اولین همایش ملی نانوتکنولوژی مزایا وکاربردها

محل برگزاری : همدان دانشکده شهید مفتح

۱۵ اسفند ۱۳۹۲

اثر برهم کنش کولنی موضعی‌بین الکترونی‌ومغناطش زیر شبکه ی روی خواص الکترونی نانو لوله زیگزاگ

زیباآقایی منش،[1]حامدرضانیا[2]،علی هاشمی زاده عقدا[3]،محمد بهلول[4]،سهیلا شجاعی[5]

[1]ارشد فیزیک حالت جامد،گروهفیزیکدانشگاهپیامنورتهران

Ziba_aghaee62@yahoo.com(۰۹۱۸۵۵٤۲۱۲٤)

[2]استادیار دانشگاه رازی کرمانشاه،گروه فیزیک دانشگاه رازی کرمانشاه

Hamed.rezania@gmail.com

[3] استادیار دانشگاه پیام نور تهران،گروه فیزیک دانشگاه پیام نورتهران

ahashemizadeh@yahoo.com

[۴]ارشد فیزیک حالت جامد،گروه فیزیک دانشگاه پیام نورتهران

M_bohlol@yahoo.com

[5] ارشد فیزیک حالت جامد، دانشگاه آزاد اسلامی قم

Shoja_1@yahoo.com

چکیده:

در این مطالعه مدل هابارد برای توصیف خواص الکترونی نانو لوله زیگزاگ به کار برده ایم و در تقریب میدان متوسط وحضور یک نظم بلند برد پادفرومغناطیس نحوه تغییرات چگالی حالات الکترونی ومغناطش زیر شبکه ی را بررسی کرده ایم .نتایج نشان میدهد که افزایش بر هم کنش کولنی ومغناطش زیر شبکه ی باعث افزایش پهنای گاف موجود درساختار نانو لوله زیگزاگ و گذار عایق مات می شود وبا افزایش قطر نانولوله زیگزاگ پهنای گاف ایجاد شده در نمودار با لحاظ کردن اثر برهم کنش کولنی افزایش می یابد.

واژه های کلیدی:مدل هابارد ،نانو لوله زیگزاگ ، چگالی حالات الکترونی ، مغناطش زیر شبکه ی ،اثر برهم کنش کولنی ،گذار عایق مات ،

۱- مقدمه :

نانولوله های کربنی[1]به عنوان صفحه گرافینی لوله شده به دلیل خواص ساختار ی والکترونی منحصر به فرد خود باعث ایجاد علایق تحقیقاتی وسیعی در بین علوم کاربردی محض شده است[2] از جوانب مهیج نانولوله هامی توان به وابستگی ظهور خواص رسانایی و یا فلزی به قطر وآرایش اتمی آنها در طول محیط شان اشاره کرد [3,4].چگالی‌حالات‌درنانولوله‌های‌کربنی‌به‌دفعات-زیاددرنظریه پراکندگی الکترون-فونون مورد استفاده قرارمی‌گیرد بنابراین به دست آوردن این کمیت بسیار ضروری است. ازآنجایی که ساختارنواری نانولوله‌های کربنی‌یک‌ساختارتکبعدی است و درنقاط زیادی دارای کمینه و بیشینه است بنابراین انتظار تکینگی-های وان هوف در آنرا باید داشت. سطوح انرژی صفحه‌ی‌گرافیت درنقاط kدراولین منطقه بریلوئن دارای تبهگنی است. بنابراین-اگربردار موج نانولوله‌های‌کربنی ازاین نقاط عبورکند نانولوله‌های حاصله ازخود خواص رسانایی نشان می‌دهد درغیر اینصورت نانولوله‌ها خواص نیم رسانا ازخود نشان می‌دهند [5]. نانولوله های‌کربنی به دلیل خواص‌الکتریکی جالبی‌که‌دارنددر قطعات-الکتریکی موارد استفاده زیادی می‌توانند داشته باشند.این مواد به دلیل رسانش یک بعدی در مقیاس نانو می‌توانند جایگزین مناسبی‌برای فلزات‌ویا نیمرساناها باشند.اخیرا محاسبات انجام شده روی قدرت بر هم کنش کولنی در شکل های متفاوت شبکه شانه عسلی نشان داده است که مدل هابارد را می توان به عنوان یک مدل منطقی برای توصیف تحول الکترونهای لایه ظرفیت این ترکیب لحاظ کرد[6] . بنابراین می توان به عنوان یک مسئله جالب توجه آثار جمله هابارد طیف بر انگیختگی فاز فلزی نانو لوله های کربنی و ظهور طبیعت گذار فاز مات را در شبکه گرافین لوله شده را بررسی کرد در این مطالعه براساس روش میدان متوسط کلاسیکی تاثیر جمله بر هم کنش کولنی و مغناطش زیر شبکه ی را روی طیف انرژی الکترونی نانو لوله زیگزاگ مطالعه می کنیم سپس ساختار چگالی حالات این ترکیب بدست می آید.نتیجه مهم این مطالعه افزایش گاف انرژی بر انگیختگی تک ذره دستگاه با افزایش قدرت بر هم کنش هابارد در نانو لوله زیگزاگ است.

۲- روشهای محاسبات:

مدل‌هابارد یک مدل مهم در فیزیک ماده چگال نظری وبه ویژه در نظریه سیستم‌های الکترونی همبسته قوی است.بخشی ازگذار فازهای رایج درفیزیک بس ذره‌ای ازقبیل گذار فاز مغناطیسی‌والکتریکی به وسیله‌ی این مدل توضیح داده می شود.دراین مدل علاوه برانرژی‌جنبشی الکترونها،برهمکنش روی جایگاهی‌الکترونها نیزلحاظ می‌شود.مدل هابارد به عنوان مدل مناسب جهت توجیه گذار فاز فلز – عایق در جامدات براساس دو جمله مهم معرفی می شود: ۱- جمله انرژی جنبشی الکترونها و برهم کنش آنها با یونهای شبکه ۲- جمله بر هم کنش کولنی کوتاه برد الکترون-الکترون.

در مدل ها بارد برای سادگی هسته را ساکن فرض می کنیم واز برهم کنش کولنی هسته- هسته صرف نظر می کنیم و بر هم کنش کولنی الکترون – الکترون را تنها برای زمانی که دوالکترون در یک سایت قرار دارند غیر صفردر نظر می گیریم زیرا بزرگترین برهم کنش کولنی بین دو الکترون زمانی اتفاق می افتد که هردو در یک سایت باشند این برهم کنش را با این نشان می دهیم که هر الکترون فقط اجازه دارد به همسایه اول پرش کند (برانگیخته شود) اندازه این برانگیختگی را با t نشان می دهند که دامنه گذار الکترون بین نزدیکترین یونهای شبکه را معرفی می کند .