

(دریافت مقاله: ۱۳۸۸/۱۲/۱۰؛ پذیرش: ۱۳۹۰/۳/۲۴)

IPR

IPR

خصوصیت آخری نانو روبان‌های گرافینی (GNRs) ^۴ را به عنوان بهترین کاندیدا برای ساخت ادوات الکترونیکی در آینده مطرح می‌سازد [۴]. اما مشکلی که این ادوات با آن مواجه هستند، نبود گاف انرژی در آنها می‌باشد که کنترل خواص الکترونیکی و ترابرد را در ادوات بر پایه گرافین مشکل می‌سازد. این مشکل را می‌توان به وسیله ساخت نانو روبان‌های گرافینی که به اندازه کافی باریک هستند حل کرد و در نتیجه گاف انرژی را به آنها افزود. اما تفاوت عمده‌ای میان نتایج آزمایشگاهی و کارهای نظری که بر روی مدل‌های ایده آل GNRs انجام می‌شود وجود دارد. محاسبات تنگابست^۵ (یا جواب‌های معادله دیراک) نشان می‌دهند که عرض گاف به هندسه لبه‌ها و عرض نانو روبان‌ها بسیار حساس است [۵، ۶] در حالی که نتایج تجربی [۸، ۷] هیچ تفاوتی میان نانو روبان‌های

کشف اخیر تک لایه‌های گرافینی [۱] توجه زیادی را به خود جلب کرده است. قبلاً تصور می‌شد که گرافین نمی‌تواند به حالت آزاد در طبیعت یافت شود. چون نزدیک به هفتاد سال پیش دو فیزیکدان معروف به نام‌های لاندائو^۱ و پایرلز^۲ استدلال کردند که شبکه اکیداً دو بعدی به لحاظ ترمو دینامیکی نا پایدار است و نمی‌تواند وجود داشته باشد [۲]. گرافین خواص فیزیکی بسیار جالبی از خود نشان می‌دهد: حامل‌های بار در آن شبیه ذرات نسبیتی بدون جرم رفتار می‌کنند و می‌توان آنها را به وسیله معادله دیراک توصیف کرد [۱]. به علاوه گرافین هم در دمای اتاق و هم با مقادیر زیاد ناخالصی موبیلیتی^۳ بالایی از خود نشان می‌دهد [۳].

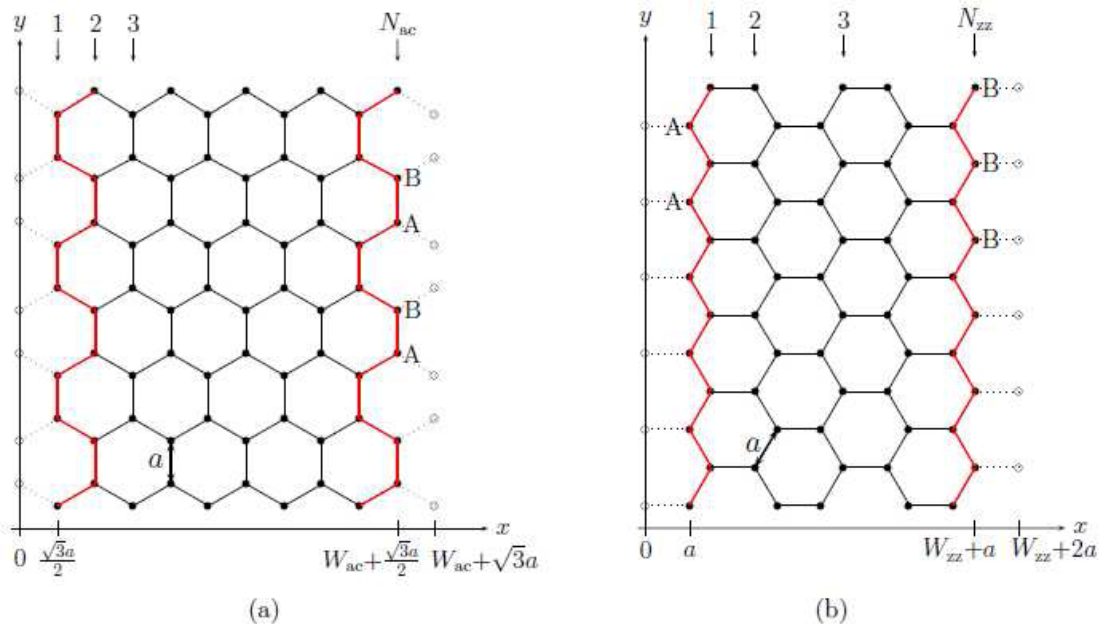
۱. Landau

۲. Peierls

۳. mobility

۴. Graphene nano ribbons

۵. Tight-binding



شکل ۱. ساختار شبکه نانو روبان‌های گرافینی. خطوط نقطه چین پیوندهایی را نشان می‌دهند که باید بریده شوند و دایره‌های توخالی، اتم‌هایی که باید برداشته شوند تا یک نانو روبان به وجود آید. (a) یک روبان دسته‌صندلی، (b) یک روبان زیگزاگ.

می‌کند که بیشتر روبان‌ها فلز هستند یا گاف بسیار کوچکی دارند، در حالی که هیچ روبان فلزی به طور تجربی مشاهده نشده است. در قسمت (۳) برای نزدیکتر کردن این مدل به واقعیت، بی‌نظمی اندرسون و بی‌نظمی تهی‌جایی (تراوش کوانتومی جایگاهی^۶) را هم روی مرزها و هم به سطح نانو روبان‌های گرافینی وارد خواهیم کرد. نشان می‌دهیم چگالی حالات روبان‌ها در حضور این بی‌نظمی‌ها چه تغییری خواهد کرد. هم‌چنین نتایج و توضیحات نهایی را در قسمت آخر بیان می‌کنیم.

هندسه نانو روبان‌های گرافینی با دو مرز متفاوت در شکل ۱ نشان داده شده است. یک نانو روبان گرافینی شامل دو زیر شبکه نا هم‌ارز است، که با A و B در شکل ۱ مشخص شده است. یک روبان دسته‌صندلی برشی از گرافین است به طوری که مرز آن شامل تکرار دسته‌صندلی‌ها می‌باشد، مطابق شکل (a). هر مرز به اتم‌های زیر شبکه A و B ختم می‌شود. عرض یک

زیگزاگ^۱ و دسته‌صندلی^۲ نشان نمی‌دهند. عواملی که ممکن است منجر به این رفتارها شوند شامل پراکندگی از روی ناصافی‌های^۳ مرزی [۹، ۱۰]، نقص‌های شبکه اتمی [۱۱]، پراکندگی ناخالصی^۴ [۱۲]، برهم‌کنش الکترون-الکترون و یا تغییر ساختار الکترونیکی به علت اثرهای مرزی می‌باشد [۱۳]. استفاده تقریب تنگابست همراه با بی‌نظمی، اثرهای مهمی را در نانو روبان‌ها نشان می‌دهد. در واقع اضافه کردن بی‌نظمی به عنوان تصحیحی روی مدل‌های ایده‌آل می‌باشد. این مقاله از قسمت‌های زیر تشکیل شده است. در قسمت (۲) ابتدا هندسه روبان با دو مرز متفاوت زیگزاگ و دسته‌صندلی را شرح خواهیم داد، سپس در ادامه یک روش عددی را بر پایه محاسبات تنگابست توضیح می‌دهیم و نتایج چگالی حالات (DOS)^۵ را برای نانو روبان‌های زیگزاگ و دسته‌صندلی نشان می‌دهیم. همان‌طور که خواهیم دید، این مدل پیش‌بینی

۱. Zigzag

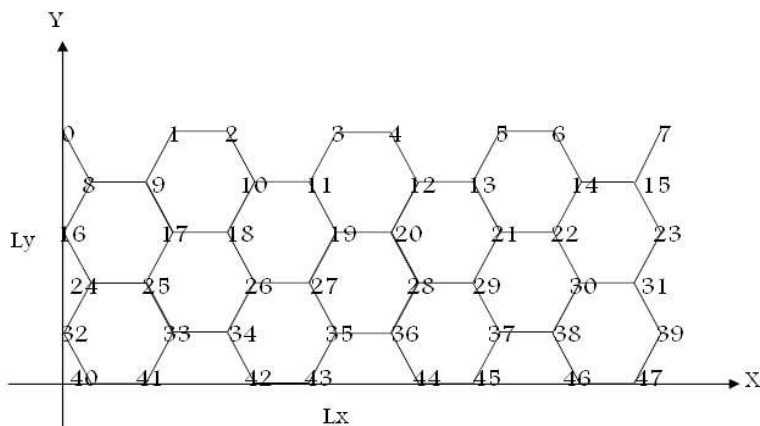
۲. Armchair

۳. Rough

۴. Impurity scattering

۵. Density of state

۶. Quantum site percolation



شماره سایت	همسایه اول	همسایه دوم	همسایه سوم
i زوج	$i-1$	$i-L_x$	$i+L_x$
i فرد	$i+1$	$i+L_x$	$i-L_x$

شکل ۲. در شکل شماره گذاری سایت‌های یک شبکه لانه زنبوری با $L_x = 8$ و $L_y = 6$ نشان داده شده است. در جدول پایین، نمایش همسایه یک جایگاه (در شبکه بالا) با شماره i مشخص شده است.

که در آن عملگر خلق (فنا) یک الکترون با اسپین σ در سایت $(b)a$ می‌باشد، $\sum_{\langle ij \rangle}$ جمع روی همه نزدیکترین همسایگان سایت‌ها را نشان می‌دهد و $t = 2.7 \text{ eV}$ پارامتر پرش میان اوربیتال جایگاه همسایه است. اولین گام برای شروع محاسبات عددی، ساختن ماتریس هامیلتونی نظیر معادله (۱) است.

مطابق شکل ۲ یک شبکه لانه زنبوری با ابعاد $L_x \times L_y$ با شرط مرزی دوره‌ای $(\text{pbc})^3$ در نظر می‌گیریم. بنابراین ماتریس هامیلتونی نظیر این شبکه یک ماتریس مربعی N بعدی است که مقدار N برابر با $L_x \times L_y$ است. برای نوشتن عناصر ماتریس پرش، باید نزدیکترین همسایه‌ها را برای جایگاه داده شده مشخص کنیم. برای این کار، هر جایگاه شبکه را مطابق شکل ۲ فقط با یک عدد شماره گذاری می‌کنیم. به این ترتیب برای جایگاه i ام اولین همسایه‌ها به صورتی که در جدول شکل ۲ داده شده است مشخص می‌شوند. پس از تشکیل ماتریس هامیلتونی (۱)، این ماتریس را قطری کرده و با استفاده از ویژه مقادیر انرژی، چگالی حالات سیستم را تشکیل می‌دهیم.

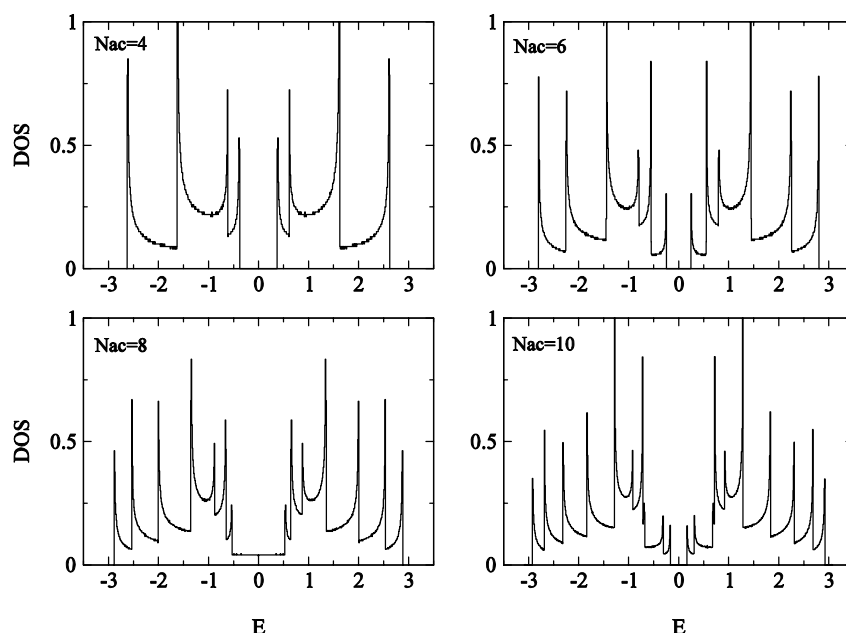
روبان دسته صندلی را می‌توان بر حسب تعداد خطوط دیمرا^۱ N_{ac} تعیین کرد، $W_{ac} = (N_{ac} - 1) \frac{\sqrt{3}}{2} a$ با $A = 1.42 A^\circ$. هندسه مرز دیگر، زیگزاگ نامیده می‌شود شکل ۱ b. اتم‌های هر مرز از زیر شبکه یکسان هستند. مثلاً اتم‌های A در مرز چپ و اتم‌های B در مرز راست. عرض یک روبان زیگزاگ به وسیله تعداد زنجیره‌های زیگزاگ N_{zz} ، تعیین می‌شود $W_{zz} = (N_{zz} - 1) \frac{\sqrt{3}}{2} a$ ، فرض می‌کنیم پیوندهای آویزان در مرز به اتم‌های هیدروژن ختم می‌شوند، بنابر این سهمی در خواص تراپرد ندارند.

مدل تنگابست تک اوربیتالی برای محاسبه حالت‌های الکترونیکی مولکول‌های فولرین^۲، نانولوله‌های کربنی و مواد وابسته به کربن موفق بوده است [۱۴]، به همین دلیل در این تحقیق از این مدل برای شبکه الکترونی π نانوروبان‌های گرافینی استفاده شده است. هامیلتونی استاندارد تنگابست برای یک شبکه لانه زنبوری به شکل زیر داده می‌شود:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (a_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + h.c.), \quad (1)$$

۱. Dimer

۲. Fullerene

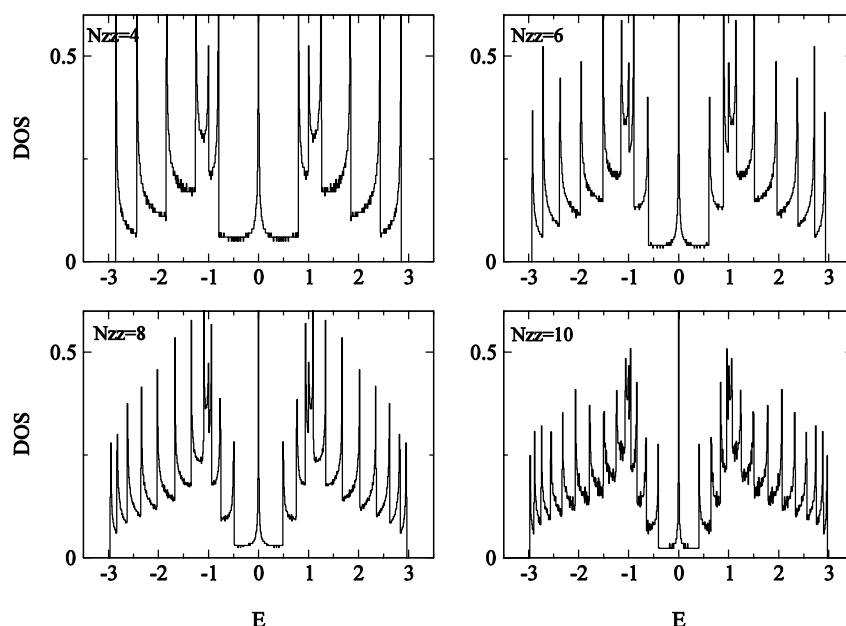


شکل ۳. چگالی حالات (DOS) نانورویان‌های گرافینی دسته‌صندلی با عرض‌های مختلف $N_{ac}=4$ ، $N_{ac}=6$ ، $N_{ac}=8$ و $N_{ac}=10$.

چگالی حالت در اطراف انرژی فرمی ($E_F = 0 \text{ eV}$)، به این معناست که سرعت گروهی الکترون‌های متحرک نزدیک به صفر است [۶]. این باند تقریباً صاف به حالت جایگزیده در مرزهای روبان زیگزاگ مربوط است، که حالت‌های مرزی نامیده می‌شود. این حالت‌ها بسیار جالب توجه هستند چون نمی‌توان آنها را از ساختار نواری گرافین دو بعدی پیش بینی کرد، و در روبان‌های دسته‌صندلی نیز ظاهر نمی‌شوند. در مقابل نانورویان‌های دسته‌صندلی با $N_{ac} = 3n$ یا $N_{ac} = 3n + 1$ در اطراف $E = 0$ دارای گاف می‌باشند. سایز محدود این گاف با افزایش $N_{ac} \rightarrow \infty$ ، به سمت صفر میل می‌کند. چون با افزایش تعداد سایت‌های شبکه، اثرهای سایز محدود کاهش می‌یابد و گاف بسته می‌شود، در واقع نمودارهای چگالی حالات شبیه DOS گرافین می‌شوند. برای مقادیر $N_{ac} = 3n + 2$ با تقریب تنگابست و در نظر گرفتن پرش به اولین همسایگان نزدیک، نانورویان‌های دسته‌صندلی با خواص فلزی به دست می‌آید، اما اگر پرش به دومین و سومین همسایگان نزدیک را در این تقریب به حساب بیآوریم، این خاصیت فلزی ناپدید می‌شود [۱۳، ۱۵]. برای مقادیر دیگر N_{ac} ، پرشی با برد بلندتر، سایز گاف را اندکی تغییر می‌دهد اما خواص اصلی را عوض

خواص الکتریکی GNRs به شدت به هندسه آنها وابسته است. بسته به جهت برش لایه گرافین، دو نوع مرز متفاوت با نام‌های زیگزاگ و دسته‌صندلی به وجود می‌آید. همه روبان‌ها با مرزهای زیگزاگ فلز هستند. در حالی که $\frac{2}{3}$ از روبان‌های دسته‌صندلی نیمه رسانا هستند، مطابق شکل ۳ و ۴. در مقایسه با ساختار نواری یک صفحه گرافینی نامحدود، چگالی حالات نانورویان‌های گرافینی محدود، شامل تعداد زیادی تکینگی‌های ون-هوف^۱ (VHSs) می‌باشد. چگالی حالت یک سیستم یک بعدی ایده آل، متناسب با $\varepsilon^{1/2}$ می‌باشد و شامل یک نقطه تکینگی است. از آنجایی که GNR یک سیستم شبه یک بعدی است، در امتداد عرض نوار می‌توان مدهای نوسانی با انرژی‌های متفاوت در نظر گرفت، که هر یک مربوط به یک کانال یک بعدی عبوری می‌باشد. اگر به تابع چگالی حالات GNR دقت کنیم، هر یک از این کانال‌ها با افزایش انرژی تحریک شده و سهمی در چگالی حالات ایجاد می‌کنند، که به شکل $\varepsilon^{1/2}$ می‌باشد. در واقع هر یک از نقاط تکینه مربوط به یک کانال جدید عبوری می‌باشد. برای نانورویان‌های گرافینی زیگزاگ، رفتار ویژه

۱. Van hove singularities



شکل ۴. چگالی حالات (DOS) نانوروبان‌های گرافینی زیگزاگ با عرض‌های مختلف $N_{zz} = 4$ ، $N_{zz} = 6$ ، $N_{zz} = 8$ و $N_{zz} = 10$.

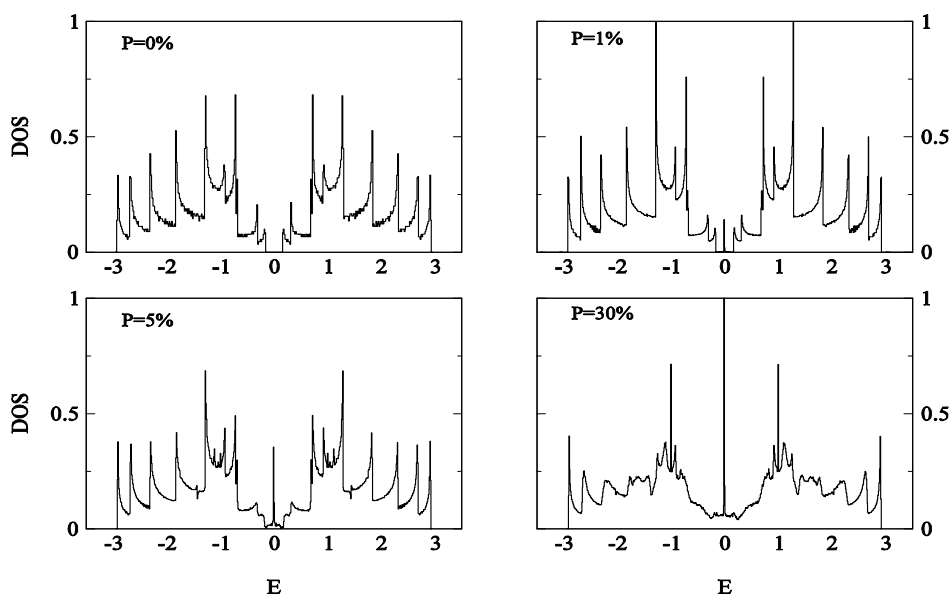
که در آن ϵ_i انرژی روی جایگاهی می‌باشد و t پارامتر پرش است. جمع $\sum_{\langle ij \rangle}$ پرش را به نزدیک ترین همسایگان هر جایگاه محدود می‌کند. در نبود بی نظمی، ϵ_i مقدار صفر دارد و $t = 2.7\text{eV}$ می‌باشد. در حضور بی نظمی، هم انرژی روی جایگاهی و هم پارامتر پرش می‌تواند تغییر کند. در اینجا تنها تغییر در انرژی روی جایگاهی را در نظر می‌گیریم.

یکی از ساده ترین بی نظمی‌ها در نانوروبان‌های گرافینی، بی نظمی تهی جایی بر روی مرز است که با حذف یک یا چندین اتم روی مرز ایجاد می‌شود. یک جای خالی در مرز (روی جایگاه i) با قرار دادن مقدار بسیار بزرگی برای ϵ_i ، در معادله (۲) شبیه سازی می‌شود. بنابراین الکترون‌ها با احتمال بسیار کمی به این جایگاه پرش می‌کنند. بی‌نظمی لبه با دو پارامتر مشخص می‌شود: عمق d و احتمال p عمق d تعداد لایه‌های درونی^۲ می‌باشد که اتم‌ها در آن حذف شده‌اند. برای یک روبان دسته صندلی عمق d برابر ۱ است اگر تنها اتم‌های خطوط دیمر او N_{ac} حذف شوند (شکل ۱ a). عمق d برای یک روبان

نمی‌کند. توجه کنید که عرض گاف به هندسه مرزها و عرض روبان‌ها (سایز گاف با افزایش عرض روبان کاهش می‌یابد) بسیار حساس است، و این بر خلاف نتایج تجربی می‌باشد.

وجود مرزهای باز در دو طرف نانوروبان آن را نسبت به بی نظمی‌ها آسیب پذیر می‌کند. در واقع تقریباً همه مشاهدات مرزهای گرافین شامل نقص‌های موضعی^۱ یا بی نظمی‌های گسترده است، در حالی که نقص‌های کمتری در سطح ورقه‌های گرافینی پیدا شده است. این نقص‌های مرزی می‌توانند اثر مهمی روی خواص الکترونیکی نانوروبان‌ها داشته باشند. در این قسمت چگالی حالات نانوروبان‌های گرافینی را در حضور بی نظمی اندرسون و بی نظمی تهی جایی با استفاده از مدل تنگابست بررسی خواهیم کرد. هامیلتونی تنگابست این سیستم به شکل زیر است:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (a_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + h.c.) + \sum_{i\sigma} \epsilon_i (a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} + b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}) \quad (2)$$

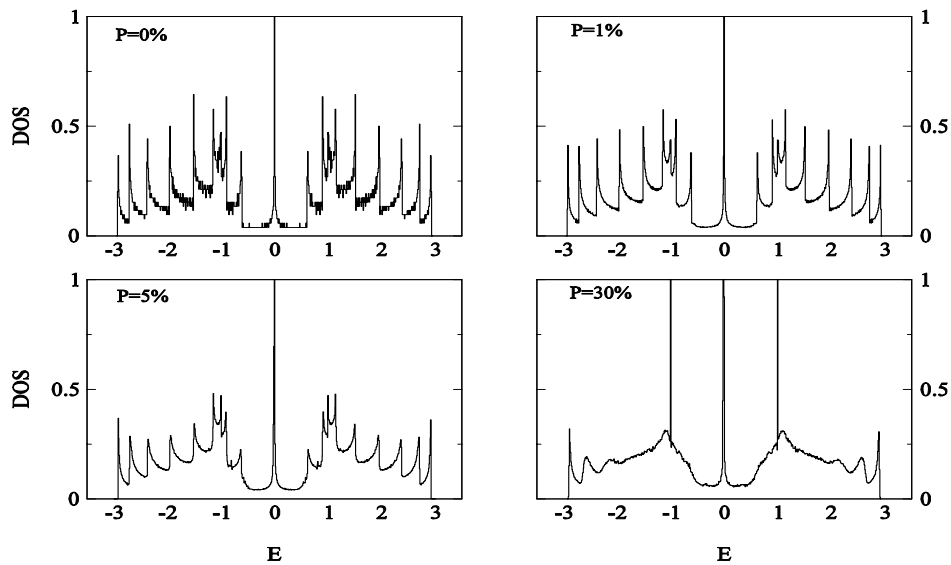


شکل ۵. اثر بی نظمی تراوش کوانتومی جایگاهی (روی مرز) بر روی چگالی حالت (DOS) نانوروبان‌های دسته‌صندلی ($N_{ac}=10$) با عرض $L_y = 18nm$ و طول $L_x = 123nm$. این شبکه دارای 10000 سایت می‌باشد. میانگین بی نظمی برای 5° توزیع مختلف به دست آمده است. در راستای طولی از شرایط مرزی دوره‌ای (pbc) استفاده شده است. در اینجا ϵ_i را برابر 100 و عمق d را برابر 1 فرض کرده‌ایم.

اثری روی DOS این نانوروبان‌ها در اطراف انرژی فرمی ندارد. اما با افزایش بی نظمی تا $P = \frac{30}{100}$ ، دو قله در DOS این نانوروبان‌ها در نقاط 1 و -1 ظاهر می‌شود، که انرژی آنها متفاوت از تکینگی‌های ون-هوف یک GNR بدون بی نظمی می‌باشد. در واقع آنها مربوط به یک حالت جایگزیده هستند که توسط بی نظمی تهی‌جایی ایجاد می‌شوند. اما برای GNRs دسته‌صندلی، با کوچکترین بی نظمی تهی‌جایی ($P = \frac{1}{100}$) قله‌ای در انرژی فرمی ظاهر می‌شود. همچنین با افزایش بی نظمی تا $P = \frac{30}{100}$ ، پیک وسط رشد می‌کند و دو قله دیگر (مانند GNRs زیگزاگ) در نقاط 1 و -1 آشکار می‌شود. در این جا نیز این پیک‌ها مربوط به حالت‌های جایگزیده هستند که توسط بی نظمی تهی‌جایی ایجاد می‌شوند. همان‌طور که از نمودارهای DOS پیداست، GNRs دسته‌صندلی نسبت به GNRs زیگزاگ بیشتر تحت تأثیر بی نظمی تهی‌جایی قرار می‌گیرند. همچنین در بی نظمی $P = \frac{30}{100}$ ، دو نمودار DOS نانوروبان‌های زیگزاگ و دسته‌صندلی به طور کلی شبیه هم هستند. به این معنا که در این بی نظمی خاص تفاوتی میان

زیگزاگ با تعداد زنجیرهای زیگزاگ مشخص می‌شود که تحت تأثیر بی نظمی قرار گرفته‌اند. به عنوان مثال $d=1$ اگر زنجیر زیگزاگ 1 و N_{zz} شامل جای خالی باشد. احتمال p اشاره به درصدی از جاهای خالی دارد که در یک خط دایمر یا یک زنجیر زیگزاگ وجود دارد.

عملیاتی را که برای ساختن هامیلتونی در قسمت (۲) به کار گرفتیم، در اینجا نیز برای ساختن هامیلتونی معادله (۲) مورد استفاده قرار می‌دهیم. اثر بی نظمی تهی‌جایی بر روی چگالی حالت (DOS) نانوروبان‌های گرافینی زیگزاگ ($N_{zz}=6$) و دسته‌صندلی ($N_{ac}=10$)، با مقادیرهای متفاوت بی نظمی $P = \frac{0}{100}, \frac{1}{100}, \frac{5}{100}, \frac{30}{100}$ ، رسم شده است (شکل‌های ۵ و ۶). به طور کلی با افزایش بی نظمی نقاط تکینه مربوط به کانال‌ها هموار می‌شوند. هم‌چنین با افزایش بی نظمی پهنای باند DOS تغییر نمی‌کند. ثابت ماندن پهنای باند DOS در اثر بی نظمی تهی‌جایی یک رفتار طبیعی است، که در سیستم‌های مشابه نیز مشاهده می‌شود. برای GNRs زیگزاگ، این بی نظمی‌ها تقریباً



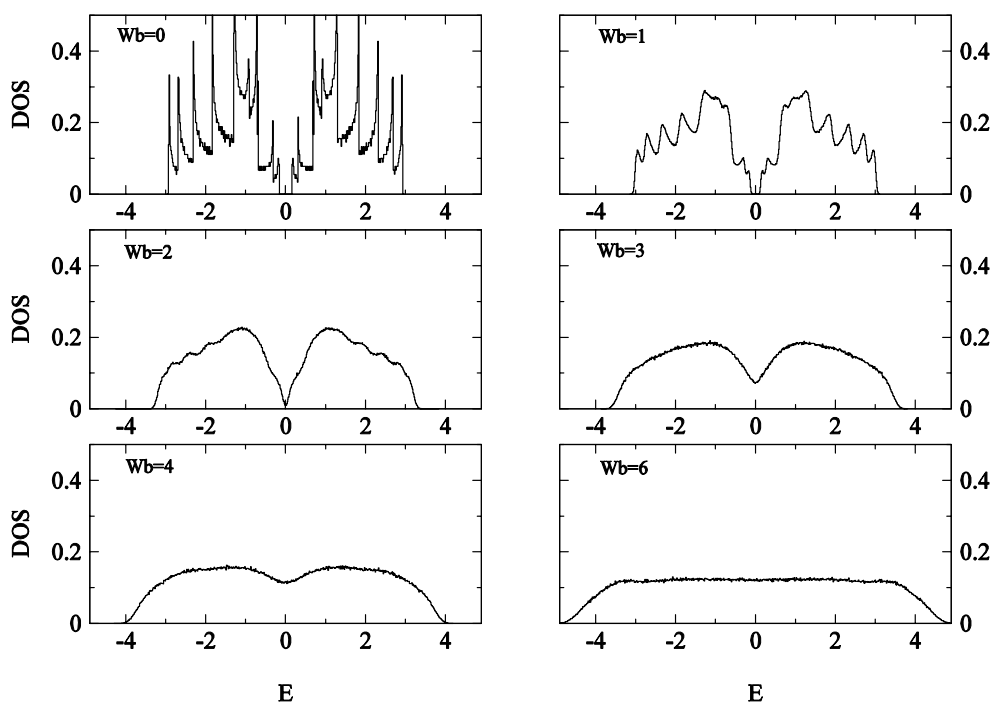
شکل ۶. اثر بی‌نظمی تراوش کوانتومی جایگاهی (روی مرز) بر روی چگالی حالت (DOS) نانو روبان‌های زیگزاگ ($N_{zz}=6$) با عرض $L_y = 1.8 \text{ nm}$ و طول $L_x = 122 \text{ nm}$. این شبکه دارای 10392 سایت می‌باشد. میانگین بی‌نظمی برای 5% توزیع مختلف به دست آمده است. در راستای طولی از شرایط مرزی دوره‌ای (pbc) استفاده شده است. در اینجا ϵ_i را برابر 100 و عمق d را برابر 1 فرض کرده‌ایم.

داده شده است. به طور کلی با افزایش بی‌نظمی نقاط تکیه مربوط به کانال‌ها هموار شده و سرانجام ناپدید می‌شوند. همچنین با افزایش بی‌نظمی پهنای باند DOS افزایش می‌یابد. افزایش پهنای باند در اثر بی‌نظمی اندرسون، یک رفتار طبیعی است که در سیستم‌های مشابه نیز مشاهده می‌شود. برای GNRs دسته‌بندی، با وارد کردن بی‌نظمی حالت‌های جایگزیده در گاف نانوروبان‌های دسته‌بندی ظاهر می‌شوند، و کمی بیشتر از مقدار بحرانی بی‌نظمی، این گاف کاملاً پر می‌شود. برای بی‌نظمی داخلی این گاف در $W_b/t = 2$ کاملاً بسته می‌شود، اما برای بی‌نظمی روی مرز، گاف در $W_e/t = 3$ بسته می‌شود. این نتیجه کاملاً منطقی است، چون اثر بی‌نظمی لبه به مراتب ضعیف‌تر از بی‌نظمی داخلی است. اما برای GNRs زیگزاگ، به محض وارد کردن بی‌نظمی قلّه واقع در انرژی فرمی از بین می‌رود. همان‌طور که از نمودارهای DOS پیداست، نانوروبان‌های دسته‌بندی حساسیت کمتری نسبت به بی‌نظمی اندرسون دارند تا نانوروبان‌های زیگزاگ. تفاوت هندسی مرزها تنها هنگامی مهم است که بی‌نظمی ضعیف باشد. برای بی‌نظمی قوی $W_b/t = 3$ ، نتایج چگالی حالات نانوروبان‌های زیگزاگ و دسته‌بندی تقریباً به طور کامل بر هم منطبق می‌شوند.

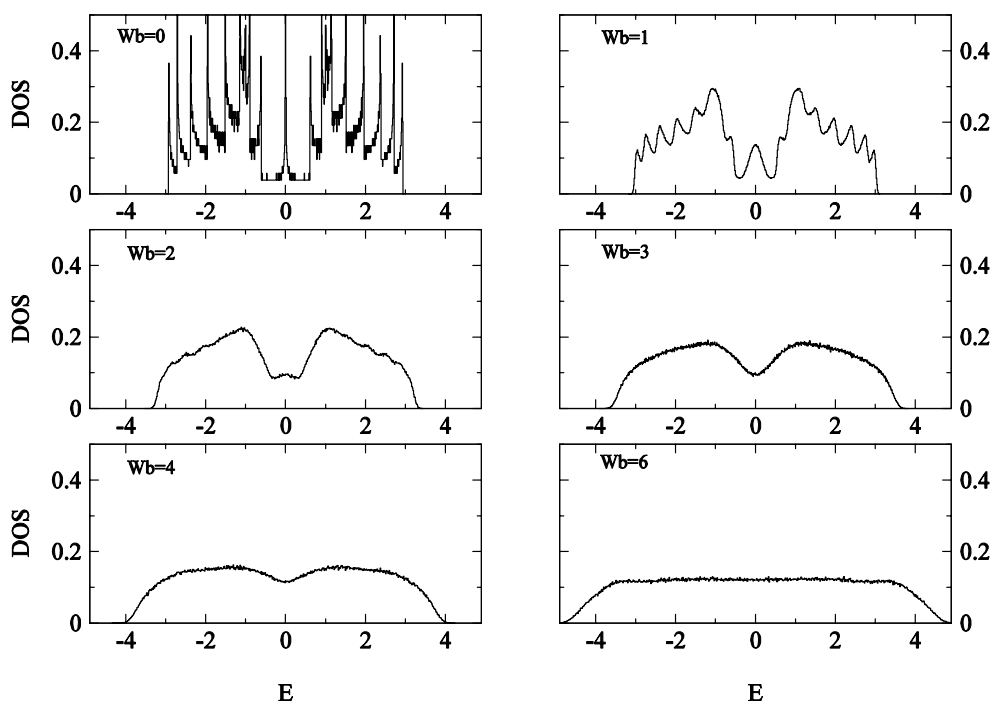
مرزهای زیگزاگ و دسته‌بندی وجود ندارد و این نتیجه با تجربه مطابقت دارد.

نانو روبان‌های گرافینی واقعی همیشه تعدادی پراکنده (به علت اعوجاج شبکه یا اتم‌های ناخالصی) دارند، که به طور تصادفی روی مرزها توزیع شده‌اند. در این قسمت خواص GNRs را تحت تأثیر بی‌نظمی اندرسون روی مرز و سطح آنها بررسی می‌کنیم. در بی‌نظمی اندرسون مقدار انرژی روی جایگاهی ϵ_i (معادله (۲))، به طور یکنواخت و تصادفی در بازه $\left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right]$ تغییر می‌کند، که به W پهنای شدت بی‌نظمی می‌گویند.

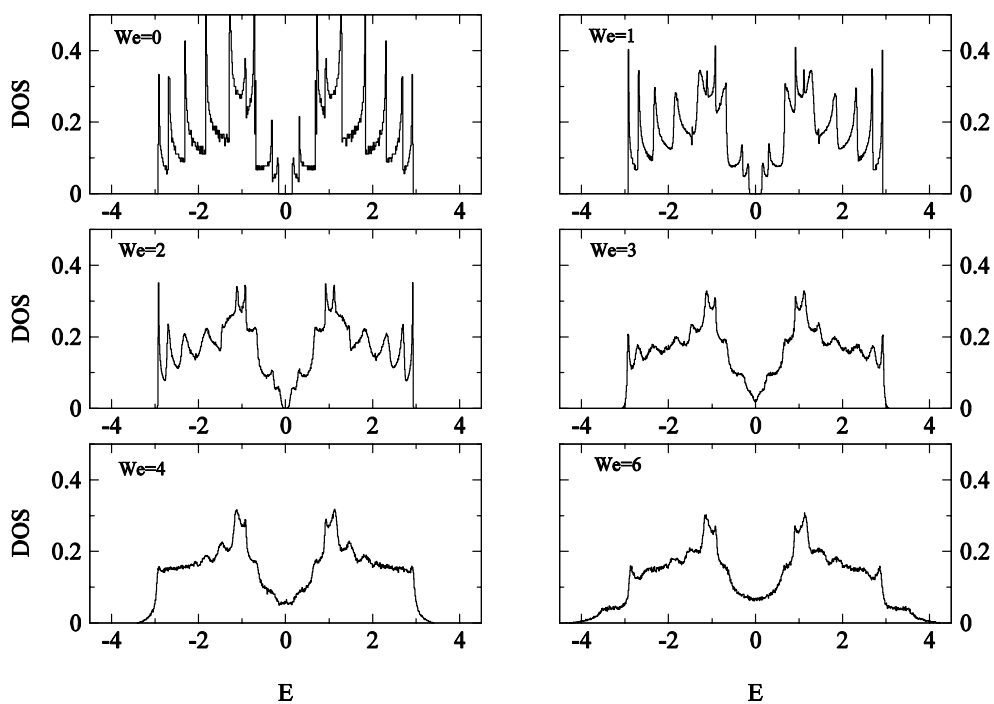
در اینجا نیز مانند قسمت اول پس از تشکیل ماتریس هامیلتونی معادله (۲) این ماتریس را قطری کرده و با استفاده از ویژه مقادیر انرژی، چگالی حالات سیستم را تشکیل می‌دهیم. نمودارهای DOS نانوروبان‌های زیگزاگ ($N_{zz}=6$) و دسته‌بندی ($N_{ac}=10$) با اندازه‌های متفاوت بی‌نظمی (روی مرز و سطح) $W_{\{e,b\}}/t = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ ، در شکل‌های ۷، ۸، ۹ و ۱۰ نشان



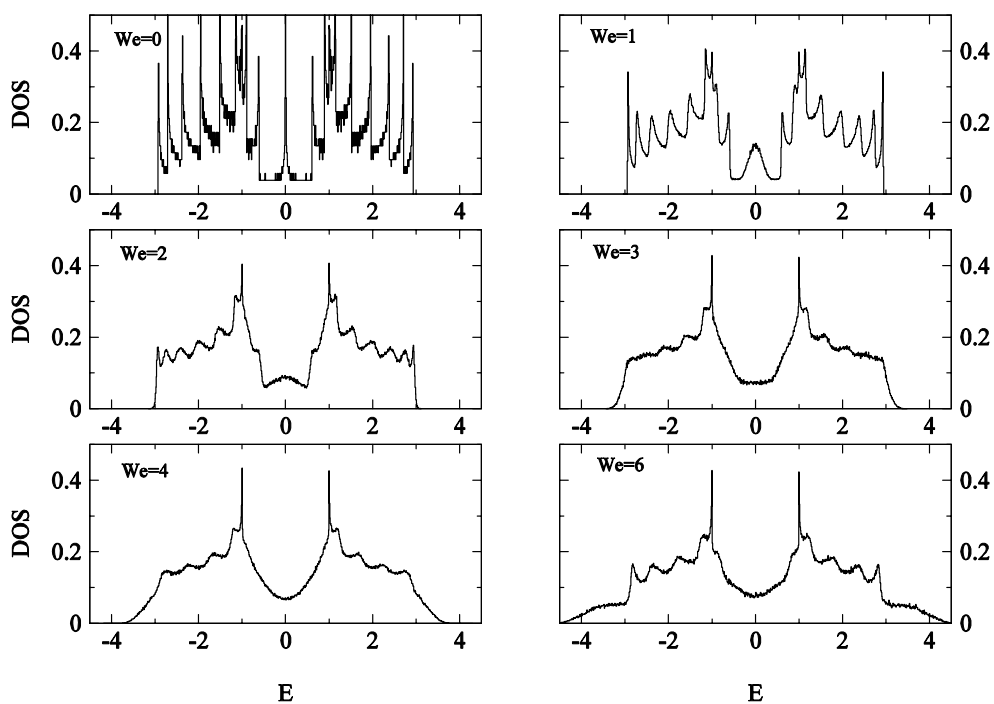
شکل ۷. اثر بی نظمی اندرسون (داخلی) بر روی چگالی حالت (DOS) نانورویان‌های دسته‌صندلی ($N_{ac}=10$) با عرض $L_y=18nm$ و طول $L_x=123nm$. این شبکه دارای ۱۰۰۰۰ سایت می‌باشد. میانگین بی نظمی برای 10^2 توزیع مختلف به دست آمده است. در راستای طولی از شرایط مرزی دوره‌ای (pbc) استفاده شده است (در این شکل‌ها $t=1$ فرض شده است).



شکل ۸. اثر بی نظمی اندرسون (داخلی) بر روی چگالی حالت (DOS) نانورویان‌های زیگزاگ ($N_{zz}=6$) با عرض $L_y=18nm$ و طول $L_x=123nm$. این شبکه دارای ۱۰۳۹۲ سایت می‌باشد. میانگین بی نظمی برای 10^2 توزیع مختلف به دست آمده است. در راستای طولی از شرایط مرزی دوره‌ای (pbc) استفاده شده است.



شکل ۹. اثر بی‌نظمی اندرسون (لبه) بر روی چگالی حالت (DOS) نانوروبان‌های دسته‌صندلی ($Nac = 10$) با عرض $L_y = 1.8nm$ و طول $L_x = 122nm$. این شبکه دارای ۱۰۰۰۰ سایت می‌باشد. میانگین بی‌نظمی برای 10^7 توزیع مختلف به دست آمده است. در راستای طولی از شرایط مرزی دوره‌ای (pbc) استفاده شده است.



شکل ۱۰. اثر بی‌نظمی اندرسون (لبه) بر روی چگالی حالت (DOS) نانوروبان‌های زیگزاگ ($Nzz = 6$) با عرض $L_y = 1.8nm$ و طول $L_x = 122nm$. این شبکه دارای ۱۰۳۹۲ سایت می‌باشد. میانگین بی‌نظمی برای 10^7 توزیع مختلف به دست آمده است. در راستای طولی از شرایط مرزی دوره‌ای (pbc) استفاده شده است.

اصطلاح (participation number)، تعداد سایت‌های شبکه می‌باشد که در حالت جایگزیده سهیم هستند. این موجب می‌شود که IPR در حد $N \rightarrow \infty$ مقدار محدودی، از مرتبه $P_p \propto \frac{1}{N}$ داشته باشد. در عمل محل تقاطع نمودار میانگین IPR نسبت به $\frac{1}{N}$ ، می‌تواند به عنوان مقیاسی برای تشخیص ویژه حالت‌های گسترده و جایگزیده استفاده شود. پس به طور کلی می‌توان نوشت:

$$P_p(N) = \frac{c_p}{N} + c_p \quad (5)$$

که در آن c_p برای حالت‌های گسترده صفر می‌باشد و برای حالت‌های جایگزیده یک مقدار غیر صفر دارد.

برای مشخص کردن رفتار جایگزیدگی و یا گسترده‌گی نانوروبان‌های گرافینی در حضور بی‌نظمی‌های متفاوت، ویژه حالت‌های آن را برای بازه‌های مختلف انرژی به دست می‌آوریم، سپس میانگین IPR این ویژه حالت‌ها را برای توزیع‌های مختلف بی‌نظمی محاسبه می‌کنیم، و نمودارهای IPR را بر حسب معکوس سائز سیستم رسم می‌کنیم. برای نمودارهایی که از مبدأ می‌گذرند، پیش‌بینی می‌شود که ویژه حالت‌های آنها در آن بازه گسترده هستند و برای نمودارهایی که عرض از مبدأ دارند، رفتار جایگزیده برای ویژه حالت‌های آن بازه پیش‌بینی می‌شود. محاسبات IPR نشان می‌دهد، برای روبان دسته‌صندلی ($N_{ac} = 10$) و زیگزاگ ($N_{zz} = 6$)، کوچکترین مقدار بی‌نظمی باعث می‌شود تمام ویژه حالت‌ها در اطراف انرژی فرمی در بازه $(-0.4, 0.4)$ جایگزیده شوند. پس میانگین IPR را برای بی‌نظمی ثابت و در بازه‌های بعدی انرژی $(0.4, 0.8)$ ، $(0.8, 1.2)$ ، $(1.2, 1.6)$ محاسبه می‌کنیم. نتایج محاسبات برای نانوروبان‌های زیگزاگ و دسته‌صندلی در شکل‌های ۱۱ و ۱۲ نشان داده شده است.

برای روبان دسته‌صندلی همراه با بی‌نظمی سطحی اندرسون، ویژه مقادیر برای بی‌نظمی‌های $W_{b/t} \geq 1$ ، در تمام بازه‌ها رفتار جایگزیده از خود نشان می‌دهند، این رفتار برای روبان دسته‌صندلی همراه با بی‌نظمی اندرسون لبه، برای بی‌نظمی‌های $W_{e/t} \geq 2$ دیده می‌شود. همچنین برای روبان دسته‌صندلی همراه با بی‌نظمی تهی‌جایی روی مرز، ویژه

جهت بررسی خواص ترابرد الکتریکی نانوروبان‌های گرافینی در حضور بی‌نظمی، باید جایگزیدگی و گسترده‌گی توابع موج الکترونی را مشخص کرد. در واقع شدت جایگزیدگی ویژه توابع هامیلتونی، پارامتر مناسبی جهت بررسی ترابرد می‌باشد. اگر توابع موج با انرژی‌های نزدیک به انرژی فرمی، به شدت جایگزیده باشند، می‌توان نتیجه گرفت که سیستم در فاز نارسا قرار دارد و در غیر این صورت، رسانایی محدودی وجود دارد. در این قسمت از روش (IPR) برای مشخص کردن جایگزیدگی و گسترده‌گی ویژه حالت‌ها استفاده شده است. در این جا برخی نکات مهم این روش را به اختصار بیان می‌کنیم.

یک روش تصمیم‌گیری برای شناسایی ویژه حالت‌های گسترده و جایگزیده، بررسی دومین گشتاور^۲ چگالی احتمال ویژه حالت‌ها می‌باشد [۱۶]، که IPR نامیده می‌شود. Q امین گشتاور چگالی احتمال ویژه حالت‌ها به وسیله رابطه زیر داده می‌شود:

$$P_q = \int d^d r |\psi(r)|^{2q} \quad (3)$$

در نتیجه دومین گشتاور ($q=2$) بر روی یک شبکه گسترده به صورت زیر است:

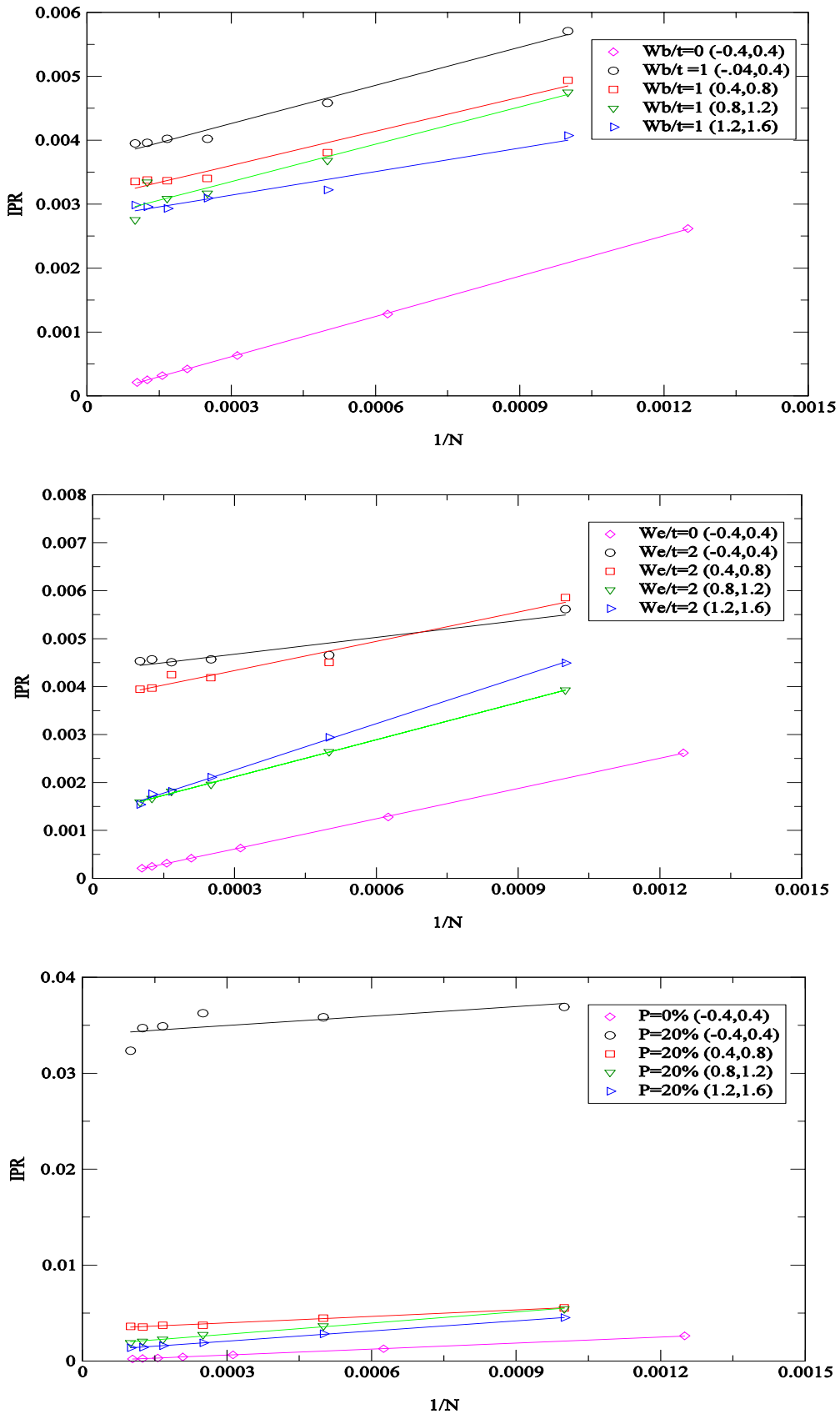
$$P_2 = \sum_i |\psi_i|^4 \quad (4)$$

در اینجا $|\psi_i|^2$ چگالی احتمال ویژه حالت‌ها در جایگاه i ام است. برای حالت‌های گسترده، ویژه تابع‌ها ارگودیک^۳ هستند و دامنه آنها با $\frac{1}{\sqrt{N}}$ متناسب می‌باشد، پس مقیاس‌های IPR نسبت به سائز سیستم مثل $P_2 \propto \frac{1}{N}$ تغییر می‌کند که در آن N تعداد کل جایگاه‌های شبکه می‌باشد. بنابراین برای حالت‌های گسترده هنگامی که $N \rightarrow \infty$ ، در نتیجه داریم $IPR \rightarrow 0$. برای یک حالت جایگزیده، دامنه ویژه حالات غیر صفر متناسب با $\frac{1}{\sqrt{N}}$ می‌باشد، و مقیاس‌های IPR نسبت به سائز سیستم مانند $P_2 \propto \frac{1}{N}$ می‌باشند که N (به

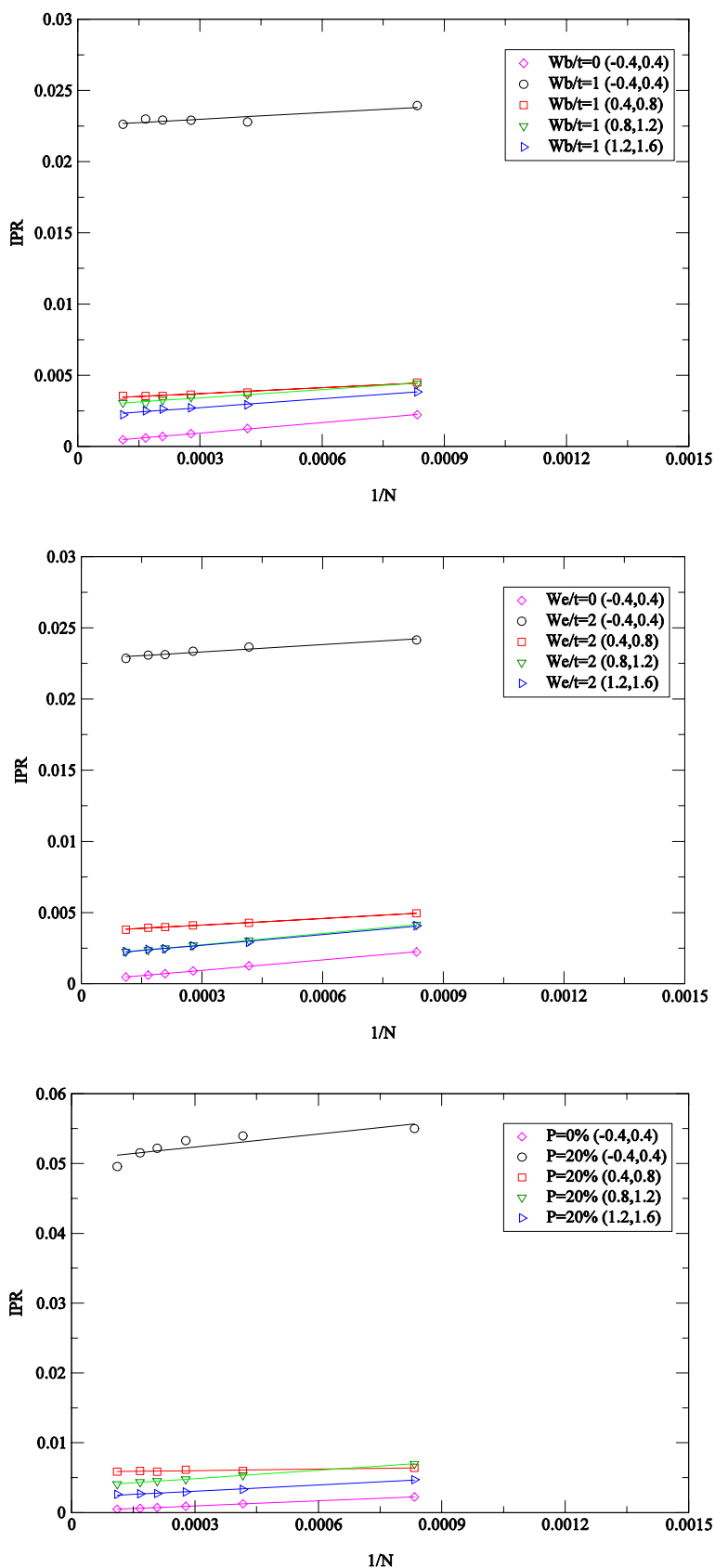
۱. Inverse participation ratio

۲. Second moment

۳. Ergodic



شکل ۱۱. نمودار IPR برای نانوروبان دسته‌بندی‌شده با بی‌نظمی‌های اندرسون (روی سطح و لبه) و تهی‌جایی (روی لبه).



شکل ۱۲. نمودار IPR برای نانوروبان‌های زیگزاگ با بی‌نظمی‌های اندرسون (روی سطح و لبه) و تهی‌جایی (روی لبه).

بی‌نظمی‌ها آسیب پذیر می‌کند. به این دلیل، نمونه‌های تولید شده در آزمایشگاه همیشه دارای بی‌نظمی‌هایی روی مرزها و سطح نانوروبان‌ها می‌باشند. این بی‌نظمی‌ها می‌توانند اثر مهمی روی خواص الکترونیکی نانو روبان‌ها داشته باشند. نتایج نشان می‌دهد به طور کلی بی‌نظمی، رسانایی را کاهش می‌دهد و در بی‌نظمی خاصی موجب جایگزیدگی تمام ویژه حالت‌ها می‌شود.

مقادیر برای $P \geq 0.80$ ، در تمام بازه‌ها رفتار جایگزیده دارند (شکل ۱۱).

نمودار شکل ۱۲ برای روبان زیگزاگ، نتایجی مشابه روبان دسته‌صندلی نشان می‌دهد.

وجود مرزهای باز در دو طرف نانو روبان آن را نسبت به

- 319 (2008) 1229.
9. D A Areshkin, D Gunlycke, and C T White, *Nano Lett.* **7** (2007) 204.
 10. D Gunlycke, D A Areshkin, and C T White, *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 142104.
 11. Z Chen, Y M Lin, M J Rooks, and P Avouris, *Physica E* **40** (2007) 228.
 12. A Lherbier, B Biel, Y M Niquet, and S Roche, *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 036803.
 13. Y W Son, M L Cohen, and S G Louie, *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 216803.
 14. R Satio, M Fujita, G Dresselhaus and M S Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **46** (1992) 1804.
 15. S Reich, J Maultzsch, C Thomsen, and P Ordejon, *Phys. Rev. B* **66** (2002) 035412.
 16. F Wegner. Inverse Participation Ratio in (2+e) dimensions. *Cond. Mat.: Z. Phys. B* **36** (1980) 209.
 1. K S Novoselov, A K Geim, S V Morozov, D Jiang, Y Zhang, S V Dubonos, I V Grigorieva, and A AFirsov, *Science* **306** (2004) 666.
 2. L D Landau and E M Lifshitz, "Statistical Physics" Pergamon Oxford (1980).
 3. F Schedin, A K Geim, S V Morozov, E W Hill, P Blake, M I Katsonelson, and K S Novoselov, *Nature Mater.* **6** (2007) 652.
 4. A K Geim and K S Novoselov, *Nature Mater.* **6** (2007) 183.
 5. M Fujita, K Wakabayashi, K Nakada, and K Kusakabe, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** (1996) 1920.
 6. K Nakada, M Fujita, G Dresselhaus, and M S Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **54** (1996) 17954.
 7. M Y Han, B Ozyilmaz, Y Zhang, and P Kim, *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 206805.
 8. X Li, X Wang, L Zhang, S Lee, and H Dai, *Science*