

The Study of Metal-Insulator Transition in Defected Graphene Nanotube by Applying an Electric Field: Quantum Chaos Approach

Sohrab Behnia*, Fatemeh Rahimi

¹Department of Physics, Urmia University of Technology, Urmia, Iran

Received: 14.11.2018 Final revised: 29.05.2019 Accepted: 26.06.2019

Doi: [10.22055/JRMBS.2019.14914](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2019.14914)

Abstract

By employing the quantum chaos theory, a metal-insulator transition was investigated in a single-walled graphene nanotube affected by vacancies based on the tight-binding Hamiltonian. The obtained results indicate that applying an electric field along the axis of the defected graphene nanotube caused metal to insulator transition. Using the spectral and multifractal analyses, the threshold value of the electric field was determined. The results show that in the absence of the electric field, the defected nanotube shows a metallic behavior with the Wigner distribution. By increasing the value of the electrical field, the level spacing distribution changes from Wigner (delocalized) to Poisson (localized) distribution. such that for the threshold value of the electrical field, Poisson level spacing sets in.

Keywords: Metal-insulator transition, Graphene nanotube, Defect, Electric field, Quantum chaos theory

* Corresponding Author: s.behnia@sci.uut.ac.ir



مطالعه گذار فلز به عایق در نانولوله گرافنی نقص دار با اعمال میدان الکتریکی:

رهیافت آشوب کوآنتومی

سهراب بهنیا*، فاطمه رحیمی

گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران

دریافت: 1397/08/23 ویرایش نهایی: 1398/03/08 پذیرش: 1398/04/05

Doi: [10.22055/JRMBS.2019.14914](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2019.14914)

چکیده

گذار فلز به عایق در یک نانولوله تک‌جداره گرافنی در حضور ناکاملی‌ها با استفاده از تئوری آشوب کوآنتومی بر مبنای هامیلتونی تنگ‌بست مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است. نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهند که اعمال میدان الکتریکی در امتداد محور نانولوله نقص‌دار موجب گذار از فاز رسانا به عایق می‌شود. با استفاده از تحلیل طیف انرژی و تحلیل مولتی فرکتالی، مقدار آستانه میدان الکتریکی برای بروز پدیده گذار تعیین شد. نتایج بیانگر آن است که نانولوله نقص‌دار در غیاب میدان الکتریکی رفتار فلزی از خود نشان می‌دهد. با افزایش تدریجی میدان الکتریکی، تابع توزیع تراز از حالت ویگنری (گسترده) به تابع توزیع پواسونی (جایگزیده) تبدیل می‌شود طوری که به‌ازای مقدار آستانه میدان الکتریکی، سیستم کاملاً به‌صورت پواسونی رفتار می‌کند.

کلیدواژگان: گذار فلز به عایق، نانولوله گرافنی، ناکاملی، میدان الکتریکی، تئوری آشوب کوآنتومی

به‌خود جلب کرده است. کاربرد نانولوله‌ها به‌ویژگی‌های فوق‌العاده آنها از جمله هدایت دمایی و الکتریکی بالا و خواص مکانیکی و شیمیایی آنها نسبت داده می‌شود. نانولوله‌های گرافنی را می‌توان با استفاده از بردار (n, m) معرفی کرد که این بردار بیان‌کننده ویژگی‌های الکترونیکی و ساختار هندسی آنها می‌باشد [5] در واقع، می‌توان گفت که نانولوله‌های گرافنی از پیچاندن صفحه گرافنی در راستاهای مناسب به‌دست آمده‌اند. تولید صفحات گرافنی با استفاده از روش‌های مختلف از قبیل تجزیه شیمیایی بخار منجر به‌بروز ناکاملی‌ها مانند تهی‌جای‌ها³ (حذف

مقدمه

گذار فلز به عایق¹ یکی از اساسی‌ترین مسائل فیزیک ماده چگال و مکانیک کوآنتوم می‌باشد. این گذار در گرافن با استفاده از روش‌های مختلف، هم به‌صورت تئوری [1] و هم به‌صورت تجربی مورد مطالعه و مشاهده قرار گرفته است [۲،۳] گذار فلز به عایق، گرافن را به‌عنوان ماده‌ای مناسب برای کاربردهای الکترونیکی از قبیل سنسورها معرفی می‌کند [4]. اخیراً، نانولوله‌های گرافنی² توجه بسیاری از محققان را در زمینه نانوالکترونیک انعطاف‌پذیر

*نویسنده مسئول: s.behnia@sci.uut.ac.ir

¹ Metal to insulator transition² Graphene nanotube³ Vacancy

آشوبناک دارد) را می توان بسته به تقارن های هامیلتونی در یکی از آنسامبل های فوق دسته بندی کرد. پرکاربردترین تحلیل بر مبنای نظریه ماتریس های تصادفی توزیع فاصله بین ترازهای مجاور ($P(s)$) می باشد که در تحلیل $P(s)$ با استفاده از تابع توزیع برودی⁷ برای تعیین دافعه تراز از پارامتر β استفاده می شود [11]. برای مطالعه جایگزیدگی در سیستم های کوآنتومی و گذار فلز به عایق می توان از این پارامتر استفاده کرد [12-14]. نظریه ماتریس های تصادفی امکان استفاده از تئوری آشوب کوآنتومی را فراهم می آورد. از ابزارهای تئوری آشوب کوآنتومی مانند تحلیل طیفی می توان برای تشخیص پایداری و ناپایداری سیستم های کوآنتومی بهره گرفت. هدف پژوهش حاضر مطالعه گذار فلز به عایق در نانولوله های گرافنی نقص دار در حضور میدان الکتریکی خارجی می باشد. برای این منظور، بر مبنای هامیلتونی تنگبست و با در نظر گرفتن برهم کنش مابین نزدیکترین همسایگی ها، با استفاده از تحلیل مولتی فرکتال⁸ و تحلیل طیف انرژی و نهایتاً مقایسه نتایج حاصل با نظریه ماتریس های تصادفی به تحلیل و بررسی گذار رسانا به عایق در این نانوساختارها می پردازیم.

مدل تنگبست

نانولوله گرافنی دسته صندلی⁹ در حضور تهی جای ها را به عنوان سیستم مورد مطالعه در نظر می گیریم (شکل 1). هامیلتونی سیستم با در نظر گرفتن برهم کنش نزدیک ترین

اتم های کربن از برخی نقاط شبکه گرافن) می شود [6]. همچنین، درحین فرآیند تولید ممکن است برخی از اتم های کربن با اتم های دیگری مانند نیتروژن جایگزین شود. در واقع، اتم های نیتروژن به عنوان بی نظمی¹ در شبکه عمل می کنند. انحراف از حالت کریستالی ایده آل به دلیل حضور ناکاملی ها از جمله نقص های² شبکه ای و ناخالصی ها³ می تواند منجر به تغییر خواص الکترونیکی به ویژه گاف انرژی⁴ این نانوساختارها شود [7]. این ناکاملی ها موجب ایجاد بی نظمی اندرسون در شبکه گرافن و نانوساختارهای آن می شود. مهم ترین هدف ایجاد بی نظمی اندرسون در نانوساختارهای گرافنی، ایجاد جایگزیدگی اندرسون⁵ [8] در این نانوساختارها می باشد. یکی از مناسب ترین روش ها برای مطالعه جایگزیدگی در شبکه های کوآنتومی که دارای بی نظمی می باشند استفاده از نظریه ماتریس های تصادفی⁶ می باشد [9]. در تلاش برای پیدا کردن روشی مناسب برای مطالعه سیستم های اتمی ویگنر [10] اولین کسی بود که نظریه ماتریس های تصادفی را مطرح کرد. این نظریه مبنای شالوده روش های مطالعه طیفی جهت تشخیص رفتار آشوبناک از رفتار منظم در مکانیک کوآنتومی می باشد. از جمله پرکاربردترین آنسامبل ها در نظریه ماتریس های تصادفی آنسامبل های گاوسین می باشند که خود این آنسامبل ها به سه دسته آنسامبل های متعامد گاوسی GOE ، آنسامبل های یکانی گاوسی GUE و آنسامبل های هم تافته گاوسی GSE تقسیم بندی می شوند. افت وخیز ترازهای انرژی سیستم های کوآنتومی (که معادل کلاسیکی آن ها رفتار

⁶ Random matrix theory

⁷ Brody distribution

⁸ Multifractal

⁹ Armchair

¹ Disorder

² Defect

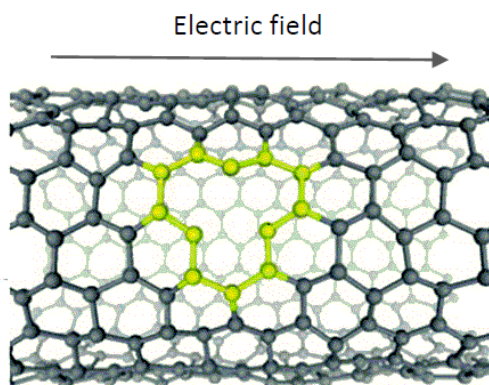
³ Impurity

⁴ Energy gap

⁵ Anderson localization

$$H_1 = eE \sum_i x_i c_i^+ c_i \quad 3$$

که در آن e بار الکتریکی، E میدان الکتریکی در امتداد طول نانولوله و x_i موقعیت اتم i ام در امتداد طول نانولوله می‌باشد [14].



شکل 1. نانولوله گرافنی دسته‌بندی در حضور ناخالصی‌ها. میدان الکتریکی در امتداد محور نانولوله اعمال شده است.

روش‌های تحلیل و بررسی

نظریه آشوب کلاسیک ابزار پرکاربردی در زمینه تحلیل دینامیک سیستم‌های کلاسیک است. از آنجا که آشوب کلاسیک بر مبنای تعریف مسیر در فضای فاز بنا نهاده شده است تعمیم مستقیم این تعریف به دنیای کوانتومی امکان‌پذیر نیست. سیستم‌های کوانتومی دارای دو مشخصه اصلی ترازهای انرژی و توابع موج هستند که دینامیک آنها را توصیف می‌کنند [17]. از این رو برای تعریف آشوب در سیستم‌های کوانتومی باید توجه خود را به دینامیک این دو کمیت معطوف کنیم. به این منظور با

همسایه‌ها با استفاده از تقریب تنگ‌بست چنین نوشته می‌شود:

$$H = H_0 + H_1 \quad 1$$

که H_0 هامیلتونی نانولوله گرافنی و H_1 جمله مربوط به حضور میدان الکتریکی خارجی می‌باشد.

$$H_0 = \varepsilon_c \sum_i c_i^+ c_i + t_{cc} \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^+ c_j \quad 2$$

در رابطه فوق ε_c بیانگر انرژی جایگاهی¹ اتم‌های کربن می‌باشد و مقدار آن برابر است با $\varepsilon_c = 0(eV)$. انتگرال جهش² بین اتم‌های کربن مجاور می‌باشد [15]. $(c_i^+ c_j)$ عملگر خلق (نابود) الکترون در جایگاه i ام است. $\langle i, j \rangle$ اشاره به برهم‌کنش نزدیک‌ترین همسایه‌ها دارد [15]. با معرفی نقص‌های شبکه‌ای از نوع تهی‌جای‌ها در نانولوله گرافنی، اتم‌های کربن در محل نقص از شبکه حذف می‌گردند. حذف اتم کربن در محل نقص منجر به حذف انتگرال جهش بین اتم کربن حذف شده با سه اتم کربن مجاور می‌شود. همچنین این تغییرات باعث تغییر طول پیوند و به بیان بهتر تغییر بسیار جزئی مقدار انتگرال جهش در نواحی نزدیک به محل نقص شبکه‌ای می‌شود. در این مطالعه مقدار انتگرال جهش در سراسر نانولوله ثابت فرض شده است [16].

اعمال میدان الکتریکی خارجی باعث اضافه شدن جمله زیر به هامیلتونی شبکه می‌شود:

² Hopping integral

¹ On-site energy

$$\alpha(q) = \frac{d\tau(q)}{q} \quad \text{و} \quad q = f'(\alpha)$$

$$f(\alpha_q) = \alpha_q q - \tau(q) \quad 7$$

$f(\alpha)$ تابعی محدب از α می باشد و بیشترین مقدار آن در محدوده $\alpha_m \geq d$ قرار دارد طوری که $f(\alpha_m) = d$ می باشد. در اینجا d معرف بعد توپولوژیکی سیستم می باشد. دامنه طیف تکینگی در محدوده (α_-, α_+) تعریف می شود طوری که $0 < \alpha_- < \alpha_+$ است. محدوده دامنه طیف تکینگی به ازای مقادیر مختلف پارامتر کنترل متفاوت می باشد. بنابراین با مقایسه دامنه طیف های مختلف می توان پاسخ سیستم دینامیکی را برای مقادیر مختلف پارامتر کنترل تعیین نمود. همچنین از ویژگی های جالب طیف تکینگی این است که پهن شدگی تابع $f(\alpha)$ برای حالت های جایگزیده⁴ (پایدار) نسبت به حالت های گسترده⁵ (آشوبناک) بیشتر است. به عبارت دیگر، هر چه به حالت فلزی نزدیک شویم دامنه طیف تکینگی کاهش می یابد. یعنی تابع $f(\alpha)$ باریک تر می شود [19].

بعد تعمیم یافته را می توان به صورت زیر معرفی کرد:

$$D_q = \tau(q) / (q - 1) \quad 8$$

استفاده از ابزارهای کوآنتومی نظیر تحلیل مولتی فرکتال و تحلیل طیفی به تحلیل سیستم می پردازیم.

تحلیل مولتی فرکتال

به منظور درک بهتر گذار بین حالت های فلزی و عایق تحلیل مولتی فرکتالی مورد استفاده قرار می گیرد. این تحلیل از جمله مفیدترین روش ها برای مطالعه سیستم های دینامیکی غیرخطی¹ می باشد [18]. با استفاده از طیف تکینگی² $f(\alpha)$ و بعد تعمیم یافته³ D_q می توان ویژگی های مولتی فرکتالی سیستم را تعیین کرد. برای تحلیل مولتی فرکتال فرض می شود $|\psi_i|^2$ مقدار تابع موج در مکان i ام یک شبکه d بعدی با حجم L^d باشد. در این صورت، اگر بتوانیم سیستم را با تعداد N_i جعبه به طول ضلع l جاروب کنیم، احتمال یافتن الکترون در K امین جعبه برابر است با:

$$\mu_k(l) = \sum_i |\psi_i|^2 \quad \text{و} \quad k = 1, 2, 3, \dots, N_i \quad 4$$

$$p_q(l) = \sum_{k=1}^{N_i} \mu_k^q(l) \quad 5$$

برای محدوده مشخصی از $\lambda = \frac{l}{L}$ می توان نوشت:

$$P_q(\lambda) \propto \lambda^{\tau(q)} \quad 6$$

با استفاده از تبدیل لژاندر برای طیف تکینگی داریم:

⁴ Localized states

⁵ Extended states

¹ Nonlinear dynamical systems

² Singularity spectrum

³ Generalized dimension

می‌شود. تابع برودی، تابع تک پارامتری با پارامتر β می‌باشد. طوری که برای $\beta = 0$ توزیع برودی به تابع توزیع پواسونی $P(s) = e^{(-s)}$ تبدیل می‌شود و برای $\beta = 1$ تابع برودی متناظر با تابع توزیع ویگنری $P(s) = \frac{\pi}{2} se^{(-\frac{\pi s^2}{4})}$ می‌باشد. بنابراین با تعیین β می‌توان توزیع ترازهای انرژی سیستم را پیدا کرد.

نتایج و بحث

در این مقاله برای مطالعه گذار فلز به عایق، نانولوله گرافنی دسته‌صندلی (15,15) با تعداد اتم‌های کل $N = 3090$ در نظر گرفته شده است. بنابراین ماتریس هامیلتونی یک ماتریس $(3090) \times (3090)$ خواهد بود. بعد از به دست آوردن ماتریس هامیلتونی و تعیین ویژه‌توابع و ویژه‌بردارها، با شروع از رابطه 4 می‌توان $f(\alpha)$ و D_q را محاسبه نمود. با توجه به اینکه ترازهای انرژی نزدیک به تراز انرژی صفر ($E = 0eV$) سهم عمده‌ای در رسانش دارند، محاسبات حول این تراز تمرکز یافته است. نتایج عددی حاصل از مطالعه طیف تکنیکی برای بازه انرژی $[-0.8t_{cc}, 0.8t_{cc}]$ به‌ازای مقادیر مختلف میدان الکتریکی در شکل 2 ارائه شده است.

برای رسانا $D_q = d$ ، برای عایق $D_q = 0$ و برای حالت‌های مولتی‌فرکتال D_q با استفاده از رابطه 8 به دست می‌آید.

تحلیل طیفی

افت و خیز ترازهای انرژی سیستم‌های کوآنتومی توسط توابع توزیع پواسونی (برای سیستم‌های کوآنتومی در ناحیه انتگرال‌پذیر که رفتار کلاسیکی آنها غیرآشوبناک و پایدار است) و ویگنری (برای سیستم‌هایی که معادل کلاسیکی آنها رفتار آشوبناک دارد) دسته‌بندی می‌شود. در این دسته‌بندی از معیاری به نام توزیع فضایی نزدیکترین همسایگی¹ استفاده می‌شود. از سوی دیگر، یک سری سیستم‌های دینامیکی وجود دارند که گذار از حالت پواسونی به ویگنری را تجربه می‌کنند. در واقع، برای این سیستم‌ها توزیع فضایی ترازهای انرژی تا حدی آشوبناک می‌باشد. در این رژیم میانی معمولاً از تابع توزیع برودی [20] استفاده می‌شود:

$$P_{\beta}(s) = As^{\beta} \exp(-\alpha s^{\beta+1}) \quad 9$$

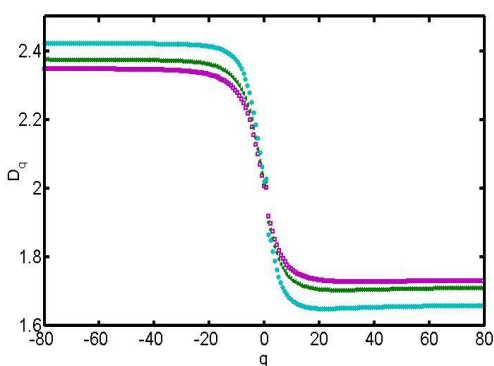
که

$$A = (1 + \beta)\alpha \quad \text{و} \quad \alpha = \left[\Gamma\left(\frac{\beta+2}{\beta+1}\right) \right]^{\beta+1} \quad 10$$

در صورتی که E_1, E_2, \dots, E_n دنباله‌ای مرتب شده از طیف انرژی یک سیستم کوآنتومی نوعی باشد، فاصله نزدیکترین ترازها به صورت $s_n = E_{n+1} - E_n$ تعریف

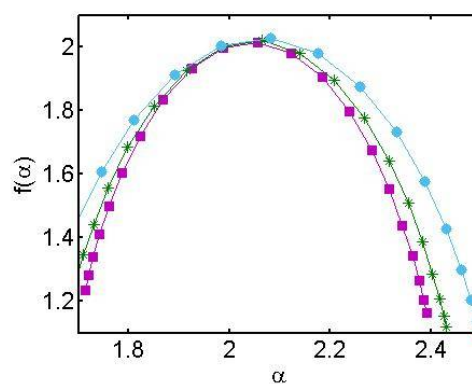
¹ Nearest neighbor spacing distribution

به منظور بررسی بیشتر، بعد تعمیم یافته فرکتالی برای نانولوله نقص دار به ازای همان مقادیر میدان الکتریکی در شکل 3 نمایش داده شده است. در این شکل افزایش پراکندگی D_q همزمان با افزایش مقدار میدان الکتریکی تا $E = 0.84(V/nm)$ بیانگر مشخصه مولتی فرکتالی پهن می باشد. چنین رفتاری درجه بزرگی از جایگزیدگی را مشخص می کند. در اینجا نیز برای مقادیر بزرگتر از آستانه میدان الکتریکی، پراکندگی بعد فرکتالی تعمیم یافته تغییر نمی کند. لازم به ذکر است که نتایج بالا در نظر گرفتن پنج موقعیت تصادفی برای تهی جای ها در شبکه گرافن حاصل شده اند و با افزایش تعداد موقعیت نقص ها نتایج تغییر نمی کند.



شکل 3. نمودار وابستگی D_q به مقادیر مختلف میدان الکتریکی خارجی برای نانولوله گرافنی نقص دار. منحنی بنفش رنگ مربعی متعلق به میدان $E = 0(V/nm)$ ، منحنی سبز رنگ ستاره دار متعلق به میدان $E = 0.3(V/nm)$ و منحنی آبی رنگ دایره ای متعلق به میدان $E = 0.84(V/nm)$ می باشد.

در شکل 4 نتایج حاصل از تحلیل طیفی برای نانولوله گرافنی با در نظر گرفتن پنج موقعیت برای تهی جای ها در غیاب میدان الکتریکی خارجی ($E = 0(V/nm)$) نشان

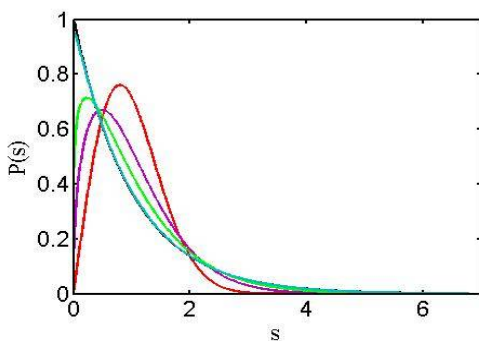


شکل 2. نمودار وابستگی $f(\alpha)$ به مقادیر مختلف میدان الکتریکی خارجی برای نانولوله گرافنی نقص دار. منحنی بنفش رنگ مربعی متعلق به میدان $E = 0(V/nm)$ ، منحنی سبز رنگ ستاره دار متعلق به میدان $E = 0.3(V/nm)$ و منحنی آبی رنگ دایره ای متعلق به میدان $E = 0.84(V/nm)$ می باشد.

شکل 2 نشان می دهد که طیف تکینگی به صورت یک تابع محدب از α می باشد و بیشترین مقدار آن در محدوده $\alpha_m \geq 2$ قرار دارد طوری که $f(\alpha_m) = 2$ می باشد. همچنین شکل نشان می دهد که با افزایش میدان الکتریکی دامنه تابع $f(\alpha)$ افزایش می یابد. این امر بیانگر آن است که با افزایش میدان الکتریکی تمایل سیستم برای جای گزیده تر شدن و رسیدن به فاز عایق افزایش می یابد. محاسبات نشان می دهد که با افزایش بیشتر میدان الکتریکی از مقدار $E = 0.84(V/nm)$ ، دامنه طیف تکینگی تغییر نمی کند. بنابراین حد آستانه میدان الکتریکی برای بروز پدیده گذار برای نانولوله مورد مطالعه برابر با $E = 0.84(V/nm)$ می باشد. همان گونه که از شکل پیداست افزایش دامنه طیف تکینگی به ازای آستانه میدان الکتریکی بیشتر می باشد. در واقع، به ازای میدان آستانه، سیستم رفتار متمایزی از خود نشان می دهد.

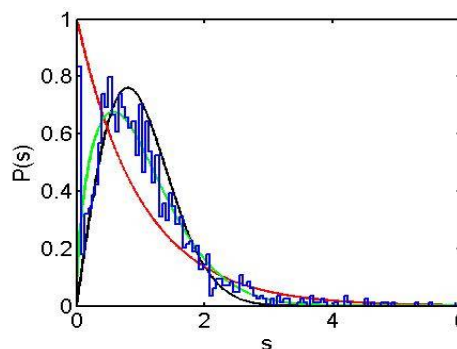
رنگ مربوط به توزیع پواسونی، منحنی سبزرنگ مربوط به توزیع برودی و منحنی پله‌ای مربوط به نتایج عددی می‌باشد.

نتایج مطالعه تحلیل طیفی به‌ازای مقادیر مختلف میدان الکتریکی در شکل 5 حاکی از آن است که با افزایش تدریجی میدان الکتریکی تمایل سیستم برای رسیدن به حالات جایگزیده‌تر افزایش می‌یابد، طوری که به‌ازای میدان الکتریکی $E = 0.84(V/nm)$ سیستم رفتار کاملاً پواسونی از خود نشان می‌دهد و به‌صورت یک نافلز رفتار می‌کند (انطباق نمودار آبی‌رنگ با نمودار سیاه‌رنگ). در این حالت مقدار به‌دست آمده از نتایج عددی برای پارامتر β برابر با 0.01 می‌باشد. همچنین محاسبات نشان می‌دهد که با افزایش بیشتر میدان الکتریکی مقدار پارامتر β تغییر نمی‌کند.



شکل 5. نمودار توزیع $P(s)$ برای نانولوله گرافنی نقص‌دار در حضور مقادیر مختلف میدان الکتریکی خارجی. منحنی سیاه مربوط به توزیع پواسونی، منحنی قرمز رنگ مربوط به توزیع ویگنری می‌باشد. منحنی بنفش رنگ متعلق به میدان $E = 0(V/nm)$ ، منحنی سبزرنگ متعلق به میدان $E = 0.3(V/nm)$ و منحنی آبی رنگ متعلق به میدان $E = 0.84(V/nm)$ می‌باشد.

داده شده است. در این شکل نمودار سیاه‌رنگ مربوط به توزیع ویگنری (متناظر با ناجای‌گزیدگی) و نمودار قرمز رنگ مربوط به توزیع پواسونی (متناظر با جای‌گزیدگی) می‌باشد. نمودار پله‌کانی بیانگر نتایج عددی در غیاب میدان الکتریکی می‌باشد. نمودار سبزرنگ نیز نشان دهنده توزیع برودی می‌باشد که این نمودار نتیجه درونیابی نتایج عددی با نظریه ماتریس‌های تصادفی می‌باشد. از شکل 4 می‌توان فهمید که نانولوله نقص‌دار در غیاب میدان الکتریکی تقریباً رفتاری ویگنری از خود نشان می‌دهد به‌عبارت دیگر سیستم به‌صورت یک فلز عمل می‌کند. با نگاه دقیق‌تر در شکل 4 متوجه حضور پیک شنیرلمن¹ [21] در ابتدای نمودار پله‌کانی با ارتفاع تقریباً 0.8 می‌شویم. حضور این پیک موجب شده است که مقدار پارامتر β به 0.55 کاهش یابد. این پیک به‌علت وجود تبهگنی بالا در سیستم می‌باشد. در اینجا با افزایش تعداد موقعیت‌های تصادفی برای نقص‌ها به‌بیشتر از پنج موقعیت، مقدار به‌دست آمده برای پارامتر β تغییر نمی‌کند.



شکل 4. نمودار توزیع $P(s)$ برای نانولوله گرافنی با در نظر گرفتن پنج موقعیت برای تهی‌جای‌ها در غیاب میدان الکتریکی خارجی ($E = 0(V/nm)$). منحنی سیاه رنگ مربوط به توزیع ویگنری، منحنی قرمز

¹ Shnirelman peak

[2] G. Kalon, Y.J. Shin, H. Yang, Tunable metal-insulator transitions in bilayer graphene by thermal annealing, *Applied Physics Letters* **98** (2011) 233108.

[3] S.Y. Zhou, D.A. Siegel, A.V. Fedorov, A. Lanzara, Metal to insulator transition in epitaxial graphene induced by molecular doping, *Physical review letters* **101** (2008) 086402.

[4] C. Gao, Z. Guo, J.H. Liu, X.J. Huang, The new age of carbon nanotubes: an up-dated review of functionalized carbon nanotubes in electrochemical sensors, *Nanoscale* **4** (2012) 1948-1963.

[5] H. Rafei-Tabar, Computational modelling of thermo-mechanical and transport properties of carbon nanotubes, *Physics Reports* **390** (2004) 235-452.

[6] G.D. Lee, C.Z. Wang, E. Yoon, N.M. Hwang, D.Y. Kim, K.M. Ho, Diffusion, Coalescence, and Reconstruction of Vacancy Defects in Graphene Layers, *Physical review letters* **95** (2005) 205501.

[7] J. Padilha, R.G. Amorim, A.R. Rocha, A. Da Silva, A. Fazzio, Energetics and stability of vacancies in carbon nanotubes, *Solid State Communications* **151** (2011) 482-486.

[8] P.W. Anderson, Absence of Diffusion in Certain Random Lattices *Physical review* **109** (1958) 1492-1505.

[9] M.L. Mehta, *Random Matrices*, Elsevier, (2004).

[10] E. Wigner, Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions, *Annals of Mathematics* **62** (1955) 548-564.

[11] O. Bohigas, M.J. Giannoni, C. Schmit, Characterization of chaotic quantum spectra

نتیجه گیری

در مطالعه حاضر، گذار فلز به عایق در نانولوله گرافنی نقص دار با استفاده از نظریه تحلیل طیفی و تحلیل مولتی فرکتال بر مبنای هامیلتونی تنگ‌بست مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که گذار فلز به عایق نتیجه اعمال میدان الکتریکی در امتداد محور نانولوله نقص دار می‌باشد. مهم‌تر اینکه، مقدار آستانه میدان الکتریکی ($E = 0.84(V/nm)$) برای گذار فلز به عایق تعیین شد. به ازای مقدار آستانه میدان الکتریکی، افزایش دامنه طیف تکنیکی و همچنین افزایش پراکندگی بعد تعمیم یافته فرکتالی کاملاً مشخص می‌باشد. با استفاده از تحلیل طیفی می‌توان فهمید که نانولوله نقص دار در غیاب میدان الکتریکی خارجی رفتاری تقریباً آشوبناک از خود نشان می‌دهد. با افزایش تدریجی شدت میدان الکتریکی رفتار سیستم به حالت پواسونی نزدیک می‌شود طوری که به ازای میدان الکتریکی $E = 0.84(V/nm)$ سیستم رفتار کاملاً پواسونی از خود نشان می‌دهد. بنابراین می‌توان با کنترل تعداد ناخالصی‌ها و تعیین اندازه شدت میدان الکتریکی امکان استفاده از نانولوله‌های گرافنی در کاربردهای نانو الکترونیک را فراهم کرد.

مرجع‌ها

[1] L. Zhang, Y. Zhang, M. Khodas, T. Valla, I.A. Zaliznyak, Metal to insulator transition on the $N=0$ Landau level in graphene, *Physical review letters* **105** (2010) 046804.

- [20] T.A. Brody, A statistical measure for the repulsion of energy levels, *Lettere al Nuovo Cimento* **7** (1973) 482-484.
- [21] B.V. Chirikov, D.L. Shepelyansky, Shnirelman peak in level spacing statistics, *Physical review letters* **74** (1995) 518.
- and universality of level fluctuation laws, *Physical review letters* **52** (1984) 1-4.
- [12] T.P. Kaloni, M. Modarresi, M. Tahir, M.R. Roknabadi, G. Schreckenbach, M.S. Freund, Electrically engineered band gap in two-dimensional Ge, Sn, and Pb: a first-principles and tight-binding approach, *The Journal of Physical Chemistry C* **119** (2015) 11896-11902.
- [13] H. Santos, L. Chico, J.E. Alvarellos, A. Latgé, Defect-enhanced Rashba spin-polarized currents in carbon nanotubes, *Physical Review B* **96** (2017) 165401.
- [14] J. Jung, A.H. MacDonald, Magnetoelectric coupling in zigzag graphene nanoribbons, *Physical Review B* **81** (2010) 195408.
- [15] A.H.C. Neto, F. Guinea, N.M. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, The electronic properties of graphene, *Reviews of modern physics* **81** (2009) 109.
- [16] H. Santos, L. Chico, J.E. Alvarellos, A. Latgé, Defect-enhanced Rashba spin-polarized currents in carbon nanotubes, *Physical Review B* **96** (2017) 165401.
- [17] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos*, Springer, (2010).
- [18] R.C. Hilborn, *Chaos and Nonlinear Dynamics: An Introduction for Scientists and Engineers*, Oxford University Press on Demand, (2000).
- [19] L.J. Vasquez, A. Rodriguez, R.A. Römer, Multifractal analysis of the metal-insulator transition in the three-dimensional Anderson model. I. Symmetry relation under typical averaging, *Physical Review B* **78** (2008) 195106.