

Research Paper

First Order Energy Near Dirac Points for Graphene and Carbon Nanotubes with Arbitrary Chirality¹

Abbas Zarifi²

Received: 2022.06.12

Revised: 2022.08.14

Accepted: 2022.10.04

Abstract

The effective Hamiltonian describing indirect exchange interactions of type Ruderman- Kittel-Kasuya-Yosida [RKKY] between the magnetic impurities near the Dirac Points is based on the first-order energy. Besides, the points where the impurities are located are important in identifying the oscillatory behaviour of these interactions. Then in this paper, we first intend to obtain the effective Hamiltonian elements near the Dirac points for 2D graphene structures using the tight-binding approximation and then the phase factors between neighbor Dirac points are noticed. The obtained results are extended to obtain the effective Hamiltonian and then the first-order energy for carbon nanotubes. Using the quantized wave vector in the circumferential direction of nanotubes at Dirac Points, we examine the condition for nanotubes to be metallic or semiconductors. The obtained results based on the tight binding could be used to study the magnetic interactions at low energy for graphene structures as well as carbon nanotubes.

Keywords: *First Order Energy, Carbon Nanotubes, Dirac Points.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.40690.1285

² Associate professor, Department of Physics, Yasouj University, Yasouj, Iran. Email: zarifi@yu.ac.ir



محاسبه انرژی مرتبه اول حول نقاط دیراکی

برای گرافن و نانولوله‌های کربنی با کایرالیته اختیاری^۱

عباس ظریفی^۲

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۳/۲۲

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۱/۰۵/۲۳

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۰۷/۱۲

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال سیزدهم، پیاپی ۴۲، بهار ۱۴۰۲

صص ۳۳ - ۴۵

چکیده:

همایلتونی موثر جهت شرح برهم‌کنش‌های تبادلی غیرمستقیم از نوع رودرمن، کیتل، کاسویا و یوشیدا میان ناخالصی‌های مغناطیسی از نوع انرژی مرتبه اول حول نقاط دیراکی می‌باشد. افزون بر این، قرار گرفتن ناخالصی‌ها در نقاط مختلف دیراک نیز در تعیین رفتار نوسانی این نوع برهم‌کنش‌ها نیز اهمیت دارد. از این رو در این مقاله ابتدا عناصر همایلتونی موثر حول نقاط دیراکی برای ساختار دو بعدی گرافن را به روش بستگی قوی بدست آورده و اختلاف فاز موجود در عناصر ماتریسی در هر راس شش‌گوشی نسبت به نقاط همسایه بیان می‌شود. سپس روابط بالا را تعمیم داده تا همایلتونی موثر و در نتیجه انرژی مرتبه اول اطراف نقاط دیراک برای نانولوله‌های کربنی بدست آید. به کمک مولفه بردار موج کوانتیده در راستای محیط نانولوله در نقاط مختلف دیراک بر روی راس‌های شش‌گوشی شرط تشکیل نانولوله‌های رسانا برحسب ترازهای انرژی نیز بررسی می‌شود. محاسبات انجام شده بر پایه روش بستگی قوی می‌تواند مبنایی برای مطالعه برهم‌کنش‌ها در انرژی‌های پایین برای ساختار گرافن و به ویژه انواع نانولوله‌ها مورد استفاده قرار گیرند.

واژگان کلیدی: انرژی مرتبه اول، نانولوله‌های کربنی، نقاط دیراک.

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2023.40690.1285

^۲ دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران. Email: zarifi@yu.ac.ir



۱. مقدمه

با لایه لایه کردن مواد چند بعدی چندین لایه‌ای، که دارای برهم کنش قوی درون لایه‌ای مقید و برهم کنش بین لایه‌ای ضعیف می‌باشند، می‌توان مواد دو بعدی تک‌لایه‌ای به شکل لایه‌های نازک را تولید کرد. از مهمترین این مواد دو بعدی می‌توان گرافن، نیتريد بور و مولیبدین دی‌سولفید (MoS_2) را نام برد. اغلب ویژگی‌های فیزیکی مواد دو بعدی تک‌لایه‌ای، متفاوت با ویژگی‌های فیزیکی آن‌ها در حالت کپه‌ای است. به عنوان مثال، برای یک لایه (MoS_2) که دارای ساختار شش‌گوشی شبیه گرافن می‌باشد، انتقال از شکاف انرژی غیرمستقیم به مقدار 1.3eV در حالت کپه‌ای به شکاف انرژی مستقیم به مقدار 1.8eV در ساختار تک‌لایه‌ای رخ می‌دهد و این شکاف مستقیم منشاء کاربردهای مختلف اپتوالکترونیک می‌باشد [۴-۱]. افزون بر این، ویژگی‌های فیزیکی این مواد، اغلب ناشی از انرژی‌های پایین در لبه‌های نقاط دیراک این گونه ساختارها می‌باشد. به عنوان مثال، در بیان رسانندگی این مواد و همچنین در بیان برهم‌کنش کولنی و فرومغناطیسی و برهم‌کنش تبدالی میان ناخالصی‌های مغناطیسی از نوع رودرمن، کیتل، کاسویا و یوشیدا ($RKKY$) هامیلتونی موثر در این گونه ساختار، مربوط به نقاط K و K' لبه‌های نقاط دیراک در ناحیه اول بریلوئن است [۱۰-۵].

گرافن به دلیل دارا بودن پاشندگی انرژی خطی، توجه زیادی را به خود جلب کرده است. چرا که برانگیختگی‌ها در گرافن از نوع فرمیون‌های دیراک بدون جرم هستند، که این امر منجر به رفتار فیزیکی متفاوت با رفتاری است که سیستم‌های دو بعدی استاندارد از خود نشان می‌دهند. در شرح برهم‌کنش غیرمستقیم ($RKKY$) در اطراف نقاط دیراک اغلب شکل خطی از پاشندگی انرژی گرافن مورد نظر می‌باشد. از سوی دیگر اختلاف فاز مربوط به قرار گرفتن ناخالصی‌ها در نقاط مختلف دیراک، چون نقاط K و K' در شرح برهم‌کنش تبدالی میان ناخالصی‌ها در مکان‌های مختلف از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است؛ به صورتی که این اختلاف فاز در تعیین رفتار نوسانی این نوع برهم‌کنش تبدالی نیز دارای اهمیت است [۱۲-۱۱].

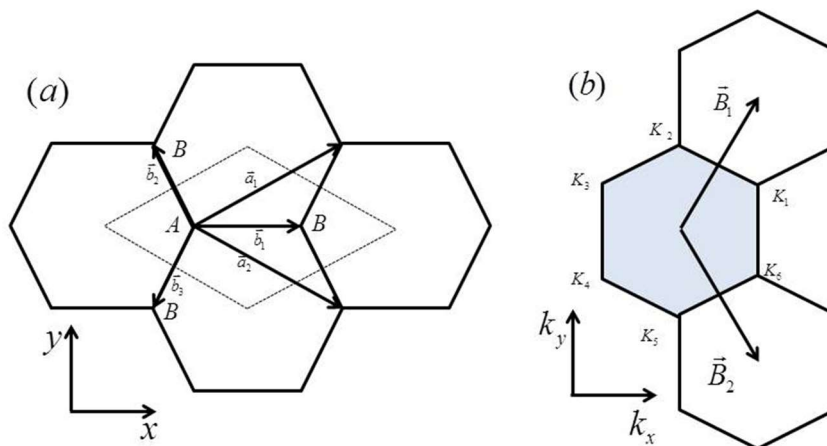
در این مقاله، ابتدا تلاش می‌شود هامیلتونی موثر در انرژی‌های پایین مربوط به ساختار گرافنی را بدست آورده و ویژه‌مقادیر انرژی و بردارهای ویژه مربوطه را به صورت تحلیلی در نقاط مختلف شش‌گوشی گرافن محاسبه کرد. سپس شکل هامیلتونی موثر برای ساختار دو بعدی نیتريد بور را نیز بیان نموده و مهمتر اینکه با توجه به ساختار نانولوله‌های کربنی هامیلتونی بالا را تعمیم داده تا شکل هامیلتونی موثر در نقاط دیراک و در نتیجه، ویژه‌مقادیر انرژی مرتبه اول حول نقاط دیراک برای انواع مختلف نانولوله‌های کربنی شامل زیگزاگ، آرمچیر و کایرال نیز بدست آید. با توجه به نتایج



بدست آمده، شرایط ایجاد نانولوله‌های کربنی فلزی و نیمه‌رسانا بر حسب بردار انتقال و بردار محیطی circumferential نیز بیان خواهد شد. با توجه با اطلاعات موجود، تاکنون محاسبات تئوری برای بدست آوردن انرژی مرتبه اول حول نقاط دیراک برای انواع نانولوله‌های کربنی بر پایه روش بستگی قوی گزارش نشده است. از این رو اطلاعات موجود در این مقاله می‌تواند برای محاسبه برهم‌کنش‌های مغناطیسی در این مواد، به ویژه برای نانولوله‌های کربنی در نقاط مختلف شش‌گوشی‌های ساختار نانولوله‌های کربنی، مورد استفاده قرار گیرد.

۲. چارچوب بستگی قوی

شکل ۱ (a) سلول واحد و (b) ناحیه اول بریلوئن گرافیت دو بعدی (گرافن) به صورت لوزی نقطه‌ای و شش‌گوشی سایه‌دار را نشان می‌دهد که در آن بردارهای \vec{a}_1 و \vec{a}_2 بردارهای سلول واحد در فضای حقیقی و بردارهای \vec{B}_1 و \vec{B}_2 بردارهای شبکه وارون می‌باشند.



شکل ۱ (a) سلول واحد و (b) ناحیه اول بریلوئن به صورت بیضی خط چین و شش‌گوشی سایه‌دار نشان داده شده است. بردارهای \vec{a}_1 و \vec{a}_2 بردارهای واحد در فضای حقیقی و بردارهای \vec{B}_1 و \vec{B}_2 بردارهای واحد در شبکه وارون نشان داده شده‌اند. بردارهای \vec{b}_i اتم A را به سه اتم همسایه نزدیک آن یعنی B وصل می‌کند. موقعیت نقاط شش‌گوشی نیز با مختصات K_i , $i = 1, 2, \dots, 6$ نشان داده شده‌اند.

مختصات این بردارها در صفحه xy برای شبکه مستقیم به صورت
 $\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right)a, \vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)a$
 است، به صورتی که ثابت شبکه گرافن برابر
 $a = |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = 2.46 \text{ \AA}$
 و مختصات بردارهای اصلی شبکه وارون به صورت
 $\vec{B}_1 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a}\right), \vec{B}_2 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a}\right)$
 شش نقطه $K_i, i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ نیز به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\begin{aligned} &K_1\left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a}\right), K_2\left(0, \frac{4\pi}{3a}\right), K_3\left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a}\right), \\ &K_4\left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{3a}\right), K_5\left(0, -\frac{4\pi}{3a}\right), K_6\left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{3a}\right) \end{aligned} \quad (1)$$

به صورتی که، روابط $K_3 = -K_6, K_4 = -K_1, K_5 = -K_2$ به دلیل وجود تقارن بین نقاط شش گوشه برقرار است. بر پایه محاسبات تابع چگالی و بستگی قوی، پاسخ نوری درون صفحه گرافن در گستره طیفی انرژی‌های پایین به کمک انتقال‌های $\pi \rightarrow \pi^*$ مدیریت می‌شود [۱۵-۱۳]. براساس شکل (۱)، سلول واحد گرافن شامل دو اتم کربن A و B می‌باشد. به کمک تقریب بستگی قوی و با در نظر گرفتن اولین همسایه‌های نزدیک برای هر اتم، عناصر ماتریس هامیلتونی با نادیده گرفتن هم‌پوشانی میان اتم‌های همسان A, A و یا B, B یعنی $H_{AA}(k) = H_{BB}(k) = 0$ به شکل زیر بیان می‌شوند [۲۰-۱۶]:

$$\begin{aligned} H_{BA}(k) &= H_{AB}^*(k), \\ H_{AB}(k) &= \gamma_0 \sum_{l=1}^3 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{b}_l^A}, \quad l = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (2)$$

که در آن، $\gamma_0 = \langle \varphi(\vec{r}) | \hat{H} | \varphi(\vec{r} + \vec{b}_l^A) \rangle = -3.033 \text{ eV}, l = 1, 2, 3$ به عنوان انتگرال انتقال بین دو اتم و b_l^A نزدیک‌ترین بردارهای اتم کربن از محل A به محل B است. در حالی که، $|\vec{b}_l^A| = a_{c-c} = a / \sqrt{3}$ به عنوان طول باند پیوند تعریف می‌شود. با حل معادله مشخصه هامیلتونی، انرژی کل مربوط به گرافن به شکل زیر بدست می‌آید [۱۶ و ۱۷]:



$$E(k) = \gamma_0 |f(k)|, \quad (3)$$

$$|f(k)| = \sqrt{3 + 2 \cos(k_y a) + 4 \cos(k_y a / 2) \cos(\sqrt{3} k_x a / 2)}$$

باید توجه داشت که اعمال هم‌پوشانی میان اتم‌های همسان تنها موجب انتقال ترازهای انرژی به اندازه یک مقدار ثابت خواهد شد و در چگونگی رفتار ترازهای انرژی اثری نخواهد داشت. در ادامه تلاش می‌شود هامیلتونی مربوط به گرافن را در انرژی‌های پایین اطراف نقاط K_i بدست آوریم. سپس با تعمیم روابط بالا انرژی‌های پایین را اطراف این نقاط در نانولوله‌های کربنی بدست خواهیم آورد.

۳. بسط عناصر ماتریسی اطراف نقاط K_i

با بسط رابطه (۲) بر حسب نزدیک‌ترین همسایه‌های اتم A می‌توان نوشت:

$$H_{AB}(k) = \gamma_0 \left(e^{-i\vec{k} \cdot \vec{b}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{b}_2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{b}_3} \right) \quad (4)$$

$$= \gamma_0 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{b}_1} \left(1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \right)$$

که در آن براساس شکل (۱)، از عبارات $\vec{b}_3 = \vec{b}_1 - \vec{a}_1$, $\vec{b}_2 = \vec{b}_1 - \vec{a}_2$ نیز استفاده شده است. حال برای بسط رابطه (۴) اطراف نقطه K_1 ، بردار موج به صورت $\vec{k} = \vec{q} + \vec{K}_1$, ($\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}_1$) تعریف می‌شود. همچنین، با توجه به روابط $\vec{K}_1 \cdot \vec{a}_1 = \frac{4\pi}{3}$, $\vec{K}_1 \cdot \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{3}$, $\vec{K}_1 \cdot \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3}$ نتایج را در معادله بالا قرار داده که رابطه زیر بدست می‌آید:

$$H_{AB}(k) = \gamma_0 e^{-i\vec{q} \cdot \vec{b}_1} \left(e^{-i\frac{2\pi}{3}} + e^{i\vec{q} \cdot \vec{a}_2} + e^{i\vec{q} \cdot \vec{a}_1} e^{i\frac{2\pi}{3}} \right) \quad (5)$$

با انجام عملیات جبری ساده و بسط مقادیر توابع نمایی و نگهداشتن عبارات خطی مرتبه اول عنصر ماتریسی بالا را می‌توان به شکل زیر ساده کرد.

$$H_{AB}(k) = qv_f e^{i\theta} e^{i\frac{5\pi}{6}} \quad (6)$$

که در آن $v_f = \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0$ است. همچنین با کمک همیوگ مختلط عبارت بالا، عنصر دیگر ماتریس

هامیلتونی به شکل $H_{BA}(k) = qv_f e^{-i\theta} e^{-i\frac{5\pi}{6}}$ داده می‌شود. با تعریف بردار موج \vec{q} به روش بالا اطراف هر کدام از نقاط دیراکی واقع بر شش گوشه گرافن و استفاده از تساوی‌های

می توان عناصر ماتریسی اطراف نقاط مختلف دیراک را بدست آورد.

به صورت مشابه، با تعریف بردار موج $\vec{k} = \vec{q} + \vec{K}_2$ و استفاده از رابطه (۱) در بدست آوردن عبارات $\vec{K}_2 \cdot \vec{a}_1 = \frac{2\pi}{3}, \vec{K}_2 \cdot \vec{a}_2 = -\frac{2\pi}{3}, \vec{K}_2 \cdot \vec{b}_1 = 0$ با رابطه $H_{AB}(k) = qv_f e^{-i\theta} e^{-i\frac{\pi}{2}}$ بدست می آید.

همچنین با استفاده از عبارات $\vec{K}_3 \cdot \vec{a}_1 = -\frac{2\pi}{3}, \vec{K}_3 \cdot \vec{a}_2 = -\frac{4\pi}{3}, \vec{K}_3 \cdot \vec{b}_1 = -\frac{2\pi}{3}$ عناصر ماتریسی حول نقطه K_3 با رابطه $H_{AB}(k) = qv_f e^{-i\theta} e^{i\frac{5\pi}{6}}$ بدست می آید.

همچنین، استفاده از عبارات $\vec{K}_4 \cdot \vec{a}_1 = -\frac{4\pi}{3}, \vec{K}_4 \cdot \vec{a}_2 = -\frac{2\pi}{3}, \vec{K}_4 \cdot \vec{b}_1 = -\frac{2\pi}{3}$ عناصر ماتریسی حول نقطه K_4 با رابطه $H_{AB}(k) = qv_f e^{i\theta} e^{i\frac{5\pi}{6}}$ بدست می آید.

همچنین، با استفاده از عبارات $\vec{K}_5 \cdot \vec{a}_1 = -\frac{2\pi}{3}, \vec{K}_5 \cdot \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{3}, \vec{K}_5 \cdot \vec{b}_1 = 0$ حول نقطه K_5 با رابطه $H_{AB}(k) = qv_f e^{-i\theta} e^{-i\frac{\pi}{2}}$ بدست می آید.

در نهایت، با تعریف بردار موج $\vec{k} = \vec{q} + \vec{K}_6$ و عبارات $\vec{K}_6 \cdot \vec{a}_1 = \frac{2\pi}{3}, \vec{K}_6 \cdot \vec{a}_2 = \frac{4\pi}{3}, \vec{K}_6 \cdot \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3}$

شش گوسی نیز با رابطه $H_{AB}(k) = qv_f e^{-i\theta} e^{i\frac{5\pi}{6}}$ داده می شود.

با توجه به تقارن موجود در شکل، رابطه

$$H_{AB}(K_1) = H_{AB}(K_4), H_{AB}(K_2) = H_{AB}(K_5), H_{AB}(K_3) = H_{AB}(K_6),$$

مولفه های عناصر ماتریس هامیلتونی برقرار است. با حل معادله مشخصه $\det[\hat{H} - E_q] = 0$

برای تمامی عبارات بالا ویژه مقدار انرژی گرافن اطراف نقاط دیراکی شش گوسی به صورت

$$E_q = \pm qv_f = \pm \frac{\sqrt{3}}{2} a\gamma_0 q$$

برای ورقه های دو بعدی نیتريد بور نیز عناصر ماتریسی هامیلتونی به صورت زیر تعریف می شوند:



$$\begin{aligned}
 H_{BB}(k) &= -H_{NN}(k) = c \\
 H_{BN}(k) &= H_{NB}^*(k), \\
 H_{BN}(k) &= \gamma_0 \sum_{l=1}^3 e^{-ik \cdot \bar{b}_l^A}, \quad l=1,2,3
 \end{aligned}
 \tag{۷}$$

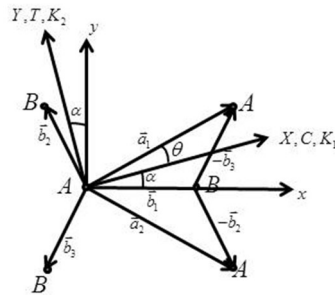
که در آن، ثابت $c \approx 2.75\text{eV}$ مربوط به الکترون‌خواهی اتم‌های بور و نیتريد می‌باشد. در نتیجه ویژه مقدار انرژی حول نقاط K_i , $i=1,2,\dots,6$ در شبکه شش گوشه برای ورقه‌های نیتريد بور به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$E_q = \pm \sqrt{c^2 + q^2 v_f^2} = \pm \sqrt{c^2 + \frac{3}{4} a^2 q^2 \gamma_0^2}
 \tag{۸}$$

به صورتی که، شکاف انرژی در ورقه‌های دو بعدی نانو ساختار نیتريد بور بدون توجه به شعاع و کایرالیتهی آن‌ها با مقدار تقریبی $E_g = 2c = E_{BB} - E_{NN} \approx 5.5\text{eV}$ داده می‌شود.

۴. محاسبه ویژه مقادیر انرژی مرتبه اول نانولوله‌های کربنی

شکل (۲) اتم A در مبدا مختصات و سه اتم همسایه B را در شبکه شش گوشه گرافن به همراه دستگاه مختصات دوار (Y, X) به ترتیب در راستاهای محیط پیرامونی و محور نانولوله نشان می‌دهد.



شکل ۲ مکان اتم A در مبدا مختصات و سه اتم همسایه B در سه راس شش گوشه. زاویه میان طول باندهای پیوند دو اتم با محور کایرال \vec{C} نیز با α نشان داده شده است. مولفه‌های X و Y دستگاه مختصات دوار به ترتیب در راستاهای محیط پیرامونی و محور نانولوله انتخاب می‌شوند. زاویه کایرالیتهی θ به عنوان زاویه میان بردار کایرال \vec{C} و بردار \vec{a}_1 تعریف می‌شود.

برای ساخت نانولوله، بردار انتقال \vec{T} در راستای محور نانولوله و بردار کایرال \vec{C} در راستای محیط نانولوله در نظر گرفته می‌شود. از این رو، محور Y موازی با محور انتقال و محور X در راستای محیط در نظر گرفته شد، به صورتی که، بردارهای موج \vec{K}_1 و \vec{K}_2 به ترتیب در راستای محیط و محور نانولوله تعریف می‌شوند. همچنین زاویه $\alpha = \pi/6 - \theta$ زاویه بین محور کایرالی با راستای

\hat{x} تعریف شده است. به صورتی که، زاویه کایرالی $\cos \theta = \frac{2n+m}{2\sqrt{n^2+m^2+nm}}$ زاویه میان

بردار \vec{C} و بردار \vec{a}_1 بوده و مقدار عددی آن در بازه $0 \leq |\theta| \leq 30^\circ$ تعریف می‌شود [۱۸]. با توجه به ویژه مقدار انرژی بدست آمده برای ورقه‌های گرافنی ویژه مقدار انرژی برای نانولوله‌های کربنی

با رابطه $E_q = \pm \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0 \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ داده می‌شود که در آن q_x و q_y به ترتیب مولفه‌های

بردار موج در راستاهای محیط پیرامونی و محور نانولوله تعریف می‌شوند، در حالی که:

$$\begin{aligned} q_x &= (\vec{k} - \vec{K}_i) \cdot \hat{X} = K_1^\mu - \vec{K}_i \cdot \hat{X}, \\ -\pi/T &\leq q_y \leq \pi/T \end{aligned} \quad (9)$$

که در آن \vec{K}_1^μ بردار موج کوانتیده در راستای محیط نانولوله بر اساس رابطه $\vec{C} \cdot \vec{K}_1^\mu = 2\pi$ تعریف می‌شود. برای انواع نانولوله‌ها با مشخصه‌های اختیاری (n, m) مولفه‌های بردار موج مجاز در \vec{K}_1^μ در راستای محیط پیرامونی به کمک رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$K_1^\mu L = 2\pi\mu, \quad \mu = 0, 1, \dots, N-1, \quad (10)$$

در روابط بالا، $L = |\vec{C}| = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}$ طول محیطی نانولوله و $T = |\vec{T}| = \frac{\sqrt{3}L}{d_R}$ طول

بردار انتقال و $N = \frac{2(n^2 + m^2 + nm)}{d_R}$ تعداد شش‌گوشی‌ها در سلول واحد نانولوله

تعریف می‌شوند. به صورتی که، d_R بزرگ‌ترین مقسوم علیه مشترک میان $(2n+m)$ و $(2m+n)$ است [۱۹ و ۱۶].



حال با توجه به ویژه مقدار انرژی بدست آمده $E_q = \pm \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0 \sqrt{q_X^2 + q_Y^2}$ بردار موج کوانتیده q_X را اطراف هر کدام از نقاط K_i در راس‌های شش گوشه برای نانولوله‌های کربنی با کایرالیتهی اختیاری بدست آورده خواهد شد. ابتدا با توجه به مقادیر عددی نقطه $K_1 \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right)$ در چارچوب مختصات x, y مولفه‌های آن در چارچوب دوار (Y, X) بدست می‌آیند. براساس معادله (۹)، مولفه q_X حول نقطه K_1 با رابطه $q_X = K_1^\mu - \vec{K}_1 \cdot \hat{X}$ داده می‌شود که در آن:

$$\vec{K}_1 \cdot \hat{X} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \cos \alpha + \frac{2\pi}{3a} \sin \alpha, \quad (11)$$

حال به کمک رابطه $\alpha = \pi/6 - \theta$ با محاسبات جبری ساده می‌توان مقادیر $\sin \alpha$ و $\cos \alpha$ را برای انواع نانولوله‌ها با مشخصه‌های اختیاری (n, m) بر حسب طول محیطی نانولوله بدست آورد. به صورتی که:

$$\begin{aligned} \cos \alpha &= \frac{\sqrt{3}a}{2L} (n+m), \\ \sin \alpha &= \frac{a}{2L} (n-m), \end{aligned} \quad (12)$$

با قرار دادن مقادیر بالا و همچنین رابطه $K_1^\mu L = 2\pi\mu$ در معادله (۹)، مقادیر مجاز بردار موج کوانتیده در نانولوله‌های کربنی اطراف نقطه K_1 به صورت زیر داده می‌شود:

$$q_X = \frac{2\pi}{3L} (3\mu - 2n - m), \quad \mu = 0, 1, \dots, N-1, \quad (13)$$

به روش مشابه، برای نقطه $K_2 \left(0, \frac{4\pi}{3a} \right)$ مولفه \hat{X} بردار موج نیز با رابطه

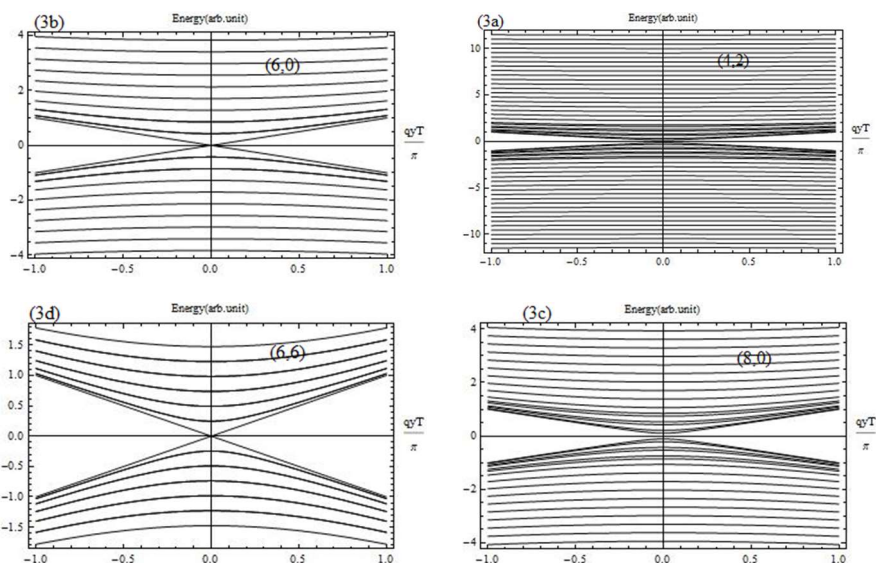
$$q_X = \frac{2\pi}{3L} (3\mu - n + m) \quad \text{و برای نقطه } K_3 \left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right) \text{ مولفه } \hat{X} \text{ بردار موج}$$

$$q_X = \frac{2\pi}{3L} (3\mu - n - 2m) \quad \text{برای نقطه } K_4 \left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{3a} \right) \text{ مولفه } \hat{X} \text{ بردار موج}$$

بردار موج \hat{X} مولفه $K_5 \left(0, -\frac{4\pi}{3a} \right)$ برای نقطه $q_x = \frac{2\pi}{3L}(3\mu - 2n - m)$

بردار موج \hat{X} مولفه $K_6 \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{3a} \right)$ برای نقطه $q_x = \frac{2\pi}{3L}(3\mu - n + m)$

برای $q_x = \frac{2\pi}{3L}(3\mu - n - 2m)$ داده می‌شوند روابط بالا مقادیر مجاز بردار موج محیطی را برای انواع نانولوله‌های کربنی با کایرالیتهی اختیاری (n, m) ارائه می‌نماید. در روابط بالا برای نانولوله‌های نوع زیگزاگ مقدار $(m = 0)$ و برای نانولوله‌های نوع آرمچیر مقدار $(n = m)$ اعمال می‌شود.



شکل ۳ ترازهای انرژی مرتبه اول برای انواع نانولوله‌های کربنی حول یک نقطه دیراک اختیاری. نوارهای انرژی مربوط به دو نانولوله رسانای $(6, 0)$ و $(6, 6)$ همدیگر را در نقطه دیراک قطع کرده در حالیکه برای دو نانولوله نیم‌رسانای $(4, 2)$ و $(8, 0)$ گاف کوچکی در نقطه دیراک ایجاد شده است.

شکل (۳)، انرژی پاشندگی مرتبه اول بدست آمده برای برخی از انواع نانولوله‌های کربنی شامل (۳a) کایرال $(4, 2)$ ، (۳b) زیگزاگ رسانا $(6, 0)$ ، (۳c) زیگزاگ نیم‌رسانا $(8, 0)$ و (۳d) آرمچیر رسانا $(6, 6)$ را نشان می‌دهد.

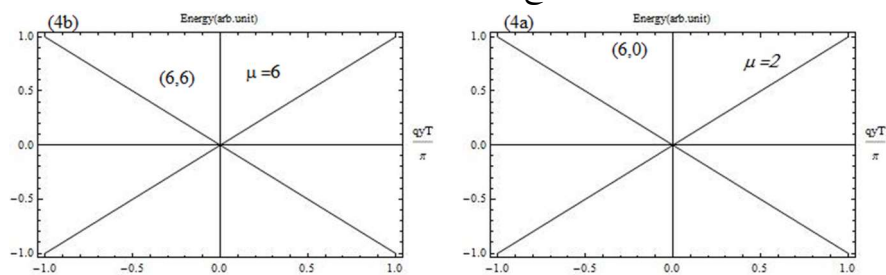
بر اساس شکل‌های (۳b) و (۳d)، برای دو نانولوله زیگزاگ $(6, 0)$ و آرمچیر $(6, 6)$ دو تراز از نوارهای ظرفیت و رسانش همدیگر را در نقطه $q_y = 0$ قطع کرده‌اند که نشان‌دهنده ویژگی



رسانایی این نانولوله‌ها است. در حالی که بر اساس شکل‌های (۳a) و (۳c)، برای دو نوع نانولوله کایرال (4,2) و زیگزاگ (8,0) شکاف کوچکی وجود دارد که نشان از نیمه‌رسانا بودن این نوع نانولوله‌ها دارد.

با توجه به عبارت مرتبه اول انرژی بدست آمده به روش تقریب بستگی قوی برای نانولوله‌های کربنی، در $q_y = 0$ برای تمام نقاط شش‌گوشی K_i , $i = 1, 2, \dots, 6$ فقط برای مقادیر صحیحی از μ که به ازای آنها $q_x = 0$ است، دو نوار ظرفیت و رسانش همدیگر را در نقطه فرمی قطع می‌کنند. به عنوان مثال، برای رابطه $q_x = \frac{2\pi}{3L}(3\mu - n - 2m)$ بسط انرژی حول نقطه K_6 ، نقطه فرمی برای دو نوار از نانولوله که همدیگر را در $q_y = 0$ قطع می‌کنند، با مقدار $\mu = \frac{n+2m}{3}$ داده می‌شود و برای سایر مقادیر μ نوارهای ظرفیت و رسانش با یک شکاف انرژی از هم فاصله دارند.

شکل (۴a و ۴b)، دو نوار مربوط به نانولوله رسانای زیگزاگ (6,0) و آرمچیر (6,6) را حول نقطه $K_6 \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{3a} \right)$ نشان می‌دهد، به صورتی که همدیگر را در نقاط فرمی قطع می‌کنند. با توجه به روابط بالا، دو نوار ظرفیت و رسانش به عنوان مثال، حول نقطه K_6 به ازای مقدار $\mu = \frac{n+2m}{3}$ همدیگر را قطع می‌کنند که این مقادیر برای دو نوع نانولوله کربنی زیگزاگ (6,0) و آرمچیر (6,6) به ترتیب $\mu = 2$ و $\mu = 6$ می‌باشند. از این رو، بستگی به نقاط K_i , $i = 1, \dots, 6$ در مکان‌های مختلف رأس‌های شش‌گوشی، مقادیری از μ که به ازای آنها دو نوار ظرفیت و رسانش همدیگر را قطع می‌کنند نیز متفاوت خواهد بود.



شکل ۴ مقدار μ برای نانولوله زیگزاگ (6,0) در نقطه K_6 ($\mu = 2$) و (b) برای نانولوله (6,6) در نقطه K_6 ($\mu = 6$) که به ازای آن‌ها دو نوار ظرفیت و رسانش همدیگر را قطع می‌کنند.

باید توجه داشت که برای تمامی نانولوله‌های رسانای آرمچیر با (n, n) دو نوار ظرفیت و رسانش برای نقاط K_1, K_3, K_4, K_6 همدیگر را در مقدار $\mu = n$ قطع نموده و این در حالی است که برای دو نقطه K_2 و K_5 دو نوار در مقدار $\mu = 0$ با هم برخورد می‌نمایند. همچنین برای نانولوله‌های رسانای از نوع زیگزاگ $(n, 0)$ برای نقاط K_1, K_2, K_5, K_6 دو نوار در مقدار $\mu = n/3$ و برای دو نقطه K_3, K_4 در مقدار $\mu = 2n/3$ همدیگر را قطع می‌کنند. برای سایر نانولوله‌های کربنی رسانا از نوع کایرال با توجه به مقادیر صفر q_X در نقاط مختلف شش گوشه نیز می‌توان مقادیر μ را که برای آن‌ها دو نوار ظرفیت و رسانش همدیگر را قطع می‌نمایند، پیدا کرد.

۵. نتیجه‌گیری

در این مقاله به کمک روش تقریب بستگی قوی، هامیلتونی موثر برای ورقه‌های گرافن و بنابراین نانولوله‌های کربنی در انرژی‌های پایین اطراف نقاط شش گانه دیراک بدست آمده است. سپس با توجه به انرژی مرتبه اول بدست آمده اطراف نقاط دیراک چگونگی ایجاد نانولوله‌های کربنی رسانا برای انواع مختلف نانولوله‌ها شامل کایرال، زیگزاگ و آرمچیر بیان شده است. محاسبات بدست آمده حاکی از آن است که با توجه به مکان نقاط دیراک درون ساختار گرافن و نانولوله‌های کربنی، فاز ایجاد شده در عناصر ماتریسی و همچنین شاخص‌هایی که برای آن‌ها دو تراز ظرفیت و رسانش همدیگر را قطع می‌کنند نیز متفاوت است. محاسبات بالا می‌توانند به عنوان منبعی برای مطالعه برهم‌کنش‌های مغناطیسی در انرژی‌های پایین برای این گونه ساختار مورد استفاده قرار گیرند.

منابع

- [1] Kuc A., Zibouche N., and Heine N., Influence of quantum confinement on the electronic structure of the transition metal sulfide TS_2 *Physical Review B* 83, 245213-245217, 2011.
- [2] Parhizgar F., Rostami H., and Asgari R., Indirect exchange interaction between magnetic adatoms in monolayer MoS_2 , *Physical Review B* 87, 125401-125408, 2013.
- [3] Parhizgar F., Asgari R., Abedinpour S. H., and Zareyan M., Anisotropic RKKY interaction in spin-polarized graphene, *Physical Review B* 87, 125402-125409, 2013.
- [4] Sherafati M. and Satpathy S., Analytical expression for the RKKY interaction in doped graphene, *Physical Review B* 84, 125416-125421, 2011.
- [5] Peres N. M. R., Guinea F., and Castro Neto A. H., Coulomb interactions and ferromagnetism in pure and doped graphene, *Physical Review B* 72, 174406-174416, 2005.
- [6] Annica M. Black-Schaffer, RKKY coupling in graphene, *Physical Review B* 81, 205416-205424, 2010.
- [7] Dugaev V. K., Litvinov V. I., and Barnas J., Exchange interaction of magnetic impurities in graphene, *Physical Review B* 74, 224438-224443, 2006.



- [8] Liu C. C., Jiang H., and Yao Y., Low-energy effective Hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin, *Physical Review B* 84, 195430-195441, 2011.
- [9] Uchoa B., Kotov V. N., Peres N. M. R., and Castro Neto A. H., Localized Magnetic States in Graphene, *Physical Review Letters*, 101, 026805-026809, 2008.
- [10] Min H., Hwang E. H., and Sarma S. D., Ferromagnetism in chiral multilayer two-dimensional semimetals, *Physical Review B* 95, 155414-155421, 2017.
- [11] Parhizgar F., Sherafati M., Asgari R., and Satpathy S., Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida interaction in biased bilayer graphene, *Physical Review B* 87, 165429-165440, 2013.
- [12] Sherafati M. and Satpathy S., RKKY interaction in graphene from the lattice Green's function, *Physical Review B* 83, 165425-165433, 2011.
- [13] Ahuja R., Auluck S., Wills J. M., Alouani M., Johansson B., and Eriksson O., Optical properties of graphite from first principles calculations, *Physical Review B* 55, 4999-5005, 1997.
- [14] Pedersen T. G., Analytic calculation of the optical properties of graphite, *Physical Review B* 67, 113106-113110, 2003.
- [15] Johnson L. G., and Dresselhaus G., Optical properties of graphite, *Phys. Rev. B* 7, 2275-2285, 1973.
- [16] R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, *Physical properties of carbon nanotubes*, Imperial College Press, 25-48, 2003.
- [17] Zarifi A. and Pedersen T. G., Analytic approach to the linear susceptibility of zigzag carbon nanotubes, *Physical Review B* 74, 155434-155441, 2006.
- [18] Zarifi A. and Pedersen T. G., Linear optical and quadratic electro-optic response of carbon nanotubes: Universal analytic expressions for arbitrary chirality, *J. Physics: Condense Matter* 20, 275211-275217, 2008.
- [19] Zarifi A. and Pedersen T. G., Universal analytic expression of electric-dipole matrix elements for carbon nanotubes, *Physical Review B* 80, 195422-195429, 2009.
- [20] Zarifi A. and Attar F. Analytical study of the susceptibility of carbon nanotubes by including the overlap between third nearest neighbors, *J. Res. Many Body Systems*, Vol. 5, No. 9, 19-23, 1394.



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).