Research Paper

Electrical Conductivity of Armchair Carbon and Boron Nitride Nanotubes in Tight-binding Model[1]

Hamze Mousavi*[2], Sousan Mohammadi[3], Samira Jalilvand[4]

Received: 2020.04.18
Accepted: 2020.06.27

Abstract
In this study, within the tight-binding Hamiltonian model, the Green's function approach, and the Kubo formula, the density of states and the electrical conductivity (EC) of armchair carbon and boron nitride (BN) nanotubes with different diameters are investigated and the results are compared with graphene and BN monolayers. The results show that, contrary to graphene, which is a semimetal, armchair carbon nanotubes of any diameter are conductors, while armchair BN nanotubes similar to a BN monolayer are all semiconductors. Also, since it is a semimetal, the EC of graphene is observed to be higher than BN monolayer at all temperatures. In addition, it can be seen that the ECs of both types of nanotubes decrease with increasing diameter and approaches the EC of graphene and BN monolayer because the increase in the cross section size provides more lateral ways for electrons to move in transverse directions with respect to the longitudinal axis, and this in turn reduces their mobility along that longitudinal axis. It is also observed that by increasing the diameter, the behaviors of carbon and boron nitride nanotubes respectively approach those of graphene and boron nitride plane.
Keywords: *Armchair Carbon Nanotubes, Armchair Boron Nitride Nanotubes, Tight-binding Model, Green's Function Approach, Electrical Conductivity.*

[1] DOI: 10.22051/jap.2020.31076.1159
[2] Associate Professor, Department of Physics, Razi University, Kermanshah, Iran. (Corresponding Author). Email: hamze.mousavi@gmail.com.
[3] MSc in Physics, Department of Physics, Razi University, Kermanshah, Iran. Email: s.mohammadi926@gmail.com
[4] Phd Student in Physics, Department of Physics, Razi University, Kermanshah, Iran. Email: samira.jalilvand@gmail.com

فصلنامهٔ علمی فیزیک کاربردی ایران، دانشگاه الزهرا
سال نهم، پیاپی ۱۹، زمستان ۱۳۹۸

مقاله پژوهشی

رسانندگی الکتریکی نانولوله‌های کربنی و نیترید بور آرمچیر در مدل تنگ‌بست[1]

حمزه موسوی*[2]، سوسن محمدی[3]، سمیرا جلیلوند[4]

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱/۳۰
تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۴/۷

چکیده

در این مقاله، چگالی حالت‌ها و رسانندگی الکتریکی نانولوله‌های کربنی و نیترید بور آرمچیر با قطرهای مختلف با استفاده از تقریب تنگ‌بست، رهیافت تابع گرین و رابطهٔ رسانندگی کوبو محاسبه می‌شود و نتایج حاصل با چگالی‌حالت‌ها و رسانندگی الکتریکی یک صفحهٔ گرافین و نیترید بور مقایسه می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که نانولوله‌های کربنی آرمچیر برخلاف صفحهٔ گرافین که نیم‌فلز است، همگی رسانا هستند در حالی که نانولوله‌های نیترید بور آرمچیر مشابه با یک صفحهٔ نیترید بور، همگی نیم‌رسانا می‌باشند. هم‌چنین، مشاهده می‌شود که رسانندگی الکتریکی صفحه‌گرافینی به دلیل نیم‌فلز بودن در همهٔ دماها از صفحهٔ نیترید بور بیشتر است. علاوه بر این‌ها، دیده می‌شود که

---

[1] DOI: 10.22051/jap.2020.31076.1159

[2] دانشیار، گروه فیزیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران. (نویسنده مسئول). hamze.mousavi@gmail.com

[3] دانش آموختهٔ کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران.
s.mohammadi926@gmail.com

[4] دانشجوی دکترا، گروه فیزیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران. samira.jalilvand@gmail.com

رسانندگی الکتریکی هر دو نوع نانولوله با افزایش قطر و سطح مقطع، کاهش می‌یابد چرا که با افزایش قطر مسیرهای عرضی جدیدی برای حرکت الکترون ایجاد می‌شود و در نتیجه تحرک و رسانندگی در راستای طول نانولوله‌ها کاهش می‌یابد. به علاوه مشاهده می‌شود که با افزایش قطر، رفتار نانولوله‌های کربنی به سمت گرافین و نانولوله‌های نیترید بور به سمت صفحهٔ نیترید بور میل می‌کند.

واژه‌های کلیدی: *نانولولهٔ کربنی آرمچیر، نانولولهٔ نیترید بور آرمچیر، مدل تنگ‌بست، رهیافت تابع گرین، رسانندگی الکتریکی.*

۱. مقدمه

مواد کربنی و نانوساختارهای مرتبط با آن همواره در تمامی علوم مورد توجه بوده‌اند. در سال‌های اخیر، با کشف گونهٔ دوبعدی اتم کربن به نام گرافین [۱، ۲] توجه به این مواد افزایش یافته است. گرافین ساختاری تک‌لایه از اتم‌های کربن است که این اتم‌ها در گرافین در یک شبکهٔ دوبعدی کندومانند به یکدیگر متصل شده‌اند. اگر گرافیت را به صورت یک دفترچه از صفحات موازی در نظر بگیریم به هر ورق آن گرافین گفته می‌شود. اتم‌ها در صفحهٔ گرافین با پیوندهای قوی کووالانسی به یکدیگر متصل شده‌اند ولی صفحات با نیروی ضعیف واندروالس بر روی یکدیگر می‌لغزند [۳]. گرافین هیبریداسیون sp^2 دارد؛ اتم کربن چهار الکترون ظرفیت، یک الکترون در اربیتال s و سه الکترون در اربیتال p، دارد. اربیتال‌های s و p_x و p_y هیبرید می‌شوند و سه اربیتال هیبریدی sp^2 را ایجاد می‌کنند که با هم زوایای ۱۲۰ درجه می‌سازند و تشکیل سه پیوند σ می‌دهند. اربیتال p_z بر صفحهٔ sp^2 عمود است و یک پیوند π ایجاد می‌کند. پس هر اتم کربن در صفحهٔ گرافین سه پیوند σ و یک پیوند π عمود بر صفحه دارد [۴].

نیترید بور یک ترکیب شیمیایی با فرمول BN است، که متشکل از تعداد مساوی از اتم‌های بور و نیتروژن است. این ترکیب در طبیعت یافت نشده و سنتز آن برای اولین بار در سال ۱۸۴۲ به وسیلهٔ بالمین[1] با استفاده از واکنش بین بورونیک اسید مذاب و پتاسیم سیانید انجام شد [۵]. این ترکیب نیز مانند اتم کربن به شکل‌های بلوری مختلفی وجود دارد که فرم شش‌وجهی آن با ساختار لایه لایه مشابه با گرافیت، پایدارترین و نرم‌ترین نوع نیترید بور است. یک صفحهٔ نیترید بور شش‌گوشی ساختاری مشابه با گرافین دارد، با این تفاوت که به جای اتم‌های کربن در گرافین به تعداد مساوی اتم‌های بور و نیتروژن به صورت یک در میان جایگزین می‌شوند.

---

[1] Balmain

نانولوله‌های کربنی از دیگر نانوساختارهای کربنی هستند که توجه دانشمندان زیادی را به خود جلب کرده‌اند [۶]. نانولوله‌ها ساختار استوآن‌های دارند و آرایش کربن در دیواره‌های این استوانه مشابه آرایش کربن در گرافین است. در واقع، یک نانولولهٔ کربنی، صفحهٔ گرافینی است که به شکل استوانه درآمده است و بسته به جهت لوله شدن صفحهٔ گرافین در سه نوع آرمچیر یا زیگ‌زاگ یا دستگردی[1] وجود دارد [۷].

اخیراً این نانوساختارها به دلیل خواص منحصربه‌فرد و کاربردهای فراوانشان در صنایع الکترونیک و پزشکی و نظامی بسیار مورد توجه قرار گرفته اند [۸ـ۱۰]. در سال‌های اخیر، مطالعات زیادی در خواص نانولوله‌ها از جمله خواص اپتیکی، رسانندگی الکتریکی و گرمایی، ظرفیت گرمایی، اثرات مغناطیسی و تزریق ناخالصی انجام شده است [۱۱ـ۱۴]. یکی از جذاب‌ترین خواص نانولوله‌های کربنی، رسانندگی الکتریکی آن‌هاست که با توجه به قطر و دستگردی آن‌ها ممکن است متغیر باشد [۱۵]. خواص الکتریکی گرافین و نانولوله‌های کربنی را با بررسی الکترون‌های π در مدل تنگ‌بست [۳] می‌توان توضیح داد اما برای مطالعهٔ دقیق‌تر می‌توان سهم تمام الکترون‌های ظرفیت یعنی سهم تمام اربیتال‌های اتمی را نیز بررسی کرد.

در این پژوهش با استفاده از تقریب تنگ‌بست و رهیافت تابع گرین، چگالی حالت‌ها و رسانندگی الکتریکی نانولوله‌های کربنی و نیترید بور آرمچیر را محاسبه می‌کنیم. ابتدا صورت بندی تقریب تنگ‌بست و رهیافت تابع گرین را با در نظر گرفتن الکترون‌های π ارائه می‌دهیم. سپس با استفاده از هامیلتونی تنگ‌بست در نمایش نواری، تابع گرین و رابطهٔ رسانندگی کوبو[2]، رسانندگی الکتریکی را برحسب دما برای نانولوله‌ها با قطرهای مختلف به دست می‌آوریم و نتایج آن را با صفحهٔ گرافین و نیترید بور مقایسه می‌کنیم. در آخر بحث و نتیجه‌گیری را بیان می‌کنیم.

۲. تقریب تنگ‌بست و رهیافت تابع گرین

هامیلتونی تنگ‌بست در کوانتش دوم برای ساختارهای مورد مطالعه در این مقاله به صورت زیر است [۱۶ـ۱۹]:

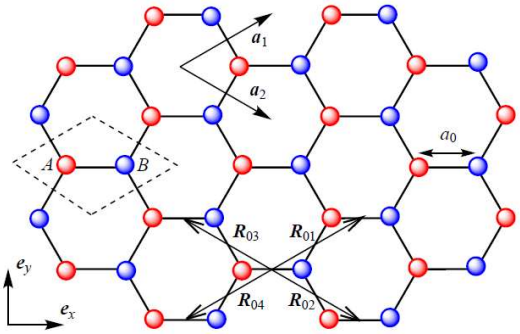
$$H = \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^{N_c} \varepsilon_i^{\alpha} c_i^{\alpha\dagger} c_i^{\alpha} + \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i,j=1}^{N_c} t_{ij}^{\alpha\beta} c_i^{\alpha\dagger} c_j^{\beta}, \qquad (1)$$

که در این رابطه α و β به زیرسایت‌های A و B در یاخته یکهٔ شبکهٔ براوه اشاره دارد، i و j موقعیت یاختهٔ یکه را مشخص می‌کند، N_c تعداد یاخته‌های یکه را در شبکهٔ براوه نشان می‌دهد و

---

[1] Chiral
[2] Kubo

ε_i^α نشانگر انرژی درون‌سایتی الکترون α در سایت iام است. $t_{ij}^{\alpha\beta}$ معرف احتمال پرش الکترون π اتم α در سایت i ام شبکه براوه به نزدیک‌ترین همسایه‌اش یعنی اتم β در سایت j ام است. $c_i^{\alpha\dagger}$ (c_j^β) عملگر آفریننده (نابودکننده) الکترون است.



شکل ۱ ساختار هندسی صفحه گرافین. لوزی خط‌چین نشان‌دهندهٔ یاختهٔ یکهٔ شبکهٔ براوه، a_0 فاصله بین اتمی، $\boldsymbol{a}_1$ و $\boldsymbol{a}_2$ بردارهای پایه و $\boldsymbol{R}_{ij}$ بردارهای انتقال شبکه هستند.

همانطور که در شکل (۱) مشاهده می‌شود، در هر یاختهٔ یکهٔ شبکه براوهٔ گرافین، دو اتم وجود دارد، درنتیجه هامیلتونی تنگ‌بست دستگاه با یک ماتریس ۲×۲ معرفی می‌شود. با استفاده از هامیلتونی تنگ‌بست، ماتریس تابع گرین برابر می‌شود با:

$$\mathcal{G}(i,j;\tau) = \begin{pmatrix} G^{AA}(i,j;\tau) & G^{AB}(i,j;\tau) \\ G^{BA}(i,j;\tau) & G^{BB}(i,j;\tau) \end{pmatrix}, \qquad (۲)$$

که در رابطهٔ (۲)، $\tau = \mathrm{i}t$ زمان موهومی است، همچنین

$$G^{\alpha\beta}(i,j;\tau) = -\langle \mathcal{T} c_i^\alpha(\tau) c_j^{\beta\dagger}\left(\cdot\right)\rangle, \qquad (۳)$$

$\mathcal{T}$ عملگر ترتیب زمانی است. با استفاده از رابطهٔ (۱)، معادلهٔ هایزنبرگ و رهیافت تابع گرین، معادله حرکت الکترون‌های π را می‌توان به صورت زیر بدست آورد [۲۰-۲۴]:

$$\sum_l [(E\boldsymbol{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_i)\delta_{il} + \boldsymbol{t}_{il}]\mathcal{G}(l,j;E) = \boldsymbol{I}\delta_{ij}, \qquad (۴)$$

که در آن $E = \varepsilon + \mathrm{i}0^+$ (ε نشان‌دهندهٔ ترازهای انرژی الکترون در دستگاه است و 0^+ یک مقدار مثبت بی‌نهایت کوچک است) و $\boldsymbol{I}$ ماتریس واحد ۲×۲ می‌باشد. با تبدیل فوریه به فضای $\boldsymbol{k}$ برای معادله (۴) داریم:

$$\mathcal{G}(i,j;E) = \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}^{FBZ} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}.\boldsymbol{R}_{ij}} \begin{pmatrix} E^A & \epsilon_{\boldsymbol{k}} \\ \epsilon_{\boldsymbol{k}}^* & E^B \end{pmatrix}^{-1}, \qquad (۵)$$

در رابطهٔ (۵)، $\Omega = N_c\Omega_c$ مساحت کل دستگاه می‌باشد (Ω_c مساحت یاختهٔ یکهٔ شبکهٔ براوه است)، $E^A = E - \varepsilon_0^A$ و $E^B = E - \varepsilon_0^B$ است. $\boldsymbol{R}_{ij} = \boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_j$ برداری است، که یاختهٔ یکهٔ شبکهٔ براوه را به نزدیک‌ترین همسایه‌اش وصل می‌کند و $\boldsymbol{R}_i$ موقعیت یاختهٔ یکهٔ iام را نشان می‌دهد،

$$\begin{aligned} \boldsymbol{R}_{01} &= \frac{a}{2}\left(\sqrt{3}\boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y\right) = -\boldsymbol{R}_{04} \\ \boldsymbol{R}_{02} &= \frac{a}{2}\left(\sqrt{3}\boldsymbol{e}_x - \boldsymbol{e}_y\right) = -\boldsymbol{R}_{03} \end{aligned} , \qquad (۶)$$

که در آن $\boldsymbol{e}_x$ و $\boldsymbol{e}_y$ بردارهای یکهٔ دستگاه مختصات هستند، $a = |\boldsymbol{a}_1| = |\boldsymbol{a}_2| = \sqrt{3}a_0$ و a_0 فاصله بین اتمی و $\boldsymbol{a}_2$ و $\boldsymbol{a}_1$ بردارهای پایهٔ شبکه هستند (شکل ۱). $\boldsymbol{k}$ بردار موج دو بعدی در ناحیه اول بریلوئن را ارائه می‌کند که برای صفحهٔ گرافین برابر است با:

$$\begin{aligned} -\frac{2}{\sqrt{3}}\left(\frac{\pi}{a}\right) &< k_x < \frac{2}{\sqrt{3}}\left(\frac{\pi}{a}\right) \\ -\frac{4}{3}\left(\frac{\pi}{a}\right) &< k_y < \frac{4}{3}\left(\frac{\pi}{a}\right) \end{aligned} , \qquad (۷)$$

هم‌چنین $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ در رابطهٔ (۵) به صورت زیر تعریف می‌شود،

$$\epsilon_{\boldsymbol{k}} = t_0\left[1 + 2\exp(\mathrm{i}\theta_x)\cos(\theta_y)\right], \qquad (۸)$$

که در این رابطه $\theta_x = \sqrt{3}k_x a/2$، $\theta_y = k_y a/2$ و $t_0 = -8/2\ \mathrm{eV}$ احتمال پرش الکترون بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها است [۳]. ε_0^A و ε_0^B انرژی‌های درون‌سایتی اتم کربن هستند که در اینجا مبدأ انرژی یعنی صفر در نظر گرفته شده‌اند. به علاوه، انرژی‌های درون‌سایتی اتم‌های بور و نیتروژن به ترتیب برابر $\varepsilon_0^{\mathrm{B}} = 0/8t_0$ و $\varepsilon_0^{\mathrm{N}} = -0/8t_0$ است [۲۵]. همان‌طور که گفتیم نانولوله‌ها از لوله شدن صفحهٔ گرافین ایجاد می‌شوند، پس طول صفحه در جهت لوله شدن محدود می‌شود. در اینجا برای ایجاد نانولولهٔ آرمچیر (n,n)، صفحهٔ گرافین در جهت X لوله می‌شود و این محدودیت باعث ایجاد شرایط مرزی جدید شده و سبب می‌شود که بردار موج در جهت X کوانتیزه شود که به صورت زیر تعریف می‌شود،

$$k_x = \frac{2p\pi}{\sqrt{3}an}, \qquad p = 1,2,\ldots,2n \qquad (۹)$$

و $-\pi/a \le k_y \le \pi/a$ است.

حال به محاسبهٔ چگالی حالت‌ها می‌پردازیم. رابطهٔ بین چگالی حالت‌ها با جمع عناصر قطری تابع گرین به صورت زیر است:

$$D(\varepsilon) = -\eta_{۰} \sum_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{FBZ}} \sum_{\alpha} \mathrm{Im}\, G^{\alpha\alpha}(\boldsymbol{k}; E), \tag{۱۰}$$

در رابطهٔ بالا $\eta_{۰} = ۱/(۲\pi N_c \Omega_c)$ است. هم‌چنین با استفاده از رابطهٔ (۵) داریم:

$$G^{AA}(\boldsymbol{k}; E) = \frac{E^A}{E^A E^B - |\epsilon(\boldsymbol{k})|^{۲}}, \tag{۱۱}$$

$$G^{BB}(\boldsymbol{k}; E) = \frac{E^B}{E^A E^B - |\epsilon(\boldsymbol{k})|^{۲}}, \tag{۱۲}$$

که $|\epsilon(\boldsymbol{k})|$ در رابطه (۱۱) و (۱۲) برابر است با:

$$|\epsilon(\boldsymbol{k})| = t_{۰} \sqrt{۱ + ۴f(\boldsymbol{k})}, \tag{۱۳}$$

که در آن

$$f(\boldsymbol{k}) = \left[\cos(\theta_x) + \cos(\theta_y)\right] \cos(\theta_y) \tag{۱۴}$$

برای محاسبه رسانندگی الکتریکی باید هامیلتونی تنگ‌بست را در نمایش نواری بنویسیم، برای این کار ویژه‌مقادیر هامیلتونی را به دست می‌آوریم. تابع گرین در این نمایش قطری است. در نتیجه داریم:

$$G(\boldsymbol{k}; E) = \begin{pmatrix} E^{(+)}(\boldsymbol{k}) & ۰ \\ ۰ & E^{(-)}(\boldsymbol{k}) \end{pmatrix}^{-۱}, \tag{۱۵}$$

در رابطهٔ (۱۵)، $E^{(\pm)}(\boldsymbol{k}) = E - \xi_{۰}^{(\pm)}(\boldsymbol{k})$ که در آن $\xi_{۰}^{(b)}(\boldsymbol{k})$ ویژه مقادیر هامیلتونی و b نمایشگر شاخص نوار انرژی است که بدین‌گونه محاسبه می‌شوند،

$$\xi_{۰}^{(\pm)}(\boldsymbol{k}) = \bar{\varepsilon} \pm \sqrt{\tilde{\varepsilon}^{۲} + |\epsilon(\boldsymbol{k})|^{۲}}, \tag{۱۶}$$

در این رابطه، $\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_{۰}^{A} + \varepsilon_{۰}^{B})/۲$ و $\tilde{\varepsilon} = (\varepsilon_{۰}^{A} - \varepsilon_{۰}^{B})/۲$ است. برای محاسبهٔ رسانندگی الکتریکی گرافین و نانولوله‌ها با استفاده از رابطهٔ کوبو [۲۶ـ۲۸] داریم:

$$\sigma_{\mu\nu}(T) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\mathcal{E}[-\partial_{\mathcal{E}} f(\mathcal{E}, T)]\, \eta_{\mu\nu}(\mathcal{E}), \tag{۱۷}$$

در رابطهٔ (۱۷)، $\{\mu, \nu\}$ مولفه‌های دکارتی محورهای مختصات هستند و $f(\mathcal{E}, T)$ تابع توزیع فرمی دیراک است،

$$f(\mathcal{E}, T) = \left[۱ + \exp(\mathcal{E}/T)\right]^{-۱}, \tag{۱۸}$$

جملهٔ وابسته به انرژی در رسانندگی الکتریکی به صورت زیر تعریف می‌شود،

$$\eta_{\mu\nu}(\mathcal{E}) = \eta_{۰} \sum_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{FBZ}} \sum_{b=\pm} v_{\mu}^{(b)}(\boldsymbol{k}) v_{\nu}^{(b)}(\boldsymbol{k}) \left[\mathrm{Im} G^{(b)}(\boldsymbol{k}; E)\right]^{۲}, \tag{۱۹}$$

از آن‌جا که تعداد نوارهای انرژی برابر با تعداد اتم‌ها در یاختهٔ یکهٔ شبکهٔ براوه است، دو نوار انرژی داریم، هم‌چنین با توجه به رابطهٔ سرعت گروه که برابر است با:

$$v_{\mu}^{(b)}(\boldsymbol{k}) = \partial_{k_{\mu}} \xi^{(b)}(\boldsymbol{k}), \tag{۲۰}$$

$$\boldsymbol{v}_{\mu}(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} v_{\mu}^{(+)}(\boldsymbol{k}) & ۰ \\ ۰ & v_{\mu}^{(-)}(\boldsymbol{k}) \end{pmatrix}, \tag{۲۱}$$

با استفاده از معادله (۱۵)، $G^{(b)}(\boldsymbol{k}; E)$ بدین شکل است:

$$G^{(b)}(\boldsymbol{k}; E) = \frac{۱}{E - \xi^{(b)}(\boldsymbol{k})}, \tag{۲۲}$$

به این دلیل که می‌خواهیم رسانندگی الکتریکی نانولوله را با صفحه مقایسه کنیم، رسانندگی را برای نانولوله‌ها در راستای محور y یعنی محور نانولوله محاسبه می‌کنیم. از روابط (۱۳) و (۱۶) سرعت الکترون در راستای محور y برابر است با:

$$v_{y}^{(+)}(\boldsymbol{k}) = -v_{y}^{(-)}(\boldsymbol{k}) = v_{۰} g(\boldsymbol{k}), \tag{۲۳}$$

که در رابطهٔ (۲۳)، $v_{۰} = -a\, t_{۰}^{۲}$ و $g(\boldsymbol{k})$ برابر است با:

$$g(\boldsymbol{k}) = \frac{\left[\cos(\theta_x) + ۲\cos(\theta_y)\right] \sin(\theta_y)}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}^{۲} + |\epsilon(\boldsymbol{k})|^{۲}}}, \tag{۲۴}$$

پس در نتیجه جملهٔ وابسته به انرژی $\eta_{yy}(\mathcal{E})$ برابر می‌شود با:

$$\eta_{yy}(\mathcal{E}) = \chi_{۰} \sum_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{FBZ}} \sum_{b=\pm} \left[g(\boldsymbol{k}) \mathrm{Im} \left(\frac{۱}{E - \xi^{(b)}(\boldsymbol{k})} \right) \right]^{۲}, \tag{۲۵}$$

که در آن $\chi_{۰} = -\eta_{۰} v_{۰}^{۲}$ است.

۳. بحث و نتایج

در این مقاله، چگالی حالت‌ها برای صفحهٔ گرافین و نیترید بور و هم‌چنین برای نانولوله‌های کربنی و نیترید بور آرمچیر با قطرهای (۵،۵)، (۱۰،۱۰) و (۱۵،۱۵) محاسبه شده است و نمودار آن بر حسب انرژی در شکل‌های (۲ـالف)، (۲ـب) و (۲ـج) نشان داده شده است. در تمامی شکل‌ها برای اینکه محور افقی بدون بعد شود، آن را بر $t_{۰}$ تقسیم کرده‌ایم.

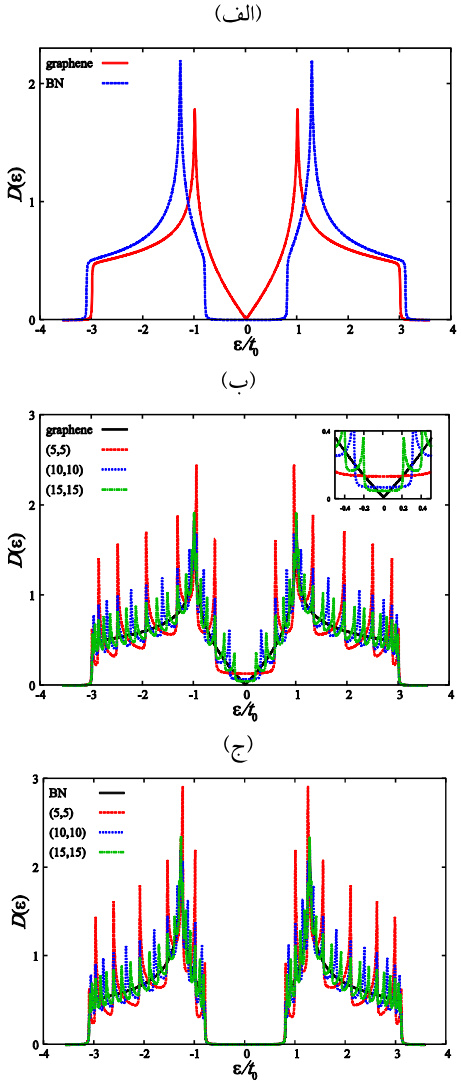
با توجه به شکل (۲ـالف) مشاهده می‌شود که صفحهٔ گرافین یک نیم‌فلز با شکاف نواری صفر است و در آن کمینهٔ نوار رسانش و بیشینهٔ نوار ظرفیت در سطح فرمی بر هم مماسند. هنگامی که به جای اتم‌های کربن، اتم‌های بور و نیتروژن قرار می‌گیرد، به دلیل اختلاف انرژی یونیزاسیون بین اتم‌های بور و نیتروژن، در نمودار چگالی حالات یک شکاف ایجاد می‌شود، پس صفحهٔ نیترید بور یک نیم‌رسانا است.

با توجه به شکل (۲ـب)، بررسی چگالی حالت‌های نانولوله‌های کربنی آرمچیر (۵،۵)، (۱۰،۱۰) و (۱۵،۱۵) نشان می‌دهد که همگی آن‌ها با هر قطری رسانا هستند، به این دلیل که نمودار چگالی حالتشان سطح فرمی را قطع می‌کند، هم‌چنین مشاهده می‌کنیم که با افزایش قطر نانونوله تعداد تکینگی‌های وان‌هوف افزایش می‌یابد و چگالی حالت‌های الکترونی در نزدیکی سطح فرمی تغییر می‌کند. همان‌طور که در شکل (۲ـج) دیده می‌شود، نانولوله‌های نیترید بور آرمچیر به ازای همان قطرها همگی نیم‌رسانا هستند و دارای شکاف یکسانی می‌باشند که برابر با گاف صفحه نیترید بور است.

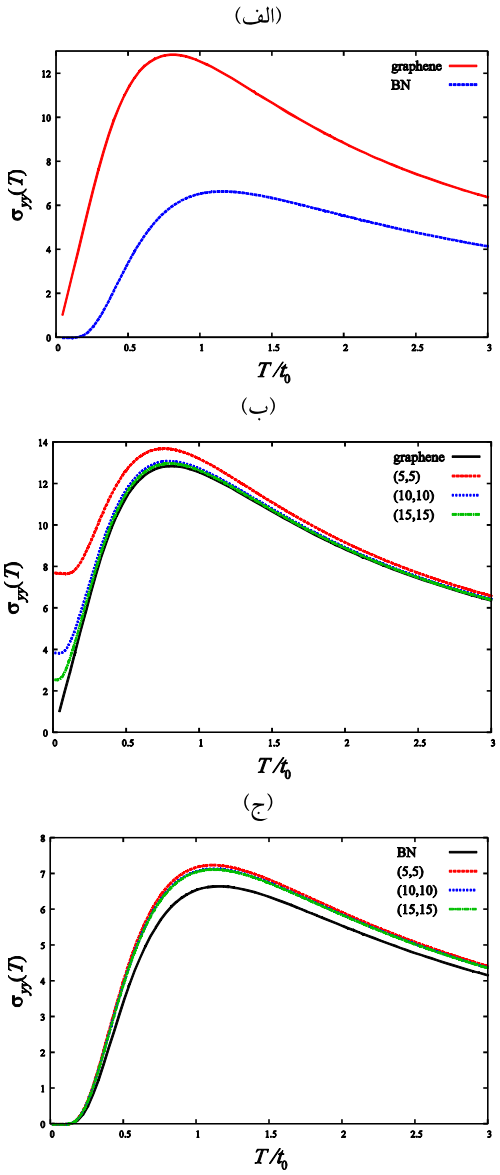
شکل (۳ـالف)، (۳ـب) و (۳ـج) به ترتیب نمودارهای رسانندگی الکتریکی صفحهٔ گرافین و نیترید بور، نانولوله‌های کربنی آرمچیر و نانولوله‌های نیترید بور آرمچیر با قطرهای گفته‌شده را نشان می‌دهد. در تمامی منحنی‌ها یک مقدار بیشینه مشاهده می‌شود که رسانندگی را به دو قسمت دماهای بالا و پایین تقسیم کرده است. در دماهای پایین قبل از مقدار بیشینه، با افزایش دما رسانندگی به طور چشمگیری افزایش می‌یابد و در دماهای بالا با افزایش دما رسانندگی با شیب ملایمی کاهش می‌یابد.

در شکل (۳ـالف) دیده می‌شود که که منحنی رسانندگی گرافین که یک نیم‌فلز است از مبدأ شروع می‌شود و با افزایش دما رسانندگی آن افزایش می‌یابد تا به بیشینه مقدارش برسد و برای صفحهٔ نیترید بور که نیم‌رسانا است چون در دمای صفر رسانندگی ندارد در نتیجه از دمای معینی به بعد شروع به رسانش می‌کند و این فاصله با توجه به شکاف انرژی تعیین می‌شود. هم‌چنین مشاهده می‌کنیم رسانندگی گرافین در همهٔ دماها بیشتر از نیترید بور است که با توجه به نیم‌فلز بودن گرافین و نیم‌رسانا بودن نیترید بور منطقی است. بررسی نمودارهای رسانندگی الکتریکی نانولوله‌های کربنی و نیترید بور آرمچیر در شکل‌های (۳ـب) و (۳ـج) نشان می‌دهد که برای نانولوله‌های کربنی، همهٔ آن‌ها در دمای صفر دارای رسانش الکتریکی هستند که مؤید این مطلب است که آن‌ها با هر قطری رسانا هستند و دربارهٔ نانولوله‌های نیترید بور مشاهده می‌شود که چون به ازای هر قطری نیم‌رسانا هستند، رسانندگی الکتریکی‌شان از یک نقطهٔ یکسان از دماهای غیرصفر که وابسته به شکاف انرژی است، آغاز می‌شوند. مطلب دیگری که در بررسی نمودارهای شکل

(۳) به آن پی می‌بریم آن است که میزان رسانندگی الکتریکی نانولوله‌های کربنی و نیترید بور آرمچیر نسبت به صفحهٔ گرافین و نیترید بور بیشتر هستند و با افزایش قطر و سطح مقطع نانولوله‌ها، رسانندگی الکتریکی آن‌ها کاهش می‌یابد، به این دلیل که با افزایش سطح مقطع، مسیرهای عرضی جدیدی برای حرکت الکترون ایجاد می‌شود و باعث می‌شود الکترون از حرکت در راستای طولی، اندکی منحرف شود و در نتیجه رسانندگی الکتریکی کاهش یابد.



شکل ۲: چگالی حالت‌های الف) صفحهٔ گرافین و نیترید بور ب) نانولوله‌های کربنی آرمچیر ج) نانولوله‌های نیترید بور آرمچیر با قطرهای (۵،۵)، (۱۰،۱۰) و (۱۵،۱۵)



شکل ۳: رسانندگی الکتریکی الف) صفحهٔ گرافین و نیترید بور ب) نانولوله‌های کربنی آرمچیر ج) نانولوله‌های نیترید بور آرمچیر با قطرهای (۵،۵)، (۱۰،۱۰) و (۱۵،۱۵)

۴. نتیجه‌گیری

در این پژوهش، با استفاده از رهیافت تابع گرین در تقریب تنگ‌بست، چگالی حالت‌ها و رسانندگی الکتریکی صفحهٔ گرافین و نانولوله‌های کربنی آرمچیر (۵،۵)، (۱۰،۱۰) و (۱۵،۱۵) را

بررسی کردیم و دستگاه مذکور را در حالتی که اتم‌های کربن با اتم‌های بور و نیتروژن تعویض شوند، نیز مطالعه و نتایج را با یکدیگر مقایسه کردیم. مشاهده شد که صفحهٔ گرافین یک نیم‌فلز با شکاف نواری صفر است در حالی که نانولوله‌های کربنی آرمچیر مستقل از قطرشان همگی فلزند و نانولوله‌های نیترید بور آرمچیر درست مشابه صفحهٔ نیترید بور همگی در هر قطری نیم‌رسانا هستند. هم‌چنین، در نمودار چگالی حالات دیده شد که با افزایش قطرها، تعداد تکینگی‌های وان‌هوف نیز افزایش می‌یابد. از بررسی رسانندگی الکتریکی نتیجه گرفتیم که رسانندگی الکتریکی گرافین در هر دمایی بیشتر از نیترید بور است. به علاوه، دیده شد که رسانندگی نانولوله‌ها بیشتر از صفحات است و با افزایش قطر آن‌ها رسانندگی‌شان کاهش می‌یابد طوری که در حد شعاع‌های خیلی بزرگ به سمت صفحه میل می‌کند.

منابع

[1] Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V. and Firsov A.A., Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films, *Science*, **306**, 666-669, 2004.

[2] Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S., Jiang D., Katsnelson M.I., Grigorieva I., Dubonos S. and Firsov A.A., Two-dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene, *Nature*, **438**, 197-200, 2005.

[3] Castro Neto A., Guinea F., Peres N.M., Novoselov K.S. and Geim A.K., The Electronic Properties of Graphene, *Reviews of Modern Physics*, **81**, 109-162, 2009.

[4] Mosher M.D. and Ojha S., Hybridization and Structural Properties: A Physical Organic Chemistry Experiment, *Journal of Chemical Education*, **75**, 888-890, 1998.

[5] Balmain W.H., XLVI. Observations on the Formation of Compounds of Boron and Silicon with Nitrogen and Certain Metals, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, **21**, 270-277, 1842.

[6] Iijima S., Helical Microtubules of Graphitic Carbon, *Nature*, **354**, 56-58, 1991.

[7] Saito R., Fujita M., Dresselhaus G. and Dresselhaus M.S., Electronic Structure of Graphene Tubules Based on C 60, *Physical Review B*, **46**, 1804-1811, 1992.

[8] Singh I., Rehni A.K., Kumar P., Kumar M. and Aboul-Enein H.Y., Carbon Nanotubes: Synthesis, Properties and Pharmaceutical Applications, *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, **17**, 361-377, 2009.

[9] Feng L. and Liu Z., Graphene in Biomedicine: Opportunities and Challenges, *Nanomedicine*, **6**, 317-324, 2011.

[10] Novoselov K.S., Jiang D., Schedin F., Booth T.J., Khotkevich V.V., Morozov S.V. and Geim A.K., Two-dimensional Atomic Crystals, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **102**, 10451-10453, 2005.

[11] Mousavi H., The Impact of Gas Molecule Adsorption on the Orbital Magnetic Susceptibility of Graphene, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **322**, 2533-2536, 2010.

[12] Mousavi H., Sublattice Superconductivity in Boron Nitride Nanotube, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, **26**, 2905-2909, 2013.

[13] Mousavi H. and Khodadadi J., Graphene to Graphane: Two-band Approach, *Superlattices and Microstructures*, **88**, 434-441, 2015.

[14] Mousavi H., Gas Adsorption Effects on the Electrical Conductivity of Semiconducting Carbon Nanotubes, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **44**, 454-459, 2011.

[15] Saito R., Dresselhaus G. and Dresselhaus M.S., Physical Properties of Carbon Nanotubes, Imperial College Press, London, 35-70, 1998.

[16] Slater J.C. and Koster G.F., Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem, *Physical Review*, **94**, 1498-1524, 1954.

[17] Harrison A.W., Structure and the Properties of Solids, Dover, New York, 31-55, 1989.

[18] Kaxiras E., Atomic and Electronic Structure of Solids, Cambridge University Press, United Kingdom, 121-140, 2003.

[19] Grosso G. and Parravicini G.P., Solid State Physics, 2nd ed., Academic Press, USA, 182-189, 2014.

[20] Mousavi H., Effects of Adsorbed Gas on the Electrical Conductivity of Metallic Carbon Nanotubes, *Solid State Communications*, **150**, 755-758, 2010.

[21] Mousavi H. and Khodadadi J., Electronic Heat Capacity and Conductivity of Gapped Graphene, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **50**, 11-16, 2013.

[22] Mousavi H., Electronic Properties of Doped Gapped Graphene, *Physica B: Condensed Matter*, **414**, 78-82, 2013.

[23] Bruus H. and Flensberg K., Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction, 2nd Ed., Oxford University Press, United Kingdom, 139-151, 2004.

[24] Economou E.N., Green's Functions in Quantum Physics, 3rd Ed., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 80-101, 2006.

[25] Yoshioka T., Suzuura H. and Ando T., Electronic States of BCN Alloy Nanotubes in a Simple Tight-binding Model, *Journal of the Physical Society of Japan*, **72**, 2656-2664, 2003.

[26] Velicky B., Theory of Electronic Transport in Disordered Binary Alloys: Coherent-Potential Approximation, *Physical Review*, **184**, 614-627, 1969.

[27] Edwards S.F., A New Method for the Evaluation of Electric Conductivity in Metals, *Philosophical Magazine*, **3**, 1020-1031, 1958.

[28] Edwards S.F., The Statistical Thermodynamics of a Gas with Long and Short-Range Forces, *Philosophical Magazine*, **4**, 1171-1182, 1959.