولتاژ بایاس و میدان الکتریکی باعث ایجاد گاف در طیف و برانگیختگی سیستم میشود.



در این مقاله هدایت گرمایی دینامیکی گرافین دو لایه نوع AB در حضور ولتاژ بایاس و تزریق الکترون در راستای x بررسی شدهاست که از رهیافت تابع گرین با محاسبه تابع جریان – جریان و مدل تنگ – بست استفادهکردیم. به عبارتی تأثیر جذب انرژی فوتون فرودی توسط الکترونهای ترابردی در هدایت گرمایی سیستم بررسی شد. وابستگی هدایت گرمایی دینامیکی به ولتاژ بایاس اعمالی ناشی از گیت و دمای ناشی از دو منبع دمای سرد وگرم مورد بررسی قرار گرفت. با افزایش پتانسیل شیمیایی، ولتاژ بایاس و دما، هدایت گرمایی دینامیکی سیستم کاهش یافته بایاس و دما، هدایت گرمایی دینامیکی سیستم کاهش یافته است، درصورتیکه با افزایش بسامد این کمیت در پتانسیل بایاس بالا و دمای بالا دارای یک افت وخیز نسبی می باشد.



شکل ۴ کی هدایت گرمایی دینامیکی گرافین دولایه نوع AB بر حسب دما برای مقادیر متفاوت تزریق الکترون در ولتاژ بایاس و پتانسیل شیمیایی ثابت.



شکل ۵ ﴾] هدایت گرمایی دینامیکی گرافین دولایه نوع ABبر حسب ولتاژ بایاس برای مقادیر متفاوت تزریق الکترون در دما و بسامد ثابت.



- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. and Dubonos, I. V Grigorieva, and A. A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films," Science (80)., vol. 306, no. 5696, pp. 666–669, 2004.
- [2] E. McCann and V. I. Fal'ko, "Landau-level degeneracy and quantum Hall effect in a graphite bilayer," Phys. Rev. Lett., vol. 96, no. 8, p. 86805, 2006.
- [3] E. McCann, "Asymmetry gap in the electronic band structure of bilayer graphene," Phys. Rev. B, vol. 74, no. 16, p. 161403, 2006.
- [4] M. I. Katsnelson, "Scattering of charge carriers by point defects in bilayer graphene," Phys. Rev. B, vol. 76, no. 7, p. 73411, 2007.
- [5] L. Hao and T. K. Lee, "Thermopower of gapped bilayer graphene," Phys. Rev. B, vol. 81, no. 16, p. 165445, 2010.
- [6] J. Nilsson, A. H. C. Neto, F. Guinea, and N. M. R. Peres, "Transmission through a biased graphene bilayer barrier," Phys. Rev. B, vol. 76, no. 16, p. 165416, 2007.
- [7] Y. Xu, X. Li, and J. Dong, "Infrared and Raman spectra of AA-stacking bilayer graphene," Nanotechnology, vol. 21, no. 6, p. 65711, 2010.
- [8] I. Lobato and B. Partoens, "Multiple Dirac particles in AA-stacked graphite and multilayers of graphene," Phys. Rev. B, vol. 83, no. 16, p. 165429, 2011.
- [9] G. D. Mahan, Many-particle physics. Springer Science & Business Media, 2013.
- [10] A. L. Fetter and J. D. Walecka, Quantum theory of many-particle systems. Courier Corporation, 2003.

Dynamical Thermal Conductivity of Biased and Doped AB-Stacked Bilayer Graphene: Green's Function Approach

M. Yarmohammadi¹ | H. Rezania^{2*}

1. Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan 2. Department of Physics, Razi University, Kermanshah

Abstract

We have investigated the behavior of dynamical thermal conductivity of doped biased bilayer graphene for AB-stacking as a function of frequency in the context of tight-binding model Hamiltonian. In this work, it has considered frequency dependence of temperature gradient. Green's function approach has been implemented to find the behavior of thermal conductivity of bilayer graphene within Kubo linear response theory. Different behaviors have been seen for thermal conductivity due to different frequency. Also thermal conductivity versus bias and temperature has investigated. Dynamical thermal conductivity decreases with chemical potential, bias voltage and temperature, while it has a relative fluctuation with frequency at high bias voltage and high temperature.

Keywords

Dynamical thermal conductivity; Bilayer graphene; Green's function.