اولین همایش ملی نانوتکنولوژی مزایا وکاربردها

محل برگزاری : همدان دانشکده شهید مفتح

۱۵ اسفند ۱۳۹۲

(محاسبه عددی پاشندگی انرژی فونونی و بررسی ساختار درSWNTs)

*صدیقی – پریسا

۰۹۱۹۸۳۷۰۶۶۲

Par_sed67@yahoo.com

دانشگاه گیلان

۱. مقدمه:

فونونها همان ارتعاشات کوانتومی ناشی از شبکه بلور میباشند . دراینجا شبکه بلوری مورد نظرگرافن است که شامل یاخته های هگزاگونال بوده و در هر یاخته دو اتم کربن قرار دارد که میتوان آنها را سلول واحد نامید . ازاینرو به منظور پیداکردن رابطه پاشندگی فونونی مربوط به مدهای طولی (LA,LO) ناشی از جذب یا نشر فونونها بین ترازهای انرژی برای گرافن و بررسی فعل وانفعالات تا همسایه چهارم سلول واحد مرکزی به جهت دریافت نتایجی دقیقترمیباشیم و در نهایت به دنبال بدست آوردن باندهای انرژی در منطقه اول بریلوئن هستیم.

بطور کلی نانو لوله ها بصورت لوله هایی هستند که از پیچش صفحات گرافن (گرافیت) هم مرکز به فرم سیلندر تصورمیشوند و قابل به ذکر است که ساختار آنها را میتوان بوسیله دو بردار C_h و T به ترتیب بردارهای چیرال و انتقال توضیح داد. T در راستای محور نانولوله و C_hدر راستای عمود بر آن و نماینده محیط نانولوله است. وبه سه دسته نانو لوله های chiral(n,m) ، zigzag(n,0) و armchair (n,n) تقسیم میشوند ، که n , m اعداد صحیح میباشند و درصورتیکه تفاضل آنها مضربی از ۳ باشد، نانو لوله ها فلزی و در غیر اینصورت نیمرسانا خواهند بود.مشخص شده است که خواص فیزیکی و الکترونیکی SWNT ها به قطرلوله وساختار (n,m) آن بسنگی دارد. ازینرو در این مقاله به بررسی و مقایسه نانو لوله های تک لایه armchair , zigzag وبررسی نیمرسانا های zigzag میپردازیم.در اینجا قصد داریم درباره چگونگی و نحوه پراکندگی در نیمرساناها برای پاسخ به سوالاتی در این خصوص، صحبت کنیم ، به گونه ای که به تحلیل پراکندگی فونونهای آکوستیکی ناشی از تحرک حاملهای بار نیمرساناهای نانو لوله تک لایه zigzag خواهیم پرداخت و یادآور نکاتی شویم که میتوان با بهره گیری از آنها حالات مختلف را

همچون چگونگی تبدیل نانو لوله فلزی به نانو لوله نیمرسانا مورد بررسی قرار داد ، به گونه ای که بتوان از این مورد برای تحلیل پراکندگی ناشی از انتقال الکترونها وفونونها بهره گرفت .

۲.روشها:

۲.۱. پیداکردن رابطه پاشندگی فونونی:

در ابتدا به منظور پیداکردن رابطه پاشندگی فونونی ناشی از جذب یا نشر فونونها بااستناد به مقاله (April 2010, Tarek Ragab صفحات ۹۶-۱۰۰) در بین ترازهای انرژی میتوان برای گرافن با بهره گیری از روش Zone foldingوحل معادله ویژه مقداری نوسانگر هارمونیک بدست آمده از معادله وابسته به زمان شرودینگر به ویژه مقادیر انرژی و زیرباندهای انرژی (ناشی از جذب یا نشرفونونی بین ترازها) و درنهایت به پاشندگی انرژی فونونی در مناطق مختلف بریلوئن دست پیداکرد.بامشتق زمانی گرفتن ازجابجایی اتمها در معادله وابسته به زمان شرودینگر و با کمک گرفتن از تبدیل فوریه گسسته ماتریس سختی ، معادله حرکت نوسانی شبکه در فضای حقیقی را میتولن بدست آورد که در این راستا از تبدیل لاپلاس زمان وتبدیل فوریه گسسته معادله شبکه حرکت در فضای حقیقی ازمعادله

$$[M]\{\ddot{u}(t)\} = \sum_{n'=1}^{N} [k_{n-n'}]\{u_n(t) - u_{n'}(t)\} \qquad (۱)$$

$$(\omega^2(q)\,[M] + [K(q)]\,)\,u(q,\omega) = ۰ \qquad (۲)$$

استفاده میشود،چراکه بررسی تا همسایه چهارم سلول واحد مرکزی گرافن نتایج دقیقتری رابدست میدهد،بنابراین لازم است که از یک پتانسیل هارمونیک درون اتمی بین اتمها استفاده شود).

در این معادله$u_n(t)$ و$\ddot{u}(t)$ به ترتیب جابجایی و شتاب اتمn، ($K_{n-n'}$)ماتریس سختی میباشد که نشانگر پیوند اتمی بین اتمهایn, n' میباشد،$k(q)$ تبدیل فوریه گسسته ماتریس سختی است :

$$k(q) = \sum_{k=0}^{n} (k_{n-n'})e^{-iq.rn} \qquad (۳)$$

و r_n بردار موقعیت اتم nام میباشد. نکته قابل ذکر این است که تعداد۱۷ سلولهای واحد مورد استفاده برای $k(q)$در گرافن تاهمسایه چهارم است، بطوریکه هرسلول واحدخودشامل۲اتم کربن A,Bمیباشد.