Geometrical effects on the thermoelectric properties of single/bilayer graphene junctions

Nadia Salami[1,2], Aliasghar Shokri[2,]

[1]Department of Physics, Yasooj Branch, Islamic Azad University, Yasooj, Iran

[2]Department of Physics, Payame Noor University (PNU), P.O.Box 19395-3697, Tehran, Iran

Received: 28.02.2019 Final revised: 09.03.2020 Accepted: 02.11.2020

Doi link: 10.22055/JRMBS.2020.16179

Abstract

In this work, using the tight-binding approximation and kinetic coefficient matrix, the electrical and thermoelectric properties of four different configurations of single/bilayer graphene junctions with armchair and zigzag edges are studied. These electrical transport properties include the electrical conductivity coefficients (G), thermal conductivity (κ_e), thermoelectric power (S) and figure of merit (ZT_e), which are suitable for designing thermoelectric devices. The numerical results show that the system can exhibit a metallic or semiconductive behavior with a special edge under different geometric conditions. This makes it possible to exhibit that the thermoelectric power and thermoelectric performance of a relatively large size under particular conditions. In addition, the role of carriers (electron or hole) is clearly demonstrated in terms of electrical and thermoelectric properties. The results may be useful in designing nanoelectronic devices based on two-dimensional layers.

Keywords: Thermoelectric properties, Seebeck coefficient, Bilayer graphene junctions, Tight-binding approximation

*Corresponding Author: aashokri@pnu.ac.ir

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

اثرات هندسی بر روی خواص ترموالکتریکی در اتصالات گرافینی تک لایه‌ای/دو لایه‌ای

نادیا سلامی[1و2]، علی‌اصغر شکری[2,*]

[1]گروه فیزیک، واحد یاسوج، دانشگاه آزاد اسلامی، یاسوج، ایران

[2]گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه پیام نور، ص. پ. 3697-19395، تهران، ایران

دریافت: 1397/12/09 ویرایش نهائی: 1398/12/19 پذیرش: 1399/08/12

Doi link: 10.22055/JRMBS.2020.16179

چکیده

در این مقاله با استفاده از تقریب بستگی قوی و ماتریس ضرایب جنبشی، خواص الکتریکی و ترموالکتریکی چهار پیکربندی مختلف از نانونوار گرافینی اتصالات تک‌لایه‌ای/دولایه‌ای با لبه‌های صندلی شکل و زیگزاگی مطالعه می‌شود. این خواص ترابرد الکتریکی شامل ضرایب رسانش الکتریکی (G)، رسانندگی گرمایی (κ_e)، توان ترموالکتریکی (S) و شاخص شایستگی (ZT_e) می‌باشند که برای طراحی ادوات ترموالکترونیکی مناسب هستند. نتایج محاسبات عددی نشان می‌دهد که تحت شرایط هندسی مختلف سیستم می‌تواند رفتار فلزی و نیم‌رسانایی با گاف قابل تنظیم از خود نشان دهد. این باعث می‌شود که توان ترموالکتریکی و کارایی ترموالکتریکی مختلف و نسبتاً بزرگی تحت شرایط خاص اتصالات از خود نشان دهند. همچنین نقش نوع حامل‌ها (الکترون یا حفره) نیز در ایجاد خصوصیات الکتریکی و ترموالکتریکی به‌وضوح نشان داده می‌شود. نتایج این مقاله ممکن است در طراحی ادوات نانوالکترونیکی مبتنی بر لایه‌های دو بعدی مفید باشد.

کلیدواژگان: خواص ترموالکتریکی، توان ترموالکتریک، اتصالات دو لایه‌ای گرافین، تقریب بستگی قوی

مقدمه

فناوری نانو به‌عنوان یک علم میان رشته‌ای، یکی از دانش‌های کاربردی است که معمولاً در ساختارهای با ابعاد کمتر از یک میکرومتر (حدود 1 تا 100 نانومتر) بررسی می‌شوند. اهداف آن دست‌کاری مواد در مقیاس اتمی و تولید مواد و قطعات، به‌وسیلهٔ کنترل آنها در سطح اتم‌ها و مولکول‌ها است [1]. بر همین مبنا و با گسترش روزافزون دستگاه‌های ساخت و اندازه‌گیری با دقت بالا، محققین توانستند ساختارهای دوبعدی مانند گرافین، فسفرین، سیلیسین، ژرمنین، مولیبدن دی سولفاید، بورن نیتراید و غیره تولید نمایند به‌طوری که خواص منحصر به‌فردی را نسبت به‌حالت توده از خود نشان می‌دهند.

در این بین، گرافین یکی از آلوتروب‌های کربن [2] به‌دلیل داشتن خواص فوق‌العاده در رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی، چگالی بالا و تحرک‌پذیری حامل‌های بار الکتریکی، رسانندگی اپتیکی [3] و خواص مکانیکی [4] به ماده‌ای ویژه تبدیل شده است. از جمله خواص آن، خواص الکتریکی و ترموالکتریکی می‌باشد که در این مقاله به

*نویسنده مسئول: aashokri@pnu.ac.ir

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

این مقاله تحت مجوز کریتیو کامنز تخصیص 4,0 بین‌المللی می‌باشد

آنها می‌پردازیم. گرافین صفحه‌ای متشکل از اتم‌های کربن با ساختار شبکه‌ای لانه زنبوری است که به‌دلیل داشتن خواص رسانندگی، امروزه بسیار مورد توجه قرار گرفته است. طول پیوند کربن-کربن در گرافین در حدود 0/142 نانومتر است. تک‌لایهٔ گرافین، ساختار زیربنایی برای ساخت نانوساختارهای کربنی است که از روی هم قرار گرفتن همین تک‌لایهٔ گرافین، گرافین دو لایه‌ای، چند لایه‌ای و در نهایت تودهٔ سه بعدی گرافیت تشکیل می‌شود. برهم‌کنش این صفحات از نوع واندروالسی و فاصلهٔ بین صفحات 0/335 نانومتر است. لایه‌های گرافینی از 5 تا 10 لایه را گرافین کم لایه و بین 20 تا 30 لایه را گرافین چند لایه یا گرافین ضخیم می‌نامند. گرافین خالص تک‌لایه خاصیت شبه‌فلزی (گاف نواری صفر) نشان می‌دهد [5]. در گرافین طیف حامل‌ها شبیه به طیف فرمیون‌های دیراک بدون جرم می‌باشد [6].

خصوصیات گرافین به‌طور مستقیم به تعداد لایه‌های گرافین موجود بستگی دارد. با برش صفحه گرافین به‌صورت یک نوار باریک و محدود کردن الکترون‌ها در یک نوار، گاف نواری در ساختار الکترونی گرافین ایجاد می‌شود (بعضی اوقات به آن مهندسی گاف نواری گفته می‌شود). در این حالت، حامل‌های بار الکتریکی در یک سیستم شبه یک بعدی محدود می‌شوند. از طرفی دیگر، وجود شرایط مرزی و محدودیت در مرزها سبب محدودیت کوآنتومی برای تابع موج الکتریکی می‌شود. این محدودیت کوآنتومی در طیف انرژی، گاف ایجاد می‌کند. نانونوارهای گرافینی در واقع بلورهای کربنی یک بعدی با هیبریداسیون sp^2 و در مرزهای لبه‌ها[1] اتم‌های کربنی قرار گرفته‌اند که دارای پیوندهای آویزان[2] هستند. این نوارهای باریک و کشیده کربنی حاوی لبه‌هایی هستند که سبب ایجاد حالت‌های لبه‌ای و خواص الکترونی، شیمیایی و مغناطیسی متفاوتی نسبت به حالت توده، برحسب نوع و اندازهٔ این مرزها، می‌شوند [7]. به‌طور کلی ساختار لبه‌ها در این نانونوارها می‌تواند به‌صورت صندلی دسته‌دار، زیگزاگ و یا ترکیبی از این دو باشد. وجود این الگوهای لبه‌ای همچنان که پهنای نوارها افزایش می‌یابد، سبب تغییر پیوسته خواص از نیم‌رسانا به شبه‌فلز (گذار فاز) می‌شود [8].

با توجه به خواص الکتریکی و ترموالکتریکی گرافین، کاربردهای زیادی برای آن به‌خصوص در ادوات الکترونیکی مانند ترانزیستورها پیش‌بینی کرده‌اند. برای این کار نیاز است که بر روی گاف نواری گرافین کنترل داشته باشیم [9و5-4]. به‌عنوان مثال، با اعمال میدان الکتریکی خارجی عمود بر صفحهٔ دولایه‌ای گرافین، به‌کارگیری اتصالات (ابرشبکه) گرافین تک‌لایه‌ای/دولایه‌ای، انباشت ناخالصی، ایجاد نانوحفره (پاد نقطه) در آن و غیره می‌تواند در گرافین گاف نواری ایجاد نمایند [11و10].

در این مقاله، با توجه به اهمیت علم ترمودینامیک در ادوات الکترونیکی مبتنی بر گرافین، خواص الکتریکی و ترموالکتریکی نانونوارهای گرافین در اتصالات تک‌لایه‌ای/دولایه‌ای با پیکربندی‌های مختلف را بررسی می‌کنیم. ترتیب‌بندی مقاله به‌این صورت است: بعد از مرور مختصری بر پیشرفت‌های اخیر بر روی گرافین و نانونوار آن، فرمولبندی مورد نظر برای بررسی خواص ترابرد الکتریکی و گرمایی نانوساختار مبتنی بر آن بررسی می‌شود. از روی آن‌ها، ضرایب مختلف شامل رسانش الکتریکی (G)، رسانایی گرمایی (κ_e)، توان ترموالکتریکی (S) و شاخص شایستگی (ZT_e) استخراج و برای چهار پیکربندی مقایسه می‌شوند. این

[1] Edges

[2] Dangling Bonds

نتایج و توصیف آنها در بخش سوم آمده است. در بخش آخر مقاله جمع‌بندی و نتیجهٔ کلی ارائه می‌شود.

کارهای محاسباتی

در این قسمت، فرمولبندی نظری بر روی خواص ترموالکتریکی ساختار مبتنی بر تک‌لایه‌ای و همچنین دولایه نانونوار گرافینی (چهار پیکربندی مطابق شکل1) بررسی می‌کنیم. برای این کار یک وسیلهٔ متناهی که به‌وسیلهٔ دو الکترود نیم‌بی‌نهایت محدود شده است را در نظر می‌گیریم که در آن جریان الکتریکی و جریان گرمایی به‌ترتیب به‌دلیل اختلاف ولتاژ و اختلاف دما بین دو الکترود ایجاد می‌شود. برای سادگی از اثرات الکترون-فونون و اثرات اسپینی صرف‌نظر می‌کنیم.

هنگامی که در دو طرف دستگاه ترموالکتریکی (شکل2) اختلاف دما (ΔT) و اختلاف ولتاژ (ΔV) وجود داشته باشد حامل‌های بار از انتهای منطقهٔ گرم به‌انتهای منطقه سرد می‌روند و جریان الکتریکی بوجود می‌آید. در سیستم‌های ترموالکتریکی شارش بار به‌وجود میدان الکتریکی و شارش گرما به گرادیان دما وابسته است. با استفاده از معادلهٔ انتقال نیمه‌کلاسیک بولتزمان، جریان بار و جریان گرمایی به‌صورت [12]

$$J = q\int v(\mathbf{k})g(\mathbf{k})\, f(\mathbf{k})\, d\mathbf{k},$$
$$J_Q = q\int v(\mathbf{k})g(\mathbf{k})\, f(\mathbf{k})\big(\varepsilon(\mathbf{k})-\mu\big)\, d\mathbf{k}. \qquad 1$$

محاسبه می‌شوند که در آن $q=|e|$ بار الکتریکی الکترون، $g(\mathbf{k})$ چگالی حالت‌ها، $v(\mathbf{k})$ سرعت حامل‌ها، $f(\mathbf{k})=\left[1+\exp\left(\beta\left(\varepsilon(\mathbf{k})-\mu\right)\right)\right]^{-1}$ تابع توزیع اشغال حامل‌ها در نمونه $\beta = 1/k_B T$ ، T دما و μ پتانسیل الکتروشیمیایی الکترودها می‌باشند.

در رژیم خطی، جریان‌های الکتریکی و گرمایی که از ساختار مورد نظر از الکترود چپ به الکترود راست به‌واسطهٔ اختلاف ولتاژ بایاس ΔV و اختلاف دما ΔT جاری می‌شوند به‌صورت معادلهٔ ماتریسی [12]

$$\begin{pmatrix} J_e \\ J_Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q^2 \mathrm{L}_0 & \frac{q}{T}\mathrm{L}_1 \\ q^2 \mathrm{L}_1 & \frac{1}{T}\mathrm{L}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta V \\ \Delta T \end{pmatrix}, \qquad 2$$

نوشته می‌شوند. در اینجا، L_n با $(n=0-2)$ ضریب جنبشی است که با رابطهٔ ذیل داده می‌شود.

$$\mathrm{L}_n = -\frac{1}{h}\int_{-\infty}^{+\infty} dE\,\mathrm{T}(E)(E-\mu)^n \frac{\partial f}{\partial E} \qquad 3$$

در این رابطه، $\mathrm{T}(E)$ تابع احتمال عبوردهی الکترون فرودی با انرژی E است. با داشتن احتمال عبوردهی، ضرایب جنبشی مختلف با انتگرال‌گیری بر روی انرژی به‌دست می‌آید. پس از آن می‌توان سهم الکترونی را در ضریب رسانش الکتریکی $\left(G=q^2\mathrm{L}_0\right)$ و ضریب رسانش گرمایی به‌صورت

$$\kappa_e = \frac{1}{T}\left(\mathrm{L}_2 - \frac{L_1^2}{L_0}\right). \qquad 4$$

محاسبه نمود. همچنین، توان ترموالکتریکی (ضریب سیبک) که نسبت میدان الکتریکی $(\Xi=-\Delta V)$ به اختلاف دما است وقتی که جریان الکتریکی صفر باشد، با رابطهٔ زیر داده می‌شود:

$$S = -\frac{\Delta V}{\Delta T}. \qquad 5$$

با استفاده از معادلهٔ ماتریسی2 و رابطهٔ5، ضریب توان ترموالکتریکی می‌تواند براساس رابطهٔ زیر محاسبه شود:

$$S = -\frac{L_1}{qTL_0}. \qquad 6$$

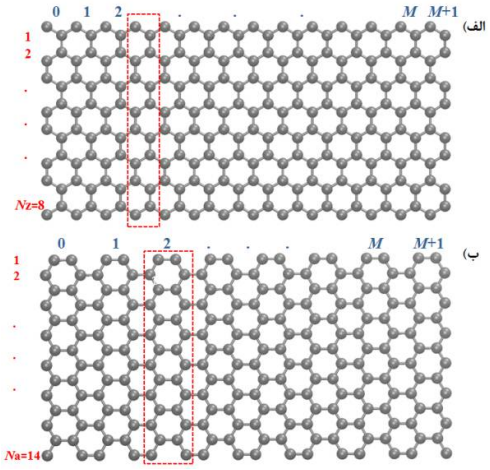
علامت توان ترموالکتریک در یک ساختار می‌تواند نوع حامل بار را تعیین کند. وقتی که حامل بار الکترون‌ها هستند، گرادیان دما و میدان الکتریکی، در جهت‌های

مختلف قرار می‌گیرند و در این حالت علامت توان ترموالکتریک مثبت می‌شود.

بازدهٔ حرارتی یک ماده (تبدیل انرژی حرارتی به‌انرژی الکتریکی)، از طریق یک کمیت بدون بعد که به‌صورت شاخص شایستگی (ZT_e) شناخته شده، تعیین می‌شود. کارایی یا بازده ترموالکتریکی یخچال‌ها و ژنراتورها با افزایش ZT_e، بالا می‌رود، بنابراین تلاش‌های زیادی برای یافتن ساختارهای مناسبی از نیم‌رساناها، با ZT_e بالا انجام شده است [13]. شاخص شایستگی را به‌صورت

$$ZT_e = \frac{GS^2}{\kappa_e} T. \qquad 7$$

تعریف می‌کنیم که توسط سه پارامتر رسانایی الکتریکی، توان ترموالکتریکی و رسانش گرمایی تعیین می‌شود. ضریب عبوردهی وسیله در رابطهٔ2 با استفاده از روش بستگی قوی تک‌نواری بر اساس فرمالیزم تابع گرین در رژیم همدوس و با درنظر گرفتن تقریب برهم‌کنش‌های نزدیکترین همسایه انجام شده است [14-15].



شکل1. نمای طرح‌واره نانونوارهای الف: زیگزاگی و ب: صندلی‌شکل. نانونوار زیگزاگی با تعداد یاخته‌های (خط‌های زیگزاگی، N_z) 8 و نانونوار صندلی‌شکل با تعداد یاخته‌های (خط‌های دوتایی، N_a) 14 نشان داده شده است، که به‌ترتیب دارای پهناهای 1,563، 1,619 نانومتر هستند.

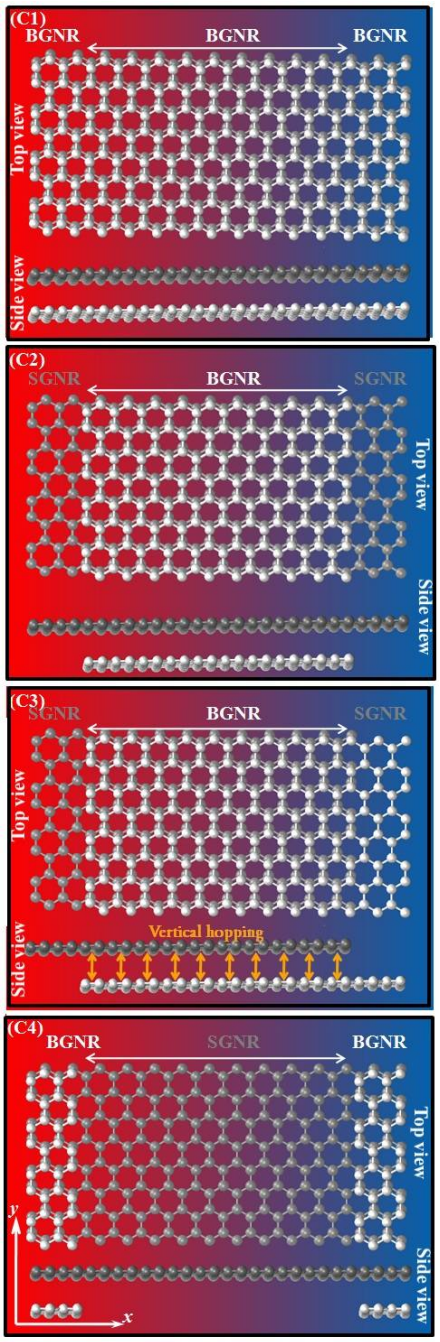
بحث و نتیجه‌گیری

در این بررسی مطابق شکل1، چهار پیکربندی مبتنی بر تک‌لایه و دولایه نانونوار گرافینی مورد مطالعه قرار گرفته است. پیکربندی C1 متشکل از دولایه نانونوار گرافینی ایده‌آل در هر سه ناحیه (الکترودهای راست و چپ و ناحیه میانی) با ساختار و پهنای مشابه است. پیکربندی C2 شامل یک دو لایه‌ای در ناحیهٔ میانی است به‌گونه‌ای که لایهٔ بالایی (یا لایهٔ پایینی) به هر دو الکترودهای راست و چپ متصل است. پیکربندی C3 مشکل از دولایه‌ای نانونوار گرافینی است که لایهٔ بالایی به الکترود چپ اما لایه پایینی به الکترود راست متصل است. در این حالت، حامل‌ها می‌توانند تنها از طریق برهم‌کنش‌های عمودی از طریق دولایه‌ای نانونوار گرافینی عبور کنند (به آن ترانزیستور گسیل میدانی تونل‌زنی TFET[1] نیز گفته می‌شود). ناحیهٔ میانی پیکربندی C4 از تک لایه نانونوار گرافینی تشکیل شده است در حالی که الکترودهای راست و چپ از دولایه‌ای نانونوار گرافینی تشکیل شده‌اند.

در این مقاله، به‌منظور تحقیق و طراحی ادوات ترموالکتریک مبتنی بر نانونوارهای گرافینی با کارایی بالا محاسبات عددی انجام شده است. در این راستا، خواص ترموالکتریک از قبیل رسانندگی الکتریکی، سهم الکترونی رسانندگی گرمایی، توان ترموالکتریکی یا ضریب سیبک و شاخص شایستگی در هر یک از چهار پیکربندی معرفی شده با دو نوع پایانه متفاوت زیگزاگی و صندلی‌شکل در لبه‌ها محاسبه می‌شوند. با بریدن تک‌لایهٔ گرافین دو بعدی در دو جهت خاص و

[1] Tunneling field emission transistor (TFET)

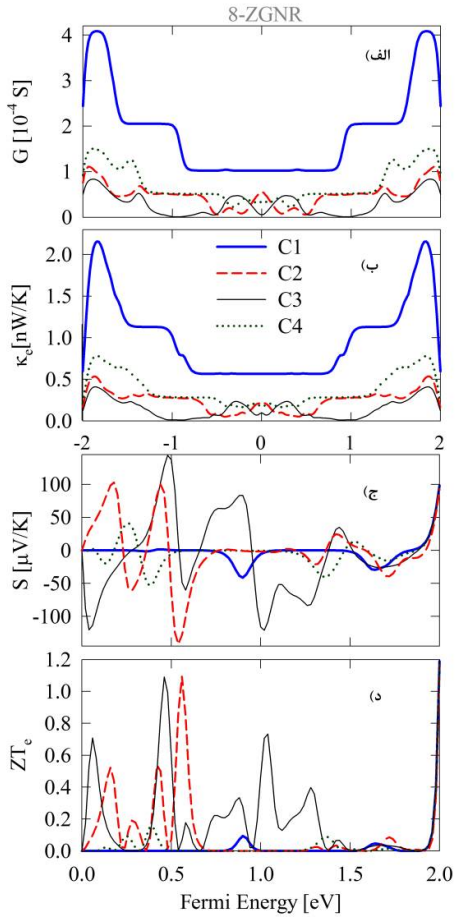
با پهنای مشخص، نانونوارهای زیگزاگی و صندلی‌شکل مدل می‌شوند که پهنای این نانونوارها به تعداد خط‌های زیگزاگی و تعداد خط‌های دوتایی به‌ترتیب در نانونوارهای زیگزاگی و آرمچیری بستگی دارند. در واقع نانونوار زیگزاگی با تعداد یاخته‌های (خط‌های زیگزاگی، N_z) 8 و دو نانونوار صندلی شکل با تعداد یاخته‌های (خط‌های دوتایی، N_a) 14 و 15 که به ترتیب دارای پهناهای 1/563، 1/619و 1/1743 نانومتر هستند، مطالعه می‌شوند (شکل1 را ببینید). پهنای نانونوار زیگزاگی و صندلی شکل به‌ترتیب مطابق رابطه‌های $W_z = \frac{N_z}{2}\sqrt{3}a_0$ و $W_a = \frac{N_a}{2}a_0$ به‌دست می‌آیند، که $a_0 = 0.249nm$ ثابت شبکه گرافین است. همچنین ثابت شبکه نانونوار زیگزاگی (صندلی‌شکل)، $T_x = a_0$ ($T_x = 3a_0$) در نظر گرفته شده است. وسیله از یک ساختار یک بعدی شامل M سلول واحد نانونوار ساخته شده است که به دو الکترود نیمه‌بی‌نهایت چپ و راست متشکل از نانونوار وصل شده است. در همهٔ محاسبات تعداد سلول‌های واحد در ناحیهٔ میانی $M = 10$ در نظر گرفته می‌شوند. در همه محاسبات تقریب بستگی قوی تک-نواری شامل اوربیتال‌های p_z به‌کار گرفته شده است. مقدار جمله خود انرژی و پارامتر انتگرال پرش درون-صفحه بین نزدیکترین همسایه‌ها به‌ترتیب صفر و 2/66 الکترون-ولت درنظر گرفته می‌شوند. علاوه بر آن، پارامتر انتگرال پرش بین-صفحه‌ای (عمودی) بین نزدیکترین همسایه‌ها 0/4 الکترون‌ولت استفاده شده است [16].



شکل2. نمای طرح‌واره پیکربندی‌های مختلف اتصال گرافین در حالت (الف) دو لایه‌ای (ب) تک لایه‌ای/دو لایه‌ای/تک لایه‌ای متقارن، (ج) تک لایه‌ای/دو لایه‌ای/تک لایه‌ای نامتقارن و (د) دو لایه‌ای/تک لایه‌ای/دو لایه‌ای. در هر قسمت تصویر از بالا و از کنار نشان داده شده است.

سه نانونوار گرافینی درنظر گرفته شده در این مطالعه دارای پهناهای تقریباً مشابه اما خواص فیزیکی متفاوتی دارند. محاسبات عددی نشان می‌دهد که اتصالات تک‌لایه و دولایه‌ای نانونوار زیگزاگی مورد مطالعه، رفتار فلزی با رابطهٔ پاشندگی سهموی از خود نشان می دهند. جرم مؤثر حامل‌ها در دومین نوار اطراف تراز فرمی در تک‌لایه این نانونوار زیگزاگی $0{,}155m_0$ تخمین زده شده است. در مقابل نانونوار صندلی‌شکل با پهنای 1/619نانومتر خاصیت فلزی از خود نشان می‌دهد که سرعت فرمی حامل‌های نسبیتی فاقد جرم تک‌لایه و همچنین دولایه $2{,}984\times10^5$ متر بر ثانیه به‌دست آمده است. این در حالی است که تک لایهٔ نانونوار آرمچیری با پهنای 1/743نانومتر شبیه یک نیم‌رسانا با اندازهٔ گاف نواری حدود 0/6الکترون‌ولت رفتار می‌کند. این رفتار پیش‌بینی می‌کند که حامل‌های بار نسبیتی دارای جرم $0{,}014m_0$ می‌باشند [15]. در شکل3، خواص ترموالکتریکی نانونوار زیگزاگی با پهنای 1/563نانومتر در چهار پیکربندی معرفی شده C1، C2، C3 و C4 مطابق شکل2 در دمای 300کلوین ارائه شده است. در هر چهار پیکربندی خاصیت رسانایی مشاهده می‌شود. همان‌طوری که انتظار می‌رود رسانش الکتریکی تا حد زیادی در ساختارهای C2، C3 و C4 نسبت به ساختار C1 کاهش می‌یابد. دلیل این کاهش می‌تواند به‌صورت زیر توضیح داده شود: الکترون‌ها در یک نوار انرژی معین در یک ساختار دوره‌ای ایده‌آل مانند C1 در نتیجه تداخل سازنده می‌توانند عبور کنند. در حالی‌که اگر تناوب سیستم در سه ناحیه مانند C2، C3 و C4 حفظ نشود، رسانش الکترون‌ها کاسته خواهد شد. اگر چه که رسانندگی الکتریکی پیکربندی C1 در دمای نزدیک به صفر کلوین رفتار پله‌گونه خواهد داشت که افزایش دما باعث می‌شود از این رفتار تا حدی انحراف پیدا کند. انتقال الکترون‌ها در پیکربندی C3 به‌عنوان پیکربندی ویژه در این مطالعه، تنها از طریق برهم‌کنش‌های عمودی ضعیف واندروالسی صورت می‌گیرد. رسانش الکتریکی در این پیکربندی در اغلب انرژی الکترون‌های فرودی کمتر از دو پیکربندی دیگر C2 و C4 است. نکته جالب در مورد این ساختار این است که مقدار رسانش الکترون‌ها به‌طول ناحیهٔ میانی بستگی دارد به‌نحوی که به‌نظر می‌رسد، با افزایش طول ناحیهٔ میانی، مقدار رسانش الکترون‌ها در این پیکربندی برخلاف سایر پیکربندی‌ها افزایش می‌یابد.

سهم الکترونی رسانندگی گرمایی در پیکربندی‌های C2، C3 و C4 نسبت به پیکربندی C1 تا حدی مشابه رسانندگی الکتریکی است. در منحنی‌های رسانش الکتریکی و گرمایی در هر چهار پیکربندی، تقارن الکترون-حفره مشاهده می‌شود. علاوه بر این، نتایج نشان می‌دهند که توان ترموالکتریکی (یا ضریب سیبک) به‌شدت به انرژی پتانسیل شیمیایی در سیستم‌ها بستگی دارد. به‌خوبی مشخص است، که یک اختلاف دما در دو الکترود راست و چپ در حالت پایا منجر به اختلاف پتانسیل شیمیایی در دو الکترود و در نتیجه باعث ایجاد شار پخشی حامل‌ها می‌شود. بنابراین غلظت حامل‌ها در دو الکترود سرد و گرم تغییر می‌کند و باعث ایجاد یک ولتاژ ترموالکتریک می‌شود.

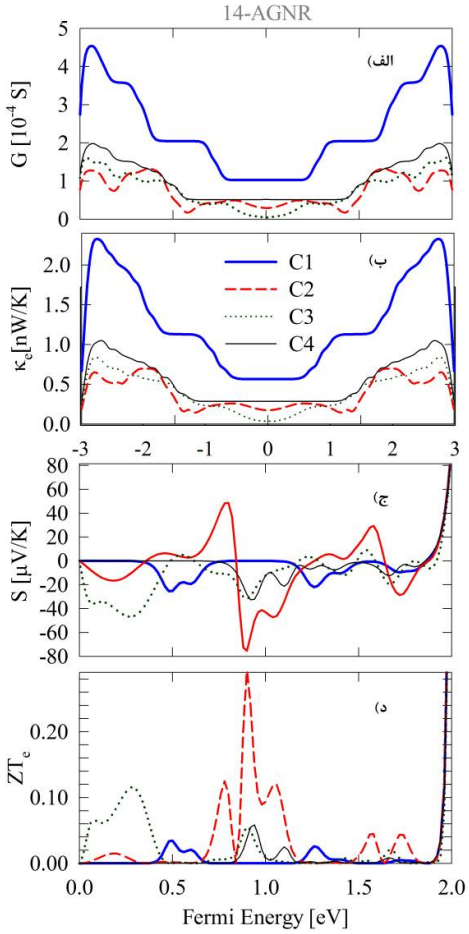


شکل3. وابستگی الف: رسانایی الکتریکی ب: سهم الکترونیکی رسانندگی گرمایی، ج: توان ترموالکتریکی و د: سهم الکترونیکی شاخص شایستگی (کارایی ترموالکتریکی) برحسب تابعی از انرژی پتانسیل شیمیایی در پیکربندی‌های مختلف مبتنی بر نانونوار زیگزاگی گرافینی به‌پهنای 1/563نانومتر.

تمام این رفتارها وابسته به چگالی حالت‌های حامل‌ها است. از این رو ضریب سیبک می‌تواند از طریق اعمال میدان الکتریکی خارجی [17]، آلایش جانشینی [18]، آلایش جذب شیمیایی [18]، آلایش از طریق جای‌تهی، کرنش [19] و غیره تنظیم شود. از آنجا که سیستم‌های پیشنهاد شده دارای چگالی حالت‌های به‌شدت وابسته به انرژی و متنوعی هستند، بنابراین توان ترموالکتریکی متفاوت و قابل تنظیمی را می‌توان انتظار داشت. از طرفی دیگر، انرژی پتانسیل شیمیایی به‌وسیلهٔ آلایش، ولتاژ اعمالی و همچنین دمای اعمالی می‌تواند تغییر کند. به‌طور مثال، آلایش نوع گیرنده[1] سیستم باعث می‌شود که پتانسیل شیمیایی به‌سمت نوار ظرفیت جابه‌جا شود که این منجر به‌پتانسیل شیمیایی منفی می‌شود. وقتی $\mu < 0$ $(\mu > 0)$، توان ترموالکتریکی مطابق با معادلهٔ4 و توضیحات بالا مثبت (منفی) می‌شود و در مواد نیمه‌هادی به مقادیر نسبتاً بزرگ حول لبه نوار ظرفیت (رسانش) می‌رسد. یعنی علامت توان ترموالکتریک می‌تواند تعیین کنندهٔ نوع حامل‌ها باشد. در این ساختارها، مقدار قدرمطلق بیشینه توان ترموالکتریکی وقتی ظاهر می‌شود که پتانسیل شیمیایی در فاصله‌ای از مرتبهٔ چند $k_B T$ از لبه گاف باشد [20]. به‌طور کلی، توان ترموالکتریک غیرصفر تنها در نواحی ظاهر می‌شود که شیب منحنی رسانش غیرصفر باشد. همچنین، تغییر سریع رسانش منجر به توان ترموالکتریکی بزرگی می‌شود. به‌همین دلیل در ساختار C1 که رسانش در بازهٔ انرژی حدوداً بین [1و1-] الکترون‌ولت ثابت باقی می‌ماند، توان ترموالکتریکی در این محدوده صفر است و همچنین مشاهده می‌شود در محدودهٔ چند $k_B T$ در انرژی‌هایی که رسانش تغیرات قابل توجهی داشته است، توان ترموالکتریکی دارای مقدار قابل توجهی است. در همین راستا، از آنجا که رسانش الکتریکی در پیکربندی‌های C2 و C3 تغییرات بیشتری نسبت به سایر ساختارها دارد، بنابراین محاسبات عددی ما پیش‌بینی می‌کنند، که توان ترموالکتریکی در این پیکربندی‌ها، مقدار بیشتری به‌خصوص در اطراف تراز فرمی دارد، که به‌طور عددی مقدار آن به 141/93- میکروولت بر کلوین و 143/96میکروولت بر کلوین در آلایش نوع دهنده

[1] *p*-type doping

به‌ترتیب در $\mu = 0.54$ الکترون‌ولت در ساختار C2 و $\mu = 0.48$ الکترون‌ولت در ساختار C3 در دمای 300کلوین می‌رسد. علاوه براین، رفتار نوسانی مشاهده شده در توان ترموالکتریکی به رقابت بین الکترون‌ها و حفره‌ها در سیستم نسبت داده می‌شود، که آنها به‌ترتیب وقتی $S < 0$ و $S > 0$ باشد، سهم‌های غالبی در ضریب سیبک دارند.



شکل4 وابستگی الف: رسانایی الکتریکی ب: سهم الکترونیکی رسانندگی گرمایی، ج: توان ترموالکتریکی و د: سهم الکترونیکی شاخص شایستگی (کارایی ترموالکتریکی) برحسب تابعی از انرژی پتانسیل شیمیایی در پیکربندی‌های مختلف مبتنی بر نانونوار صندلی شکل گرافینی به‌پهنای 1/619نانومتر.

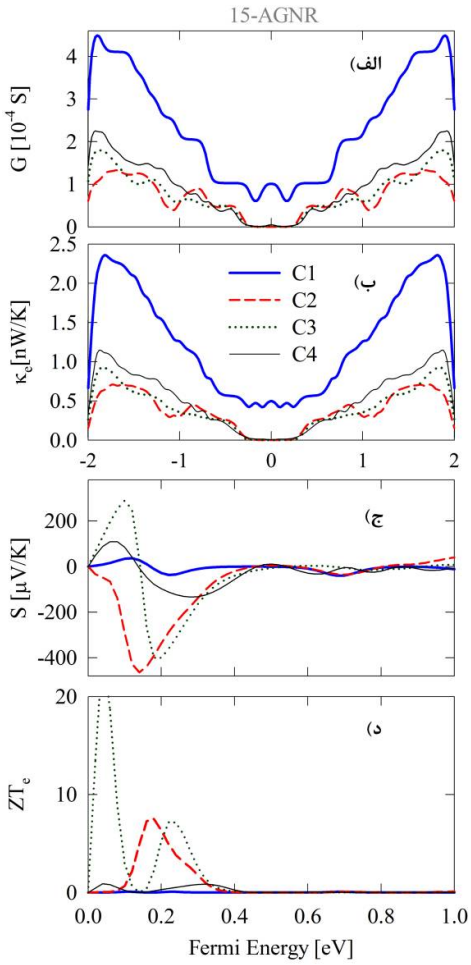
همچنین با ارزش است که به این موضوع اشاره شود که در سیستم‌هایی که تقارن الکترون-حفره وجود دارد (ندارد)، حول انرژی فرمی صفر (حول مرکز گاف-نواری)، ضریب سی‌بک پاریته فرد دارد.

در شکل 3د، پارامتر بی‌بعد شاخص شایستگی هر چهار ساختار برحسب انرژی فرمی رسم شده است. از شکل دیده می‌شود که نانونوار زیگزاگی به‌پهنای 1/563نانومتر در پیکربندی‌های C2 و C3 دارای بیشترین کارایی ترموالکتریک (البته با احتساب سهم الکترونیکی به‌تنهایی) در مقادیر کوچک انرژی فرمی است. درحالی‌که همان‌طور که از محاسبات ضریب سیبک انتظار می‌رفت این نانونوار زیگزاگی در پیکربندی C1، در انرژی پتانسیل شیمیایی حدود کمتر از 0/7الکترون‌ولت کارایی تبدیل انرژی حرارتی به انرژی الکتریکی و برعکس را ندارد.

محاسبات مشابهی برای نانونوار صندلی شکل با دو پهنای 1/619 و 1/743نانومتر در چهار پیکربندی معرفی شده C1، C2، C3 و C4 در دمای 300کلوین انجام شده است که نتایج آن به‌ترتیب در شکل‌های4 و 5 ارائه شده‌اند. شکل4 نشان می‌دهد، که برخلاف سه ساختار C1، C2 و C4 که خاصیت رسانایی در آنها مشاهده می‌شود، در ساختار C3 در انرژی‌های نزدیک صفر رسانش به صفر می‌رسد. بهتر است به آن اشاره شود که یک عامل مؤثر، تعیین کننده و قابل تنظیم در خواص ترابرد پیکربندی C3، طول ناحیهٔ میانی (اتصال[1]) است، در واقع این پارامتر مؤثری برای انتقال عمودی الکترون‌ها و عبور آنها از وسیلهٔ مورد نظر است. به‌نظر می‌رسد با افزایش طول ناحیهٔ میانی، رسانندگی وسیله با این ساختار افزایش یابد. وضعیت مشابهی در خصوص سهم الکترونی رسانندگی گرمایی مشاهده

[1]junction

می‌شود. همچنین از آنجا که پیکربندی‌های C1 و C4، رسانندگی ثابتی در انرژی‌های کوچک دارند، به‌همین دلیل ضریب سیبک در محدودهٔ انرژی مورد نظر، مقدار کمینهٔ صفر از خود نشان می‌دهد. در مقابل توان ترموالکتریکی در پیکربندی C2 نبست به سایر پیکربندی‌ها مقدار بیشتری دارد که مقدار آن به 75/22- میکروولت بر کلوین می‌رسد. همچنین محاسبات پیش بینی می‌کنند که سهم الکترونیکی کارایی ترموالکتریکی نانونوار صندلی شکل با پهنای 1/619نانومتر در پیکربندی C3 نسبت به سایر پیکربندی‌ها بیشینه مقدار خواهد داشت که در پتانسیل شیمیایی 0,90 الکترون‌ولت به‌مقدار 0/30 در دمای 300کلوین می‌رسد. مطابق شکل5، رسانندگی الکتریکی فقط در پیکربندی C1 برای نانونوار صندلی شکل با پهنای 1/743نانومتر در همه انرژی‌های مورد بررسی مشاهده می‌شود. در مقابل، به‌دلیل تغییرات قابل ملاحظه در رسانش الکتریکی در هر چهار پیکربندی، توان ترموالکتریکی غیرصفری مشاهده می‌شود که مقادیر قابل توجهی در آلایش‌هایی با پتانسیل شیمیایی کمتر از 0/4الکترون‌ولت برای توان ترموالکتریکی تخمین زده می‌شود. از لحاظ عددی مقدار آنها در دو پیکربندی C2 و C3 به‌ترتیب به مقادیر بیشینه 463/94- و 400/68- میکروولت بر کلوین می‌رسند. به‌عنوان یک نتیجه با ارزش در این مطالعه، مقدار الکترونیکی کارایی ترموالکتریک در نانونوار صندلی شکل با پهنای 1/743نانومتر در دو پیکربندی C2 و C3 به‌ترتیب به‌مقادیر قابل توجه 7/51 و 24/94 در دمای 300 کلوین می‌رسد که بسیار بیشتر نسبت به همه ساختارهای مورد مطالعه است.



شکل5. وابستگی الف: رسانایی الکتریکی ب: سهم الکترونیکی رسانندگی گرمایی، ج: توان ترموالکتریکی و د: سهم الکترونیکی شاخص شایستگی (کارایی ترموالکتریکی) برحسب تابعی از انرژی پتانسیل شیمیایی در پیکربندی‌های مختلف مبتنی بر نانونوار صندلی شکل گرافینی به‌پهنای 1/743نانومتر.

بحث و نتیجه‌گیری

در این مقاله خواص ترموالکتریکی چهار پیکربندی مختلف از نانونوار گرافینی اتصالات تک‌لایه‌ای/دولایه‌ای در چهار قالب پیکربندی متفاوت با لبه‌های صندلی‌شکل و زیگزاگی مطالعه شدند. نانونوارهای گرافینی مورد مطالعه دارای پهنای تقریبی مشابه اما خواص فیزیکی متفاوتی هستند. محاسبات

عددی نشان دادند، که مقدار الکترونیکی کارایی ترموالکتریک در نانونوار صندلی شکل با پهنای 1/743نانومتر در دو پیکربندی C2 و C3 به‌ترتیب به‌مقادیر قابل توجه 7/51 و 24/94در دمای 300 کلوین می‌رسد که بسیار بیشتر نسبت به همهٔ ساختارهای مورد مطالعه است.

مرجع‌ها

[1] H. Nejo, Nanostructure-Fabrication and Analysis, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2007).

https://www.springer.com/gp/book/9783540375777

[2] A.K. Geim and K.S. Novoselov, The rise of graphene, *Nature Materials*, **6** (2007) 183-191.

https://doi.org/10.1038/nmat1849

[3] R.R. Nair, P. Blake, A.N. Grigorenko, K.S. Novoselov, T.J. Booth, T. Stauber, N.M.R. Peres, A.K. Geim, Fine structure constant defines visual transparency of grapheme. *Science* **320** (2008) 1308. 10.1126/science.1156965

[4] A.K. Geim, and P. Kim. Carbon wonderland. *Scientific American* **298** (2008) 90-97.

https://www.jstor.org/stable/26000566

[5] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V., Grigorieva, S.V. Dubonos, A.A. Firsov, Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, *Nature* **438** (2005) 197-200. https://doi.org/10.1038/nature04233

[6] K.S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T.J. Booth, V.V. Khotkevich, S.V. Morozov, A.K. Geim, Two-dimensional atomic crystals, *Proceedings of the National Academy of Sciences of USA* **102** (2005) 10451-10453. https://doi.org/10.1073/pnas.0502848102

[7] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence, *Physical Review B* **54** (1996) 17954. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.17954

[8] X. Jia, M. Hofmann, V. Meunier, B.G. Sumpter, J. Campos-Delgado, J.M. Romo-Herrera, H. Son, Y. Hsieh, A. Reina, J. Kong, M. Terrones, M.S. Dresselhaus, Controlled formation of sharp zigzag and armchair edges in graphitic nanoribbons, *Science* **323** (2009) 1701. https://doi.org/10.1126/science.116686

[9] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M. R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, The electronic properties of graphene, *Reviews of Modern Physics* **81** (2009) 109. https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109

[10] B. Sahu, H. Min, A.H. MacDonald, S.K. Banerjee, Energy gaps, magnetism, and electric-field effects in bilayer graphene nanoribbons, *Physical Review B* **78** (2008) 045404. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.045404

[11] B. Sahu, H. Min, S.K. Banerjee, Effects of edge magnetism and external electric field on energy gapsin multilayer graphene nanoribbons, *Physical Review B* **82** (2010) 115426. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.115426

[12] N.W. Ashcroft, N. David. Mermin, Solid-state physics, New York, Holt, Rinehart and Winston (1976).

[13] G.D. Mahan, Figure of merit for thermoelectrics, *Journal of Applied Physics* **65** (1989) 1578. https://doi.org/10.1063/1.342976

[14] T.C. Li, S.-P. Lu, Quantum conductance of graphene nanoribbons with edge defects, *Physical Review B* **77** (2008) 085408. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.085408

[15] A. Shokri, M. Esrafilian, N. Salami, Quantum transport of tunnel field effect transistors based on bilayer-graphene nanoribbon heterostructures, *Physica E* **119** (2020) 113908. https://doi.org/10.1016/j.physe.2019.113908

[16] A.V. Rozhkova, A.O. Sboychakova, A.L. Rakhmanova, F. Noria, Electronic properties of graphene-based bilayer systems, *Physics Reports* **648** (2016) 1-104. https://doi.org/10.1016/j.physrep.2016.07.003

[17] M. Buscema, M. Barkelid, V. Zwiller, H.S.J. van der Zant, G.A. Steele, A. Castellanos-Gomez, Large and tunable photothermoelectric effect in single-layer MoS_2, *Nano Letters* **13** (2013) 358-363. https://doi.org/10.1021/nl303321g

[18] Gh. Adessi, S. Thebaud, R. Bouzerar, G. Bouzerar, First principle investigation on thermoelectric properties of transition metal dichalcogenides: beyond the rigid band model, *Journal of Physical Chemistry* C **121** (2017) 12577–12584. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b02570

[19] G. Huai-Hong, T. Yang, P. Tao, Z.-D. Zhang, Theoretical study of thermoelectric properties of MoS_2, *Chinese Physics B* **23** (2014) 017201. https://doi.org/10.1088/1674-1056/23/1/017201

[20] A. Shokri, N. Salami, Thermoelectric properties in monolayer MoS2 nanoribbons with Rashba spin–orbit interaction, *Journal of Materials Sciences* 54 (2019) 467-482. https://doi.org/10.1007/s10853-018-2837-8