بررسی اثر تنش در تابع طیفی شبکه لانه زنبوری ناهمسانگرد گرافین مطابق حد نواری مدل هابارد

مریم حجتی‌فر، پیمان صاحب‌سرا

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، ۸۴۱۵۶۸۳۱۱۱، اصفهان

چکیده

ساختار دوبعدی گرافین، به صورت شبکه لانه زنبوری همسانگرد از اتم‌های کربنی تشکیل شده است. این ساختار دارای خواص الکترونی مشخصی است، برای مثال نوارهای آن در سطح فرمی بدون گاف انرژی بوده و الکترون‌ها در آن به صورت فرمیون‌های دیراک عمل می کنند. بر اثر اعمال فشار و کشش الکتروشیمیایی، تغییراتی در هندسه شبکه و پارامترهای پرش الکترون ایجاد می‌شود. در این مقاله با استفاده از حدنواری مدل هابارد، ناهمسانگردی را در ساختار الکترونی گرافینی بررسی می‌کنیم. بدین منظور فقط حالت‌های که ویژگی‌های الکترونی رابیان می‌کنند را در نظر می‌گیریم و تابع طیفی مربوط به این حالت‌ها را با تابع طیفی شبکه لانه زنبوری همسانگرد در گرافین مقایسه می کنیم. مشاهده می‌کنیم که با اعمال تنش در یک راستا گاف در تابع طیفی در سطح فرمی ایجادخواهد شد.

The study of electronic energy bands of anisotropic honeycomb lattice by band limit of the Hubbard model

Hojatifar, Maryam; Sahebsara, Peyman

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran

Abstract

The two-dimensional structure of graphene, consisting of an isotropic hexagonal lattice of carbon atoms, shows fascinating electronic properties, such as a gapless energy band and Dirac fermion behavior of electrons at fermi surface. By application of electrochemical pressure or strain, the structure of the lattice changes and hopping terms are influenced. In this article, we study the band limit of the Hubbard model; in this limit we review anisotropy effects in the electronic nanostructure of graphene in one direction. For this purpose, we just consider π states, which express electronic characteristics, and compare spectral function of π states with that of isotropic honeycomb lattice in graphene. As a result, by applying pressure in one direction, the gap will be justified in the spectral function at the fermi surface.

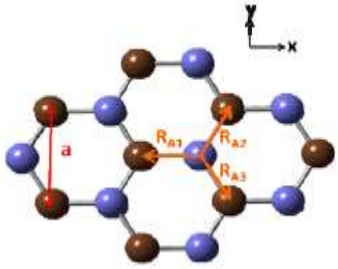
PACS No. ۷۳

مقدمه

گرافین دارای ساختار دوبعدی از اتم‌های کربن است که در آن اتم‌های کربن در یک شبکه لانه‌زنبوری مطابق شکل ۱ قرار گرفته‌اند. نخستین بار در سال ۱۹۴۷ والاس[۱] گزارشی درباره گرافین نوشت[۱،۲]. در ساختار گرافین شش الکترون اتم کربن اوربیتال‌های اتمی $1S^2,2S^2,2P^2$را اشغال می‌کنند. از آنجایی که اختلاف انرژی بین ترازهای 2S و 2P از انرژی بستگی آنها کوچک‌تر است، تابع موج این چهار الکترون به راحتی هیبرید می‌شوند. این اوربیتال‌ها با اتم‌های همسایه، پیوندهای کوالانسی[۲] تشکیل می‌دهند که به آنها پیوندهای σ می‌گویند. این پیوندها مسئول ویژگی‌های مکانیکی گرافین هستند و در نظریه‌ای که ویژگی‌های الکترونی گرافین را توضیح می‌دهد، نادیده گرفته می‌شوند. با توجه به تقارن الکترونی اوربیتال $2P_z$ با اوربیتال‌های 2S یا $2P_x$ و $2p_y$ همپوشانی نمی‌کنند. اوربیتال‌های $2P_z$ که برصفحه گرافین عمود هستند، برای تشکیل پیوند π با اتم‌های همسایه پیوند برقرار می‌کنند و الکترون‌ها در این حالت بین اتم‌های همسایه حرکت می‌کنند. بنابراین برای بررسی خواص الکترونی گرافین از حالت‌های π استفاده می‌کنیم. اوربیتال‌های π در حالت‌های π پیوندی و ضدپیوندی در طیف انرژی شرکت می‌کنند. حالت‌های π پیوندی نوار ظرفیت و حالت‌های π ضدپیوندی نوار هدایت را تشکیل می‌دهند[۲،۳]. الکترون‌های سیار در گرافین، به‌دلیل ساختار لانه‌زنبوری دوبعدی شبکه، مانند فرمیون‌های دیراک رفتار می‌کنند. ساختار الکترونی منحصر به فرد گرافین مخروطی شکل که در یک نقطه در فضای تکانه تلاقی دارند مشخص می‌شود[۴].

در این پژوهش هدف محاسبه تابع طیفی شبکه لانه زنبوری گرافین در حد نواری مدل هابارد روی شبکه لانه زنبوری است. مدل هابارد یکی از ساده‌ترین مدل‌های کوانتش دوم در فیزیک ماده چگال است که حرکت کوانتومی الکترون‌ها یا حفره‌ها را در یک جامد و در حضور برهم‌کنش دافعه کولنی بین الکترون‌ها به حساب می‌آورد، به ویژه در نظریه دستگاه‌های الکترونی همبسته قوی کاربرد دارد و در مطالعه شبکه‌های فرمیونی بیش از همه مورد توجه قرار گرفته است. برای توصیف پدیده‌های مختلف از جمله: گذار فلز-عایق، فرومغناطیس و ابررسانایی مورد استفاده قرار می گیرد. این مدل در ابتدا به طور هم زمان توسط گاتزویلر[۳]، هابارد[۴] و کانامووری[۵] ارائه شده است [۵].

ساختار نواری گرافین نشان می‌دهد که گرافین یک نیم‌رسانای بدون گاف است و به دلیل نبود گاف نواری اختلاف زیادی با نیم‌رساناهای دوبعدی دارد. روش‌های مختلفی برای ایجاد گاف در شبکه پیشنهاد شده است، که می‌تواند با ناهمسانگردسازی شبکه از طریق فشار و کشش تک محوره، تغییر در همپوشانی تابع موج الکترونی ایجاد شود. که در این مقاله ناهمسانگردسازی شبکه از طریق فشار و کشش تک محوره است[۶].



شکل۱: شبکه لانه‌زنبوری گرافین.

مدل هابارد

هامیلتونی هابارد شامل دو جمله یکی جهش و دیگری جمله برهم کنش دافعه غیرخطی است. انرژی جنبشی (پرش الکترون) به غیر جایگزیده کردن الکترون‌ها در حالت‌های سیار (حالت های بلاخ) تمایل دارد، که منجر به رفتار فلزی می‌شود. برهم‌کنش الکترون-الکترون که با برهم‌کنش الکترونی در یک جایگاه تقریب زده می‌شود به جایگزیده کردن الکترون‌ها درون جایگاه‌ها تمایل دارد. که منجر به گذار به یک عایق مات می‌شود. هامیلتونی هابارد با رابطه زیر داده می‌شود:

$$H=\sum_{\langle i,j\rangle\sigma} t_{ij}\left(c'_{i\sigma}c_{j\sigma}+c'_{j\sigma}c_{i\sigma}\right)+U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \quad (۱)$$

[۱] Wallas
[۲] Covalent Bonds
[۳] Gutzwiller
[۴] Hubbard
[۵] kanamory

که در آن i و j شاخص جایگاه‌های شبکه هستند، عملگر $c^{\dagger}_{i\sigma}(c_{i\sigma})$ الکترونی با اسپین σ را روی جایگاه i خلق (نابود) می‌کند، $n_{i\sigma}=c^{\dagger}_{i\sigma}c_{i\sigma}$ عملگر چگالی تعداد الکترون‌ها با اسپین σ در جایگاه i است. t_{ij} دامنه پرش بین جایگاه‌های i و j را نشان می‌دهد و U جمله برهم‌کنش دافعه کولنی بین الکترون‌ها درون یک جایگاه است. همواره در بررسی و مطالعه مدل هابارد، بررسی دو حد برای این مدل از اهمیت بالایی برخوردار است. این موارد حدی عبارتند از: حد نواری $U=۰$ و حد اتمی $t=۰$. در حد نواری که همان حد نوارهای الکترونی غیربرهم‌کنشی $U=۰$ هامیلتونی شبیه هامیلتونی مدل تنگابست خواهد بود. بنابراین هامیلتونی قطری بوده و به جای حالت‌های وانیر از حالت‌های بلاخ استفاده می‌شود. انرژی جنبشی در فضای تکانه قطری است. که برای رابطه پاشندگی آن داریم:

$$\varepsilon_k = t\sum_{\delta} e^{ik.\delta} \qquad (۲)$$

δ مختصات جایگاه‌های همسایه است[۷]. برای شبکه لانه زنبوری ε_k برحسب نزدیکترین همسایگان به صورت زیر خواهد بود:

$$\varepsilon(k)=t\left(2\cos\left(\frac{ik_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right)+\exp(-ik_x a)\right) \qquad (۳)$$

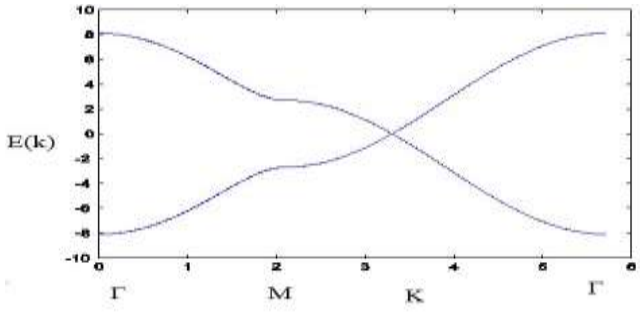
مقدار پارامتر پرش مربوط به سه همسایه اول $t = ۲/۷\ eV$ است [۸]. با اعمال تنش تغییراتی در پارامترهای شبکه لانه زنبوری به وجود می‌آید، که این به نوبه خود ثابت‌های پرش به همسایگان را تحت تأثیر قرار می‌دهد. این تغییرات پارامترهای پرش را به طور مؤثر به شکل زیر تعریف نمود

$$t_i = t_0\left(\frac{a_0}{a_i}\right)^2 \qquad (۴)$$

t_0 پارامتر پرش اولیه، a_0 ثابت شبکه، a_i ثابت شبکه تغییر یافته است [۹]. حال طبق معادله ویژه مقداری، ویژه مقادیر انرژی شبکه لانه‌زنبوری را بدست می‌آوریم:

$$E(k)=t\sqrt{1+4\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}kya\right)\cos\left(\frac{3}{2}kxa\right)+4\cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}kya\right)} \qquad (۵)$$

همه‌ی ویژه مقادیر به وسیله بردار موج k در هر یاخته واحد در شبکه‌های دوره‌ای در فضای متقابل بدست می‌آید، که ناحیه اول بریلوئن نامیده می‌شود [۸]. با رسم نمودار ویژه مقادیر انرژی در ناحیه اول بریلوئن نوارهای الکتریکی π و π^* شبکه گرافین مطابق شکل ۲ بدست آمده است.



شکل۲: نوارهای الکترونی شبکه لانه زنبوری گرافین.

تابع طیفی

با داشتن هامیلتونی دستگاه، می‌توان تابع گرین بس‌ذره‌ای را به شکل

$$G(k,w) = (z - H) \qquad (۶)$$

بدست آورد، که در آن $z = w - i\eta$ *تعریف می‌شود*. w. فرکانس ماتسوبارا برای فرمیون‌ها است. تابع گرین برای شبکه لانه زنبوری گرافین به دلیل این که پایه‌های شبکه دو اتمی است به صورت یک ماتریس دو در دو خواهد بود:

$$G(k,iw) = \begin{pmatrix} iw & \varepsilon_k \\ \varepsilon_k & iw \end{pmatrix}. \qquad (۷)$$

با استفاده از تابع گرین میتوان تابع طیفی را به‌دست آورد.

$$A(k,w) = -\frac{۱}{\pi} Im\, G(k,w) \qquad (۸)$$

با جمع بر روی نقاط پر تقارن، چگالی حالت‌ها را با رابطه زیر تعریف می‌کنیم:

$$\rho(w) = -\frac{۱}{N}\sum_k A(k,w) \qquad (۹)$$

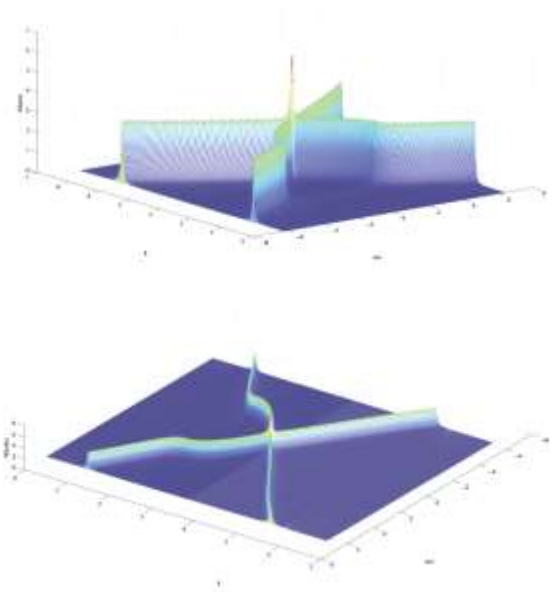
که در آن N تعداد کل حالت‌ها است [۱۰،۱۱].

نتایج و بحث

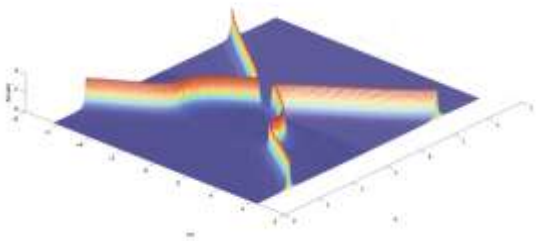
با رسم نمودار تابع طیفی در ناحیه اول بریلوئن بر حسب فرکانس می‌توان نوارها را برای شبکه همسانگرد و ناهمسانگرد گرافین بدست آورد و باز و بسته شدن گاف را در حالت‌های مختلف ناهمسانگردی بررسی کرد. وقتی شبکه لانه‌زنبوری تحت تأثیر هیچ‌گونه تنشی قرار

نگرفته باشد یا به عبارتی همسانگرد باشد، نمودار تابع طیفی مطابق شکل ۳ خواهد بود.

همزمان با اعمال تنش تغییراتی در هندسه و پارامتر پرش شبکه ایجاد می‌شود. وقتی تنش در راستای محور x با مقدار $R_{A۱}=$ $۱/۰۵R_{A۲}$باشد، $t_{RA۱}$ طبق رابطه (۴) تغییر می‌کند، و در تابع طیفی بین نوارها گاف ایجاد خواهد شد (شکل ۴).



شکل۳: تابع طیفی شبکه لانه زنبوری گرافین در منطقه اول بریلوئن برحسب فرکانس با $t = ۲/۷eV$از دو منظر متفاوت.



شکل ۴: تابع طیفی شبکه لانه زنبوری گرافین در منطقه اول بریلوئن برحسب فرکانس با $t_{RA۲,RA۳} = ۲/۷eV$ و $t_{RA۱} = ۲/۴۴eV$.

با اعمال تنش در راستای محور افقی هندسه و پارامتر پرش شبکه هر دو تحت تأثیر قرار می‌گیرند. اگر تنش در حد ۱۰ تا ۲۰ در صد باشد ساختار و زاویه‌های شبکه تغییری نخواهند کرد، فقط $t_{RA۱}$ تغییر می‌کند. وقتی که تنش بیش از ۲۰ درصد باشد علاوه بر ساختار، t *شبکه به‌طور کلی* تغییر می‌کنند. اگر ما اثر برهم‌کنش الکترونی U را هم وارد کنیم خواهیم دید که با تغییر U گاف سریعتر باز می‌شود. که این محاسبات در حال بررسی هستند.

مراجع:

[۱] H. Min, J. E. Hill, N. A. Sinitsyn, B. R. Sahu, L. Kleinman, and A. H. MacDonald. Intrinsic and Rashba spin-orbit interactions in graphene sheets. Physical Review B, ۷٤(۱٦), ۱٦٥۳۱۰, (۲۰۰٦).

[۲] K. S. Novoselov et a., "Electric field effect in atomically thin carbon films." science ۳۰٦, ٥٦۹٦ (۲۰۰٤).

[۳] P. Dietl, "Numerical studies of electronic transport through Graphene nanoribbons with disorder." Karlsuhe Institute of Technology (۲۰۰۹).

[٤] K. Wakabayashi, Y. Takane, M.Yamamoto, and M. Sigrit, "Electronic transport properties of graphene nanoribbons ", arXiv: ۰۹۰۷,٥۲٤۳ (۲۰۰۹).

[٥] H. Tasaki," from nagaoka's feromagnetism to flat-band feromagnetism and beyond an introdution to feromagnetismin the hubbard model." progress of theoretical physics ۹۹-٤., ٤۸۹-٥٤۸ (۱۹۹۸).

[٦] W. Guangquan. "Strongly Correlated phases in the anisotropic honeycomb lattice", Diss. (۲۰۱۲).

[۷] Fazekac, P., "Lecture note on Electron correlation and magnetism. " Reserch Institute for solid state Physics, Budapest, (۲۰۰۳).

[۸] M. Roy, and P. A. Maksym, Semiconducting carbon nanotube quantum dots: Calculation of the interacting electron states by exact diagonalisation. EPL (Europhysics Letters), ۸٦(۳), ۳۷۰۰۱, (۲۰۰۹).

[۹] W. A. Harrison, "Electronic Structure and the Properties of Solids", Dover Publications (۱۹۸۹).

[۱۰] H. Bruus, F. Karsten, "Many-body quantum theory in condensed matter physic", Published by Oxford GraduateTexts, (۲۰۰٤).

[۱۱] N. A. Pike, and D. Stroud. Tight-binding model for adatoms on graphene: Analytical density of states, spectral function, and induced magnetic moment. Physical Review B, ۸۹(۱۱), ۱۱٥٤۲۸. (۲۰۱٤).