

# Effects of the Presence of Staggered and Gate Potential on Transport in Bernal Stacked ABA Trilayer Graphene

Nesa Ahmadzadeh<sup>1</sup>, Zeinab Rashidian<sup>\*2</sup>, Abdolrahim Baharvand<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Faculty of Science, Islamic Azad University, Hamedan Branch, Hamedan, Iran

<sup>2</sup>Department of Physics, Faculty of Science, Lorestan University, Lorestan, Iran

Received: 27.07.2018    Final revised: 29.08.2019    Accepted: 28.10.2019

DOI: 10.22055/jrmbms.2019.14913

## Abstract

Graphene is a two-dimensional carbon-arranged structure in the hexagonal lattice, each cell of which is non- Bravais and consists of two A, B substructures of atoms that can be maintained in (from one to several layers maximum of its) two-dimensional properties. Trilayer graphene has been studied due to its stability and abundance over other structures. Considering the type and number of layers and how they are placed in relation to each other in the properties of the material, causing a different dispersion spectrum, we will see different transport properties in the structures. Thus, in the study of trilayer graphene, the three distinct AAA, ABA and ABC–stacked layers were introduced and then analyzed by the Hamiltonian analysis and the Bernal strip structure. Investigations were carried out once in normal conditions and again in the presence of two types of potentials since in the analysis of electrical transport, we consider a piece of trilayer graphene in the presence of a potential sandwiched between two normal these are without potential. The electrical transport properties by analyzing the flow diagram, derived from the Landaure-Buttiker approach, indicate the applicability of trilayer graphene in the production and construction of transistors.

**Keywords:** Trilayer Graphene, Staggered Potential, Gate Potential, Conductance, Landauere-Buttiker Formula

## بررسی تأثیر پتانسیل متناوب و ثابت بر روی ترابرد گرافین سه لایه با

### ساختار برنل ABA

نساء احمدزاده<sup>1</sup>، زینب رشیدیان<sup>2\*</sup>، عبدالرحیم بهاروند<sup>2</sup>

<sup>1</sup>دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی همدان، همدان، ایران

<sup>2</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، لرستان، ایران

دریافت: 1397/05/05 ویرایش نهائی: 1398/06/07 پذیرش: 1398/08/06

DOI: 10.22055/jrmb.2019.14913

#### چکیده

گرافین صفحه‌ای از اتم‌های کربن است که به صورت یک تا چندلایه (حدود ده لایه) خواص دویبعدی خود را حفظ می‌کند. در این بین گرافین سه‌لایه به علت پایداری و فراوانی نسبت به دیگر ساختارها، مورد توجه است. چون تعداد و چگونگی قرارگیری لایه‌ها نسبت به هم خواص تراپردی ماده و طیف پاشندگی را تغییر می‌دهد، بنابراین در بررسی گرافین سه‌لایه ساختار برنل ABA به تحلیل هامیلتونی و ساختار نواری آن پرداخته‌ایم. بررسی‌ها یک‌بار در حالت نرمال و بار دیگر در حضور دو نوع پتانسیل انجام شده است. تراپرد الکتریکی قطعه‌ای از گرافین سه‌لایه در حضور سد پتانسیل بین دو قطعه نرمال بدون پتانسیل، بررسی شده و نمودار بهنجار شدهٔ رسانش، از رویکرد لاندائو-بوتیکر تحلیل و ترسیم شده است، رسانش بسته به اندازهٔ پتانسیل اعمالی و طول ناحیهٔ میانی می‌تواند بیشینه و کمینه مقدار خود را داشته باشد، یعنی با اعمال هر دو نوع پتانسیل تراپرد بار کنترل می‌شود. چون تغییرات رسانش بین صفر و یک نمادی برای کاربرد قطعات نانوالکترونیک در ساخت ترانزیستورهای صنعتی on-off با ابعاد بسیار کوچک است، در اینجا به بررسی روش‌های اعمال پتانسیلی پرداخته‌ایم که می‌تواند با ایجاد سد پتانسیل الکتریکی، رسانش را در محدودهٔ خاصی بین صفر و یک کنترل کند.

**کلیدواژگان:** گرافین سه‌لایه، پتانسیل متناوب، پتانسیل گیت ثابت، رسانش، فرمول لاندائو-بوتیکر

#### مقدمه

مختلف این آلوتروپ‌ها موضوعات مورد توجهی برای فیزیکدانان و شیمی‌دانان بوده و تحقیقات زیادی بر روی آنها انجام شده است، اما مشاهدات تجربی برای شکل گمشدهٔ دویبعدی کربن تا سال‌های متمادی به نتیجهٔ مطلوبی نرسیده بود. پیش‌بینی امکان کاربرد ساختار دو بعدی در علم و صنعت در نهایت موجب موفقیت در تولید آن شد، به طوری که در سال 2004 گروهی از فیزیکدانان دانشگاه منچستر که به سرپرستی آندره گایم

کربن به عنوان یک عنصر حیاتی رفتارهای غیرمعمول و پیچیده‌ای در تشکیل ساختارهای گوناگون از خود نشان می‌دهد، مانند ساختارهای سه بعدی الماس و گرافیت که از زمان‌های قدیم پرکاربرد و شناخته شده بودند، و ساختارهای نانولوله‌های کربنی و فولرین که اخیراً کشف شده‌اند [1و2]. با این که قابلیت‌های

\* نویسنده مسئول: rashidian.z@lu.ac.ir



درجه آزادی زیرساختارهای شبکه وجود دارد، و بنابراین می‌توان گاف انرژی را با ورود ناخالصی‌هایی که تقارن شبکه را برهم می‌زند (اعمال پتانسیل متناوب) و یا میدان‌های عمودی اعمال شده به طرق مختلف (گیت ثابت پتانسیل)، کنترل کرده و این ماده را نامزد مناسبی جهت طراحی قطعات الکترونیکی بر پایه نیم‌رساناها نظیر ترانزیستورها قرار داد [7 و 8]. با توجه به نتایج به دست آمده در این کار، رسانش بسته به اندازه پتانسیل اعمالی و طول ناحیه میانی می‌تواند بیشینه مقدار و کمینه مقدار خود را داشته باشد، یعنی با اعمال هر دو نوع پتانسیل خارجی می‌شود ترابرد بار را کنترل کرد. از آنجا که تغییرات رسانش بین صفر و یک نمادی برای کاربرد قطعات نانوالکترونیک در ساخت ترانزیستورهای صنعتی با ابعاد بسیار کوچک می‌باشد، در این تحقیق به بررسی روش‌های اعمال پتانسیلی پرداخته‌ایم که می‌تواند با ایجاد سد پتانسیل الکتریکی در مقابل عبور ذرات، رسانش را در محدوده خاصی کنترل کند.

## روش کار

### ساختارهای مورد بررسی

یکی از ساختارهای بر پایه گرافین، که مورد توجه خاصی بوده است، ساختار گرافین سه‌لایه است که مطابق شکل 1 به صورت سه چیدمان موازی، برنل و لوزی گون ظاهر می‌شود.

چیدمان موازی (AAA) از روی هم قرار گرفتن سه تک‌لایه گرافین که به وسیله نیروی واندروالس بین لایه‌ای به هم متصل شده‌اند، به وجود آمده است.

مشغول به تحقیق و فعالیت بودند، توانستند در یک روش نه چندان پیچیده تک‌لایه‌های گرافین را به روش شکاف میکرومکانیکی از ساختار گرافیت جدا کنند [3 و 4].

ادامه مطالعات بر روی ساختار نواری گرافین با استفاده از تقریب تنگ‌بست نزدیکترین همسایه‌ها، نشان می‌دهد که این ماده یک نیم‌رسانای بدون گاف است که در هر لایه، در سطوح پایین انرژی، رابطه انرژی و بردار موج آن به صورت خطی بوده و منجر به جرم مؤثر  $M$  صفر می‌شود. رابطه طیف پاشندگی معادله 1 رفتار شبه‌نسبیتی ذرات موجود در ساختار را توجیه کرده و عنوان فرمیون‌های دیراک را برای ذرات کربن موجود در شش گوشه ناحیه بریلوئن برگزیده است و امکان استفاده از معادله دیراک در سطوح پایین انرژی را فراهم می‌کند [5 و 6].

$$E = \pm f(k) = \pm \hbar v_f k \Rightarrow M = \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = 0 \quad 1$$

در این معادله سرعت فرمی  $v_f = \frac{3at}{2} \cong 10^6 m/s$  در نظر گرفته شده است. ویژگی‌های متمایز این ساختار نظیر تحرک‌پذیری و رسانندگی گرمایی بسیار بالا در دمای اتاق، خاصیت دستوارگی و عدم حساسیت حاملان بار به سدهای پتانسیل اعمال شده، باعث تمرکز و مطالعات بسیاری در زمینه کاربرد این ماده شد. با توجه به چیدمان‌های مختلف مشاهده شده گرافین که با تغییر در تعداد لایه‌ها و نوع قرار گرفتن آنها به وجود آمده و با توجه به خواص مختلفی که در آنها ظاهر می‌شود، مشخص شده است که امکان کنترل بر روی

## اهمیت تمرکز بر ساختار سه‌لایه گرافین و جذابیت‌های آن

اخیراً گرافین بیشتر از یک لایه به دلیل پایداری و فراوانی بیشتر و به خاطر داشتن گاف و یا ساختار غیرخطی در نوار انرژی توجه زیادی را نسبت به گرافین تک‌لایه و دولایه کسب کرده است [11-13]. چون این ساختار در بین آلوتروپ‌های کربن یک مجموعه کامل مطالعاتی را فراهم کرده است که به راحتی از گرافیت قابل استخراج است [14] و نیز امکان کنترل بر روی گاف نواری ساختار سه‌لایه در کارهای آزمایشگاهی و مطالعات تجربی ساده‌تر و میسرتر است، جذابیت و جایگاه مطالعاتی ویژه‌ای پیدا کرده است. در این بین بیشتر کارهای اختصاص یافته به گرافین چند لایه روی ساختار برنل ABA و لوزی‌گون ABC انجام شده و نکته جالب این است که برای ساختار ABC تونل‌زنی‌هایی وجود دارد که با توجه به نحوه چیدمان آن متفاوت از بقیه چیدمان‌ها بوده و این ویژگی در ساختار برنل و موازی وجود ندارد، [15 و 16]. همچنین وجود یک نوع پایدار از گرافین سه‌لایه با چیدمان ساختار AAA به صورت آزمایشگاهی گزارش شده است که بر جذابیت تحقیق در زمینه گرافین سه‌لایه افزوده است و ما را بر آن داشته که توجه خاصی به ترابرد این ساختار داشته باشیم [9، 17، 18].

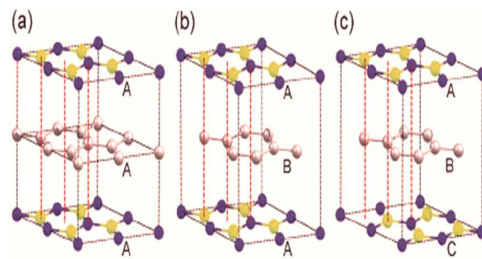
### روابط حاکم بر ساختار برنل

با توجه به این که هدف مطالعات ما متمرکز بر تحلیل ترابرد و بررسی چگونگی تغییرات رسانش برای ساختار برنل در حضور سد پتانسیل‌های مختلف

همان‌طور که از شکل پیداست زیرساختارهای A در هر لایه دقیقاً به موازات هم به فاصله  $d = 0.334 \text{ nm}$  قرار گرفته‌اند و زیرساختارهای B نیز به همین شکل بردار شبکه در هر لایه نیز با  $a = 0.142 \text{ nm}$  معرفی می‌شود.

در مورد چیدمان برنل (ABA) زیرساختار A از لایه اول منطبق و موازی با زیرساختار B از لایه دوم و زیرساختار A از لایه سوم بوده و هر لایه به اندازه  $\frac{\pi}{3}$  حول همین نقاط نسبت به لایه دیگر چرخیده و چیدمانی را به وجود آورده که فاصله صفحات آن کمتر و میزان جفت شدگی صفحات به هم بیشتر شده است [7 و 9 و 10].

در مورد چیدمان لوزی‌گون، لایه‌ها به صورت پله‌ای با همان چرخش  $\frac{\pi}{3}$  نسبت به هم در نظر گرفته می‌شوند [7 و 8].



شکل 1. چیدمان‌های مختلف ساختار گرافین سه‌لایه به ترتیب

.AAA(a) , ABA(b) , ABC(c)

در ساده‌ترین حالت در هامیلتونی فوق اگر از برهم‌کنش بین همسایه‌ها فقط همسایه اول را مد نظر قرار دهیم، ماتریس ساده‌تر شده و معادله 4 را خواهیم داشت:

$$H_{ABA} = \begin{pmatrix} 0 & f & 0 & 0 & 0 & 0 \\ f^* & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & f & 0 & \gamma \\ 0 & 0 & f^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & f \\ 0 & 0 & \gamma & 0 & f^* & 0 \end{pmatrix}$$

$$f = k \exp(-i\theta) \quad 4$$

$$f^* = k \exp(i\theta)$$

چون در سطوح پایین انرژی از جفت‌شدگی بین همسایه‌های دوم و سوم به بعد چشم‌پوشی می‌شود، ماتریس هامیلتونی فوق شکل ساده شده‌ای دارد که فقط انرژی جفت‌شدگی، مربوط به همسایه‌های اول  $A_1$  و  $A_2$ ، با مقدار  $\gamma = 0.39 \text{ eV}$  وارد روابط می‌شود. با محاسبه شش ویژه‌مقدار این ماتریس، می‌توان معادله 5 را برای معرفی ساختار نواری انرژی چیدمان مذکور به کار برده و طیف انرژی مربوط به آن را مطابق شکل 3 نشان داد.

5

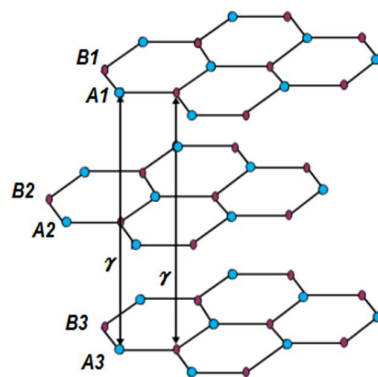
$$E_{ABA} = \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{2} + f^2} \pm \sqrt{\frac{\gamma^4}{4} + \gamma^2 f^2}, E_{ABA}' = \pm |f(k)|$$

با توجه به طیف پاشندگی ترسیم شده در شکل 3 همان‌طور که انتظار می‌رود با ساختار یک نیم‌رسانای بدون گاف مواجه هستیم، که در چیدمان برنل به علت چرخش لایه‌ها، طیف پاشندگی سهموی مشاهده می‌کنیم، هر یک از خطوط نمودار بیانگر دو ویژه‌مقدار مثبت و منفی از معادله 5 هستند. پاسخ‌های خطی معادله

می‌باشد، ابتدا به معرفی معادله حاکم بر ساختار گرافین پرداخته و در شکل 2 این نوع چیدمان را به‌طور خاص بررسی می‌کنیم:

2

$$H_{mn} = \sum_{i,j} \gamma \exp[-\beta(r_{ij} - d)] C_i^+ C_j + h_0 c_0$$



شکل 2. ساختار شبکه گرافین سه لایه.

این هامیلتونین، در واقع توصیفی از جفت‌شدگی بین لایه‌ای و درون لایه‌ای است که برهم‌کنش نزدیک‌ترین همسایه‌ها را در نظر گرفته‌است، برای برهم‌کنش لایه‌های  $m, n$  پس از جای‌گذاری، طبق روابط 3 و 4 به ماتریس هامیلتونی بر پایه  $\Psi = (\Psi_{A1}, \Psi_{B1}, \Psi_{A2}, \Psi_{B2}, \Psi_{A3}, \Psi_{B3})$  می‌رسد:

[10].

3

$$H_{ABA} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_0 \varphi & -\gamma_4 \varphi & \gamma_3 \varphi^* & \gamma_2 & 0 \\ \gamma_0 \varphi^* & 0 & \gamma & -\gamma_4 \varphi & 0 & \gamma_5 \\ -\gamma_4 \varphi^* & \gamma & 0 & \gamma_0 \varphi & -\gamma_4 \varphi^* & \gamma \\ \gamma_3 \varphi & -\gamma_4 \varphi^* & \gamma_0 \varphi^* & 0 & \gamma_3 \varphi & -\gamma_4 \varphi^* \\ \gamma_2 & 0 & -\gamma_4 \varphi & \gamma_3 \varphi^* & 0 & \gamma_0 \varphi \\ 0 & \gamma_5 & \gamma & -\gamma_4 \varphi & \gamma_0 \varphi^* & 0 \end{pmatrix}$$

رسانش الکتریکی این چیدمان را نیز بررسی کنیم، بنابراین ضریب عبور و رسانش الکتریکی سیستم را با استفاده از فرمول‌بندی لاندائو-بوتیکر در دو حالت مختلف محاسبه و مقایسه کنیم. چون برای کاربرد نیم‌رساناها در صنعت نیاز به ایجاد گاف انرژی داریم، جهت ایجاد گاف نواری و کنترل بر روی آن، دو گزینه زیر را مد نظر قرار داده‌ایم:

### اعمال پتانسیل متناوب<sup>1</sup>

این نوع پتانسیل با ورود ناخالصی به ساختار شبکه به‌گونه‌ای اعمال می‌شود که در هر صفحه تقارن بین دو زیر ساختار A,B را بر هم زده و بر روی زیر ساختار اول پتانسیل V و بر دومی پتانسیل -V قرار می‌دهد. بررسی گرافین سه لایه تحت پتانسیل متناوب تقارن لایه اول و سوم را برای ایجاد گاف نواری بر هم می‌زنیم. به این ترتیب عناصر قطری ماتریس‌های هامیلتونی فوق مطابق معادله 6 تغییر کرده و ویژه مقدار آن مطابق روابط 7 خواهد بود [20 و 21]:

$$H_{ABA}^S = \begin{pmatrix} V & f & 0 & 0 & 0 & 0 \\ f^* & -V & \gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & f & 0 & \gamma \\ 0 & 0 & f^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & V & f \\ 0 & 0 & \gamma & 0 & f^* & -V \end{pmatrix} \quad 6$$

$$E_{ABA}^S = \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{2} + f^2 + V^2} \pm \sqrt{\frac{\gamma^4}{4} + \gamma^2 f^2} \quad 7$$

$$E_{ABA}^{S'} = \pm \sqrt{f^2 + V^2}$$

به صورت خطوط توپر رسم شده

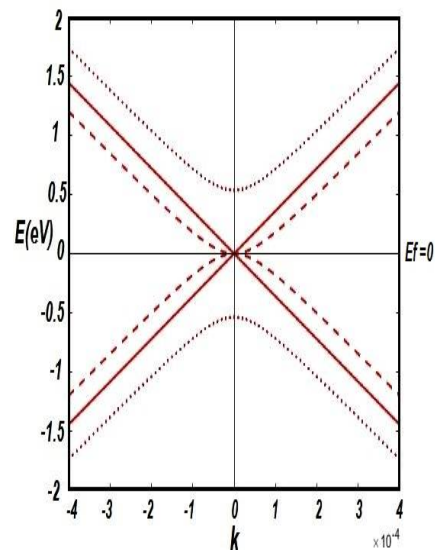
و پاسخ‌های معادله

$$E_{ABA} = \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{2} + f^2} + \sqrt{\frac{\gamma^4}{4} + \gamma^2 f^2} \quad \text{به شکل}$$

منحنی‌های نقطه چین و معادله

$$E_{ABA} = \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{2} + f^2} - \sqrt{\frac{\gamma^4}{4} + \gamma^2 f^2}$$

خط چین نشان داده شده است.



شکل 3. طیف پاشندگی گرافین سه لایه برنل نرمال.

از آنجا که مطالعات و کارهای محاسباتی در مورد ساختار و ترابرد گرافین سه‌لایه AAA در مقالات متعددی انجام شده است [17 و 19] و همچنین بررسی رسانندگی اپتیکی در گرافین سه‌لایه با چیدمان ABA نیز مورد تحقیق بوده است [19]، در اینجا قصد داریم با رسم ساختار نواری گرافین سه‌لایه تحلیلی از ترابرد و چگونگی تغییرات

<sup>1</sup>Staggered Potential

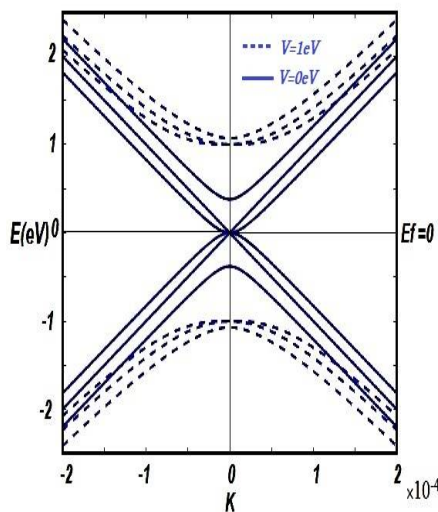
$$H_{ABA}^G = \begin{pmatrix} V & f & 0 & 0 & 0 & 0 \\ f^* & V & \gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & f & 0 & \gamma \\ 0 & 0 & f^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -V & f \\ 0 & 0 & \gamma & 0 & f^* & -V \end{pmatrix} \quad 8$$

9

$$E_{ABA}^S = \frac{1}{2}(-V \pm \sqrt{W \pm 4\sqrt{S}}),$$

$$E_{ABA}^{S'} = V \pm |f(k)|$$

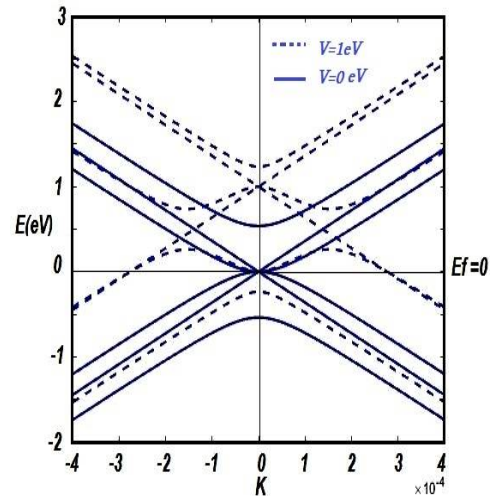
$$\Rightarrow S = \gamma^4 + 2\gamma^2 + V^2 f^2, W = 4\gamma^4 + V^2 + 4f^2$$



شکل 5. ساختار نواری گرافین سه لایه در حضور پتانسیل گیت ثابت.

به عبارت دیگر شکل 4 و 5 نشان دهنده ساختار نواری گرافین سه لایه با چیدمان برنل در حضور دو سد پتانسیل متفاوت است که برای مقادیر مختلف پتانسیل با دو سری خطوط توپر و خط چین به تفکیک رسم شده است.

این معادلات طیف نواری را نشان می دهد که از حالت بدون گاف خارج شده و با اعمال این نوع سد پتانسیل قابلیت کنترل گاف انرژی پیدا کرده اند، گاف انرژی ایجاد شده در شکل 4 قابل مشاهده است.



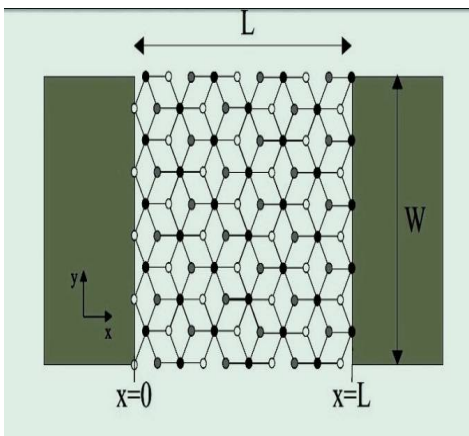
شکل 4. ساختار نواری گرافین سه لایه در حضور پتانسیل متناوب

## اعمال گیت ثابت پتانسیل<sup>2</sup>

این نوع سد پتانسیل که ناشی از اعمال میدان خارجی عمودی بر صفحه گرافین است، پتانسیل  $V$  را بر لایه اول و پتانسیل  $-V$  را بر لایه سوم قرار می دهد، به گونه ای که این عناصر در ماتریس هامیلتونین معادله 8 بر روی عناصر قطر اصلی ظاهر شده و با تغییر دادن ویژه مقدارها با این روش، گاف انرژی ایجاد می کند. مطابق روابط در معادلات 9 وجود گاف نواری تأیید شده و نتیجه ترسیم آن شکل 5 است [22 و 23 و 17].

## محاسبات و تحلیل‌ها

لاندائو در مورد آن صادق است. برای این منظور مطابق شکل 6 یک مجموعه سه قسمتی از اتصال گرافین سه‌لایه با چیدمان برنل با طول  $L$  و پهنای  $W$  را در نظر می‌گیریم که قطعه میانی تحت پتانسیل مشخصی قرار گرفته است و بین دو قطعه با چیدمان مشابه اما در حالت نرمال و بدون پتانسیل قرار دارد-اصطلاحاً ساندویچ شده است- سپس با اعمال شرایط مرزی پیوستگی بین توابع موج ورودی و خروجی، در دو مرز  $x=0, x=L$  که در روابط 12-14 آورده شده است، ماتریس پراکندگی متناظر را تعیین می‌کنیم [26 و 24 و 21 و 1].



شکل 6. اتصال ساختار گرافین سه لایه در حضور پتانسیل بین دو نمونه مشابه نرمال بدون پتانسیل.

توابع موج ورودی هنگام عبور از هر ناحیه دچار پراکندگی می‌شود. به طوری که ابتدا از ناحیه بدون پتانسیل به ناحیه میانی دارای پتانسیل وارد شده و با ضرایبی عبور و بازتاب خواهد داشت و در نهایت به ناحیه سوم نرمال بدون پتانسیل وارد شده است در هر ناحیه سه لایه گرافین وجود دارد که هر لایه دارای ضرایب عبور و ضرایب بازتابی است که به شکل سه

یکی از مرسوم‌ترین روش‌های بررسی خواص ترابرد در سیستم‌های الکترونی بالستیک کپه‌ای، نظریه پراکندگی لاندائو است، که خصوصیات ترابردی سیستم را بر اساس مدل پراکندگی کوآنتومی به دست می‌آورد. بالستیک بودن یک سیستم با توجه به مقدار مسیر آزاد میانگین نسبت به ابعاد شبکه، که معیاری از مقاومت ماده است، تعیین می‌شود، به این معنا که برای سیستم‌های با مسیر آزاد میانگین بزرگ، ذرات بدون پراکندگی عبور کرده و بدون احساس حضور مانع در شبکه به شکل پرتابه‌ای یا بالستیک رفتار می‌کنند. در روش لاندائو با توصیف تابع توزیع کوآنتومی فرمی، که به واسطه نواحی پراکنده، امواج و ذرات را به هم مرتبط می‌کند، رابطه‌ای بررسی می‌شود که به وسیله آن افت و خیزهای جریان و چگونگی تغییرات رسانش برحسب ماتریس پراکندگی توضیح داده می‌شود. بنابراین هدف اصلی در روش لاندائو یافتن ماتریس پراکندگی به عنوان مدلی برای معرفی سیستم ترابردی است. در بازه پیوسته‌ای از زوایای فرودی ذرات برخوردی به سیستم گرافینی پراکنده، رسانش طبق رویکرد لاندائو-بوتیکر به صورت انتگرال پیوسته‌ای نشان داده می‌شود [24 و 25]:

$$G = 2G_0 \int_0^{\pi/2} T(E, \theta) \cos(\theta) d\theta \quad 10$$

از آنجا که گرافین نیم‌رسانایی با مسیر آزاد میانگین بزرگ، در حدود دو میکرومتر است، حرکت حامل‌های بار در آن بالستیک بوده، رابطه و توصیف پراکندگی



ضریب  $t$  و سه ضریب  $r$  در معادلات 11-13 نشان داده شده است:

در ناحیه اول (نرمال):

$$\begin{cases} Ai = \frac{(\hbar v_f q_i)^2 - (E_i + V)^2}{\gamma(E_i + V)\sqrt{2}} \\ Bi = \frac{(\hbar v_f q_i)e^{i\theta_i}(V + E_i)}{\gamma E_i \sqrt{2}} + \frac{2\gamma^2 + E_i(V + E_i)}{\gamma(\hbar v_f q_i)e^{-i\theta_i}\sqrt{2}} \\ Ci = \frac{(\hbar v_f q_i)e^{-i\theta_i}}{E_i + V} \end{cases} \quad 11$$

$i = 3, 4, 5, 6$

به همین ترتیب در حضور پتانسیل گیت ثابت نیز مشابه معادلات فوق را می توان نوشت، فقط در رابطه 14 تغییراتی را خواهیم داشت به گونه ای که در حالت پتانسیل متناوب عناصر معرف بردار موج به صورت رابطه 15 تعریف می شوند:

$$\begin{cases} Ai = \frac{(\hbar v_f q_i)^2 + (V^2 - E_i^2)}{\gamma(V - E_i)\sqrt{2}} \\ Bi = \frac{(\hbar v_f q_i)^2 + (V^2 - E_i^2)}{\gamma E_i (V - E_i)(\hbar v_f q_i)e^{-i\theta_i}\sqrt{2}} \\ Ci = \frac{(\hbar v_f q_i)e^{-i\theta_i}}{E_i - V} \end{cases} \quad 15$$

برای تعیین احتمال عبور حاملان بار از این نوع اتصال سه لایه، سه رابطه ضریب عبور  $t_1, t_2, t_3$  استخراج می شود که ترکیب آنها مطابق رابطه 16 احتمال عبور را مشخص می کند که در ادامه محاسبات رسانش با رویکرد لاندائو-بوتیکر به کار می رود:

$$\Psi_I = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-i\theta} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikx \cos(\theta)} + r_1 \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik^* x \cos(\theta)}$$

$$+ r_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ e^{i\theta} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik^* x \cos(\theta)} + \frac{r_3}{\sqrt{(\hbar v_f k^*)^2 + 2\gamma^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \gamma\sqrt{2} \\ 0 \\ \hbar v_f k^* e^{i\theta} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ik^* x \cos(\theta)}$$

در ناحیه سوم (نرمال):

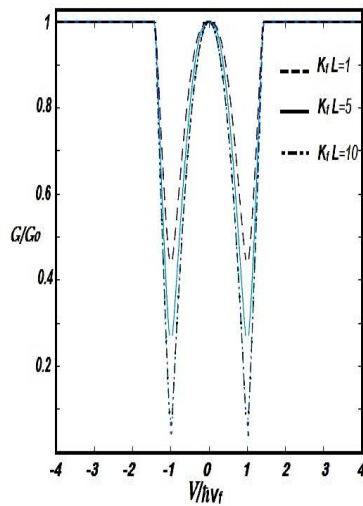
$$\Psi_{III} = t1 \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-i\theta} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik(x-L) \cos(\theta)}$$

$$+ \frac{t2}{\sqrt{(\hbar v_f k^*)^2 + 2\gamma^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \hbar v_f k^* e^{i\theta} \\ 0 \\ 0 \\ \gamma\sqrt{2} \end{pmatrix} e^{-ik^*(x-L) \cos(\theta)} + t3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{-ik^*(x-L) \cos(\theta)}$$

در ناحیه میانی دارای هر دو نوع پتانسیل:

$$\Psi_{II} = a1 \begin{pmatrix} 0 \\ f \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{iq_1 x \cos(\theta_1)} + a2 \begin{pmatrix} f^* \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-iq_1 x \cos(\theta_1)} \quad 13$$

$$+ \sum_{i=1}^3 ai \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ A_i \\ B_i \\ C_i \\ 1 \end{pmatrix} e^{-iq_1 x \cos(\theta_1)}$$



شکل 8. تغییرات رسانش از اتصالات گرافین سه لایه در حضور پتانسیل متناوب برای چهار طول مختلف از ناحیه میانی.

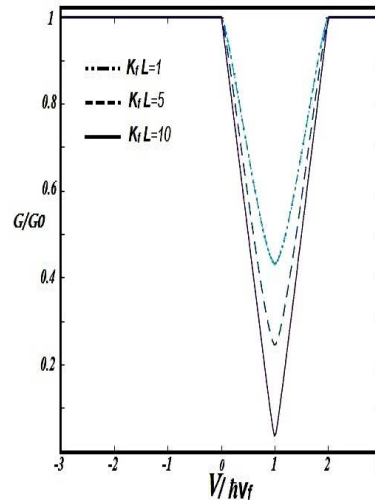
### بحث و نتیجه‌گیری

همان‌طور که از نمودارهای رسانش و ساختار نواری دیده می‌شود، رسانش بسته به اندازه پتانسیل اعمالی و طول ناحیه میانی می‌تواند بیشینه مقدار و کمینه مقدار خود را داشته باشد، یعنی با اعمال هر دو نوع پتانسیل خارجی می‌شود تراپرد بار را کنترل کرد. چون به دنبال بررسی تغییرات رسانش بین صفر و یک هستیم، که نمادی برای کاربرد قطعات نانوالکترونیک در ساخت ترانزیستورهای صنعتی با ابعاد بسیار کوچک است، در این تحقیق به بررسی روش‌های اعمال پتانسیلی پرداخته‌ایم که می‌تواند با ایجاد سد پتانسیل الکتریکی در مقابل عبور ذرات و حاملان بار، رسانش را در محدوده خاصی کنترل کند. در بررسی خواص تراپردی الکترونی بالستیک، پراکندگی لاندائو را مورد کاربرد قرار داده‌ایم، اساس این نظریه، برای فرودهای عمودی، رابطه‌ای است که به وسیله آن جریان و حتی افت و

$$\begin{cases} t_1 t_1^+ = T_1 \\ t_2 t_2^+ = T_2 \Rightarrow T = T_1 + T_2 + T_3 \Rightarrow \\ t_3 t_3^+ = T_3 \end{cases}$$

$$G = 2G_0 \int_0^{\pi/2} T(E, \theta) \cos(\theta) d\theta$$

از آنجا که با تعداد معادلات متعدد و پیچیده‌ای مواجه هستیم، محاسبه و استخراج روابط فوق را به کمک نرم‌افزار متلب انجام داده و ترسیم نهایی نمودار رسانش شکل‌های 7 و 8 به دست آمده از انتگرال را مورد تحلیل قرار می‌دهیم.



شکل 7. تغییرات رسانش از اتصالات گرافین سه لایه در حضور پتانسیل گیت ثابت برای چهار طول مختلف از ناحیه میانی.

ناخالصی‌ها می‌تواند روی رفتار تراپردی مواد تأثیر بگذارد و معیاری از تشخیص پتانسیل‌های موضعی در سطح اتمی باشد.

### تشکر و قدردانی

در پایان از همکاری و راهنمایی اساتید گرامی و دوستان خوبی که در این مسیر همراهی و همفکری ایشان گشایش راه بود، سپاس فراوان داریم.

### مرجع‌ها

[1] P. Bayati, Electronic in bilayer graphene nanostructure, (*master's thesis*). *Institute For Advanced Studies In Basic Sciences, Zanjan, Iran*, (2010).

[2] A.V. Rozhkov, A.O. Sboychakov, A.L. Rakhmanov, F. Nori, Electronic properties of graphene- based bilayer system, *Physics Reports*, **648** (2016) 1-104.

<https://doi.org/10.1016/j.physrep.2016.07.003>

[3] C.J. Tabert, Optical properties of AA-stacked bilayer graphene, (*Doctoral dissertation*). *The University of Guelph, Ontario, Canada* (2010).

[4] P. Dietl, Numerical studies of electronic transport through graphene nanoribbons with disorder, (*Diploma thesis*). *The University of Karlsruhe Germany* (2009).

[5] A. Belouad, Y. Zandi, A. Jellal, A. Bahaoui, Energy level of quantum ring in ABA-stacked trilayer graphene, *arXiv:1706.06671v1 [cond-mat.mes-hall]* (2017).

<https://doi.org/10.1007/s10909-019-02201-x>

[6] M. Trushin, J. Kailasvuori, J. Schliemann, A.H. MacDonald, Finite conductivity minimum in bilayer graphene

خیزهای آن را می‌توان تنها برحسب ماتریس پراکندگی در حضور سد پتانسیل الکتریکی به دست آورد. چون پتانسیل‌های عمود بر صفحه دویعدی گرافین با تعداد لایه‌های کم، باعث برهم زدن تقارن ساختار می‌شوند، عاملی برای ایجاد گاف نواری بوده و تغییرات رسانش را به دنبال دارد. تغییرات رسانش و چگونگی کنترل بر گاف نواری ایجاد شده، مطابق نمودارهای ترسیم شده در شکل‌های 8 و 7 آورده شده است، که نشان می‌دهد در بازه مشخصی از ولتاژ افت رسانش و سپس افزایش آن را مواجه هستیم این ویژگی، پایه علمی محاسبات مورد نیاز در ترانزیستورهای on-off را تأیید می‌کند. همچنین تناوبی بودن تغییرات رسانش با اعمال پتانسیل متناوب که در شکل 8 نیز ظاهر شده است که به وسیله تونل‌زنی کلاین توجیه‌پذیر است و تأییدی بر حضور این پدیده در ساختار گرافین دارد. از روی شکل‌ها دیده می‌شود که بسته به متقارن بودن زیرساختارها با پتانسیل‌های موضعی یکسان تنها در یک نقطه (به‌ازای یک مقدار پتانسیل) امکان جریان قطع وجود دارد، در صورتی که با نامتقارن بودن پتانسیل‌های موضعی زیرساختارها، در چندین نقطه (به‌ازای چندین مقدار پتانسیل) می‌توان به جریان قطع رسید. این رفتار تراپردی می‌تواند معیاری برای تشخیص پتانسیل زیرساختارهای مواد باشد.

همان‌طور که می‌دانیم حضور ناخالصی‌ها روی اتم‌ها می‌تواند پتانسیل‌های موضعی مختلفی ایجاد کند و از طرفی از یافته‌های این مقاله انتظار داریم جریان قطع به‌ازای مقادیر مختلف پتانسیل اتفاق بیافتد. پس در واقع موقعیت اتم‌ها نسبت به هم و همچنین حضور

- McCann, M. Bockrath, C.N. Lau, Stacking-Dependent Band Gap and Quantum Transport in Trilayer Graphene. *Nature Physics* **7** (2011) 948-952.  
<https://doi.org/10.1038/nphys2103>
- [14] S. Kumar, Ajay. Quasi Particle Spectrum in Trilayer Graphene: Role of Onsite Coulomb Interaction and Interlayer Coupling. *Elsevier Physica* **E65** (2015) 36-43.  
<https://doi.org/10.1016/j.physe.2014.08.010>
- [15] B. Van Duppen. S.H. Sena, F.M. Peeters, Multiband Tunneling in Trilayer Graphene, *Physical Review B* **87** (2013) 195439.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.195439>
- [16] B. Van Duppen, F.M. Peeters, Fermi Structure and Van Hove Singularities *Applied Physics Letters* **101** 226101 (2012).  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.026407>
- [17] I. Redouani, A. Jellal, A. Bahaoui, H. Bahlouli, Multibands Tunneling in AAA-Stacked Trilayer Graphene, *Superlattices and microstructures* **116** (2018) 44-53.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.195439>
- [18] J. Borysiuk, J. Soltys, Piechota. Stacking Sequence Dependence of Graphene Layer SiC(0001) Experimental and Theoretical Investigation. *Journal of Applied Physics* **109** (2011) 093523-093527.  
<https://doi.org/10.1063/1.3585829>
- [19] Z. Rashidian, Y.V. Bludov, R.M. Ribeiro, N.M.R. Peres, M.I. Vasilevskiy, M.I. Optical Conductivity of ABA Stacked Graphene Trilayer: mid-IR Resonance Due to Band Nesting. *IOP Journal of Physics: Condens Matter* **26** (2014) 395301.  
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/39/395301>
- without charge inhomogenrities, *Physical Review* **B82** (2010) 155308.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.155308>
- [7] M. Koshino, Interlayer screening effect in graphene multilayer with ABA and ABC stacking, *Physical Review*. **B81**, (2010) 125304.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.125304>
- [8] M.G. Menezes, R.B. Capaz, S.G. Louie Ab initio quasiparticle bandstructure of ABA and ABC- stacked graphene trilayer, *Physical Review*. **B89** 3 (2014) 035431.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.035431>
- [9] Y. Mohammadi, R. Moradian, F.S. Tabar, Effects of doping and bias voltage on the screening in AAA-stacked trilayer graphene, *Solid state communications* **193** (2014) 1-5.  
<https://doi.org/10.1016/j.ssc.2014.05.012>
- [10] Z. Rashidian, Y.V. Bludov, R.M. Ribeiro, N.M.R. Peres, Optical conductivity of ABA stacked graphene trilayer: mid- IR resonance due to band nesting, *Journal of Physics: Condens. Matter* **26** (2014) 395301.  
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/39/395301>
- [11] Y. Lee, Electrical Properties of Trilayer Graphene. (*Doctoral Dissertation*). University of California UC Riverside (2014).
- [12] H. Lio, H. Jiang, X.C. Xie, Intrinsic Superconductivity in ABA-Stacked Trilayer Graphene. *AIP Advances* **2** (2012) 041405.  
<https://doi.org/10.1063/1.4773226>
- [13] Bao, W. Jing, L. Lee, Y. Velasco Jr, J. Kratz, P. Tran, D. Standley, B.M. Aykol, B.S. Cronin, D. Smirnov, M. Koshino, E.

[26] T. Yokoyama, Spin and valley transport in junction of dirac fermions, *New Journal of Physics* **16** (2014) 085005.

<https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/8/085005>

<https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/39/395301>

[20] S. Chen, Y.H. Su, C.R. Chang, Asymmetric edge modes by staggered potential in honeycomb lattice: spin splitter, *Journal of applied physics* **117** (2015) 17c705.

<https://doi.org/10.1063/1.4906955>

[21] Z. Rashidian, N. Ahmadzadeh, Considering effect of staggered potential on conductance and berry phase in monolayer graphene, *Proceedings of 5<sup>th</sup> International Congress on Nanoscience & Nanotechnology, (ICNN)*, [https://www.civilica.com/paper-ICNN05-ICNN05\\_869](https://www.civilica.com/paper-ICNN05-ICNN05_869) (2014).

[22] H. Lee, Y.W. Son, N. Park, S. Han, J. Yu, Magnetic ordering at the edges of graphitic fragments: magnetic tail interaction between the edge-localized states, *Physical Review* **B72** (2005). 174431.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.174431>

[23] T. Morimoto, M. Koshino, Gate-induced dirac cones in multilayer graphenes, *Physical Review. B* **87** (2013) 085424.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.085424>

[24] H. Cheraghi, F. Adinevand, Control over bandstructure and tunneling in bilayer graphene induced by velocity engineering, *Journal of Physics Condens Matter* **26**. (2014) 015302.

<https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/1/015302>

[25] Y. Hajati, Z. Rashidian, Valley and spin resonant tunneling current in ferromagnetic/nonmagnetic/ferromagnetic silicene junction, *AIP Advances* **6** (2016) 025307.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.241409>