

# Investigation of Heat Capacity and Magnetic Susceptibility of Carbon Nanodiscs and Nanowires in Tight-binding Approximation

Hamze Mousavi\*, Samira Jalilvand

Department of Physics, Faculty of Science, Razi University, Kermanshah, Iran

Received: 16.06.2020 Final revised: 29.06.2021 Accepted: 03.08.2021

Doi link: [10.22055/JRMBS.2021.16986](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.16986)

## Abstract

In this study, the density of states, heat capacity, and magnetic susceptibility of carbon nanodiscs and nanowires with different diameters are calculated via the tight-binding approximation and the Green's function approach. The results indicate that by increasing the diameter, the nanodiscs move from a semi-conductive state and tend toward a semi-metal state which is in agreement with other theoretical works. Also, increasing the diameter of the nanowires causes them to exhibit a metallic behavior. It is also observed that increasing the diameter of these nanostructures increases the number of the Van Hove singularities in the density of states diagrams. A Schottky anomaly peak is seen in the heat capacity curves of these two nanostructures, which for the nanodisc/nanowire with the largest diameter, has a lower height. Due to the presence of the Van Hove singularities in the density of states diagram, a crossover is seen in the magnetic susceptibility curves, which splits these diagrams into two high temperature and low temperature regions. It is also concluded that at low temperatures, increase in the diameter of the nanodiscs and nanowires increases the magnetic susceptibility. These maximum values are also observed in the heat capacity and magnetic susceptibility curves of other graphene and graphene-like nanostructures.

**Keywords:** Carbon nanodiscs, Carbon nanowires, Tight-binding approximation, Green's function approach, Heat capacity, Magnetic susceptibility

---

\* Corresponding Author: hamze.mosavi@gmail.com



## بررسی ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی نانودیسک‌ها و نانوسیم‌های

### کربنی در تقریب تنگ‌بست

حمزه موسوی\*، سمیرا جلیلووند

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران

دریافت: 1399/03/27 ویرایش نهائی: 1400/04/08 پذیرش: 1400/05/12

Doi link: [10.22055/JRMBS.2021.16986](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.16986)

#### چکیده

در این مقاله، چگالی حالت‌های الکترونی، ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی نانودیسک‌ها و نانوسیم‌های کربنی با قطرهای مختلف با استفاده از تقریب تنگ‌بست و رهیافت تابع گرین محاسبه می‌گردد. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش قطر، نانودیسک‌ها از حالت نیم‌رسانا به سمت شبه‌فلز میل می‌کنند که با دیگر نتایج نظری مطابقت دارد و نانوسیم‌ها نیز با افزایش قطر، رفتار فلزی از خود نشان می‌دهند. همچنین مشاهده می‌گردد که با افزایش قطر این نانوساختارها، تعداد تکینگی‌های وان-هوف در نمودار چگالی حالت‌ها نیز افزایش می‌یابد. در منحنی ظرفیت گرمایی این دو نانوساختار، قله بی‌هنجاری شاتکی مشاهده می‌شود، که این قله، برای نانودیسک و نانوسیم با بیشترین قطر، ارتفاع کمتری دارد. به دلیل وجود تکینگی‌های وان-هوف در منحنی چگالی حالت‌ها، یک مقدار بیشینه در منحنی‌های پذیرفتاری مغناطیسی مشاهده می‌گردد که منحنی‌ها را به دو بخش دماهای بالا و پایین تقسیم می‌کند. همچنین نتیجه می‌شود که در دماهای پایین، با افزایش قطر نانودیسک‌ها و نانوسیم‌ها، پذیرفتاری مغناطیسی نیز افزایش می‌یابد. این مقادیر بیشینه در منحنی ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی سایر نانوساختارهای گرافینی و شبه گرافینی نیز مشاهده شده است.

**کلیدواژگان:** نانودیسک کربنی، نانوسیم کربنی، تقریب تنگ‌بست، رهیافت تابع گرین، ظرفیت گرمایی، پذیرفتاری مغناطیسی

#### مقدمه

و  $sp^3$  مرتبط است. این دگرشکل‌ها بسته به نوع پیوند هیبریداسیون اتم کربن مرکزی با اتم‌های همسایه در شبکه، ایجاد می‌شوند، که ویژگی‌های کاملاً متفاوتی با یکدیگر دارند. نانومواد کربنی شامل سامانه‌های با ابعاد

در سال‌های اخیر، نانوساختارهای کربنی در مقایسه با دیگر نانوساختارهای مورد مطالعه و سنتز شده، بسیار مورد توجه دانشمندان قرار گرفته‌اند. این موضوع، در واقع به توانایی بالای اتم کربن در تشکیل دگرشکل‌های مختلف بر اساس هیبریداسیون‌های متفاوت  $sp^2$ ،  $sp$

\* نویسنده مسئول: hamze.mosavi@gmail.com



$p_x$  و  $p_y$  هیبرید می‌شوند و سه اوربیتال هیبریدی  $sp^2$  را ایجاد می‌نمایند که با هم زوایای 120 درجه می‌سازند و تشکیل سه پیوند  $\sigma$  می‌دهند. اوربیتال  $p_z$  بر صفحه  $sp^2$  عمود است و یک پیوند  $\pi$  ایجاد می‌کند. پس هر اتم کربن در صفحه گرافین سه پیوند  $\sigma$  و یک پیوند  $\pi$  عمود بر صفحه دارد [15].

نانودیسک‌های کربنی<sup>4</sup>، ساختارهای دوبعدی محدود، دارای قطر 1 تا 4 میکرومتر با شبکه لانه زنبوری هستند که در شکل‌های متنوعی وجود دارند. در سال 2006، نانودیسک‌های بنزنی<sup>5</sup>، مثلثی آرمچیر<sup>6</sup> و زیگ زاگ<sup>7</sup>، شش گوشه آرمچیر<sup>8</sup> و زیگ زاگ<sup>9</sup> به روش طیف‌سنجی جرمی<sup>10</sup> تولید شده‌اند [16]. این نانوساختارها به دلیل دارا بودن الکترون  $\pi$  خواص مشابهی با دیگر نانوساختارهای کربنی مانند فولرن، نانولوله‌ها و گرافین دارند [17-19]. خواص الکترونی انواع مختلفی از نانودیسک‌ها توسط ایزاوا مورد بررسی قرار گرفت. مشاهده شد که نانودیسک‌های مثلثی آرمچیر و شش گوشه زیگ زاگ، نیم‌رسانا هستند و با افزایش تعداد اتم‌های آنها گاف انرژی این ساختارها کوچک‌تر می‌شود و نانودیسک‌های مثلثی زیگ زاگ خاصیت فلزی دارند [20]. وی خواص مغناطیسی نانودیسک‌های فلزی را بررسی نمود و مشاهده کرد که این نانودیسک‌ها خاصیت فرومغناطیسی از خود ارائه می‌دهند که با تغییر اندازه نانودیسک‌ها قابل کنترل است [21]. همچنین خواص اپتیکی و الکترونی انواع مختلفی

پایین مانند فولرن<sup>1</sup> صفر بعدی [1]، نانولوله‌های کربنی<sup>2</sup> یک بعدی [2] و یا گرافین<sup>3</sup> دو بعدی [۳،۴] می‌شوند. اهمیت این نانوساختارها به اندازه‌ای است که جایزه نوبل فیزیک در سال 1996 به کشف فولرن‌ها و در سال 2010 به کشف گرافین اختصاص پیدا کرد. با توجه به ساختار، اندازه، چگالی کم و پایداری شیمیایی نانوساختارهای کربنی در کنار خواص الکترونیکی، گرمایی و مکانیکی عالی آن‌ها، این مواد به‌عنوان کاندیدای امیدوارکننده برای طیف گسترده‌ای از برنامه‌ها از جمله کاربرد در پزشکی، دستگاه‌های انتشار میدان، حسگرها، وسایل نیم‌رسانا، مواد کامپوزیت (پلیمری یا سرامیک)، نانو الکترونیک، ابررساناها و مواد ذخیره انرژی در نظر گرفته شده‌اند [5-13].

در سال 2010 با کشف گرافین توجه به نانوساختارهای کربنی افزایش یافت. گرافین ساختاری تک‌لایه از اتم‌های کربن است که این اتم‌ها در گرافین در یک شبکه دو بعدی لانه زنبوری به هم متصل شده‌اند. اگر گرافیت را به صورت یک دفترچه از صفحات موازی در نظر بگیریم به هر ورق آن گرافین گفته می‌شود. اتم‌ها در صفحه گرافین با پیوندهای قوی کووالانسی به هم متصل شده‌اند ولی صفحات با نیروی ضعیف واندروالس بر روی یکدیگر می‌لغزند [14]. گرافین دارای هیبریداسیون  $sp^2$  است؛ اتم کربن دارای چهار الکترون ظرفیت است، یک الکترون آن در اوربیتال  $s$  و سه الکترون در اوربیتال  $p$  قرار دارند، اوربیتال‌های  $s$

<sup>6</sup> Trigonal armchair nanodisk

<sup>7</sup> Trigonal zigzag nanodisk

<sup>8</sup> Hexagonal armchair nanodisk

<sup>9</sup> Hexagonal zigzag nanodisk

<sup>10</sup> Mass spectrometry

<sup>1</sup> Fullerene

<sup>2</sup> Carbon nanotubes

<sup>3</sup> Graphene

<sup>4</sup> Carbon nanodisc

<sup>5</sup> Benzene

از نانودیسک‌ها توسط اولوا و همکاران مطالعه شد. آنها مشاهده کردند که این خواص تا حد زیادی به تعداد اتم‌ها و هندسه این ساختارها وابسته است [22].

به‌طور کلی، نانوساختارهای یک بعدی، تحت عنوان نانوسیم<sup>1</sup>، نانومیل، نانولوله و ... شناخته می‌شوند. نانوسیم‌ها معمولاً دارای نسبت طول به قطر بیشتری نسبت به نانومیل‌ها هستند و انواع مختلفی دارند. نانوسیم‌های مولکولی از واحدهای مولکولی تکرارشونده آلی مثل دی‌ان‌ای<sup>2</sup> یا معدنی تشکیل شده‌اند [24,23]. واحدهای تکرارشونده نانوسیم‌های مورد مطالعه در این مقاله نانودیسک‌ها با قطرهای مختلف هستند که در فاصله مشخصی از هم قرار گرفته‌اند.

در سال‌های اخیر مطالعه این نانوساختارها به دلیل خواص الکتریکی، مکانیکی، شیمیایی و نوری آن‌ها و همچنین کاربردهای فراوانشان در صنایع الکترونیک و پزشکی، حسگرهای زیستی و شیمیایی و دیگر ابزارهای نانوالکترونیک افزایش یافته است [25-29].

همه این ویژگی‌های منحصر به فرد ناشی از خواص ساختاری و ریخت‌شناسی این مواد است. یکی از کاربردی‌ترین خواص نانودیسک‌ها و نانوسیم‌ها، ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی آنها است. چرا که این دو کمیت به‌طور مستقیم به چگالی حالت‌های الکترونی و ویژگی‌های ساختار الکترونی در ارتباط هستند و جزئیات طیف برانگیختگی را به‌خوبی منعکس می‌کنند، از این رو توصیف قابل قبولی از ویژگی‌های این نانوساختارها در اختیار ما قرار می‌دهند.

در این مقاله برای بررسی این مواد از تقریب تنگ‌بست<sup>3</sup> استفاده شده است. تقریب تنگ‌بست یکی از روش‌های مفید و کاربردی برای توصیف خواص ساختاری و الکترونی اجسام جامد است. در این تقریب فرض می‌شود که پتانسیل بلور به قدری قوی است که هر الکترون در حرکت خود درون بلور توسط پتانسیل یک یون به دام می‌افتد و تابع موج آن بستگی قوی به اتم خود دارد و از اتم‌های دیگر تأثیر نمی‌پذیرد [30-32].

خواص الکترونی نانوساختارهای گرافینی را می‌توان با بررسی الکترون‌های  $\pi$  در تقریب تنگ‌بست توضیح داد [14] اما برای مطالعه دقیق‌تر می‌توان سهم تمام الکترون‌های ظرفیت یعنی سهم تمام اوربیتال‌های اتمی را نیز بررسی نمود. همان‌طور که می‌دانیم جسم جامد یک سامانه بس‌ذره‌ای است یعنی از تعداد زیادی ذره تشکیل شده است، پس بررسی آن در کوانتش نخست، پیچیده و دشوار است. در نتیجه برای مطالعه یک جسم جامد از رهیافت کوانتش دوم استفاده می‌شود. در این رهیافت به جای کار کردن با چگالی احتمال حضور ذرات با عدد اشغال ذرات کار می‌کنیم یعنی چه تعداد ذره چه حالتی را اشغال کرده‌اند، خود عدد اشغال ذرات نیز بر اساس عملگرهای آفریننده و نابود کننده ذره تعریف می‌شود. به همین دلیل در کوانتش دوم توابع موج و عملگرها در کوانتش نخست برحسب عملگرهای آفریننده و نابود کننده ذره نوشته می‌شوند.

در این پژوهش با استفاده از تقریب تنگ‌بست و رهیافت تابع گرین<sup>4</sup>، چگالی حالت‌ها، ظرفیت گرمایی

<sup>3</sup> Tight-binding approximation

<sup>4</sup> Green's function approach

<sup>1</sup> Nanowire

<sup>2</sup> DNA

که در آن  $T$  عملگر ترتیب زمانی و  $\tau = \mathbf{i}t$  زمان موهومی هستند و  $\langle \dots \rangle$  نشان‌دهنده مقدار میانگین می‌باشد. با اثر دادن عملگر ترتیب زمانی داریم:

$$G(i, j; \tau) = -\langle \theta(\tau) c_i(\tau) c_j^\dagger(0) - \theta(-\tau) c_j^\dagger(0) c_i(\tau) \rangle. \quad 3$$

هدف این است که تابع گرین تأخیری برای الکترون‌های اوربیتال  $p_z$  یعنی همان الکترون‌های  $\pi$  در سامانه‌های نام برده شده، به دست آید. زیرا با داشتن تابع گرین تأخیری، می‌توان کمیت‌های فیزیکی مورد نظر را محاسبه نمود.

اولین گام محاسبه مشتق زمانی  $G(i, j; \tau)$  است که با توجه به رابطه<sup>3</sup> برابر است با:

$$\begin{aligned} \frac{dG(i, j; \tau)}{d\tau} &= -\frac{\partial \theta(\tau)}{\partial \tau} \langle c_i(\tau) c_j^\dagger(0) \rangle \\ &- \theta(\tau) \left\langle \frac{\partial c_i(\tau)}{\partial \tau} c_j^\dagger(0) \right\rangle + \frac{\partial \theta(-\tau)}{\partial \tau} \langle c_j^\dagger(0) c_i(\tau) \rangle \\ &+ \theta(-\tau) \left\langle c_j^\dagger(0) \frac{\partial c_i(\tau)}{\partial \tau} \right\rangle, \end{aligned} \quad 4$$

با توجه به اینکه  $d\theta(\pm\tau)/d\tau = \pm\delta(\tau)$  است، داریم:

$$\begin{aligned} \frac{dG(i, j; \tau)}{d\tau} &= -\delta(\tau) \delta_{ij} - \theta(\tau) \left\langle \frac{\partial c_i(\tau)}{\partial \tau} c_j^\dagger(0) \right\rangle \\ &+ \theta(-\tau) \left\langle c_j^\dagger(0) \frac{\partial c_i(\tau)}{\partial \tau} \right\rangle, \end{aligned} \quad 5$$

حال باید مشتق زمانی عملگر نابودکننده الکترون‌ها محاسبه شود، برای این منظور از رابطه هایزنبرگ استفاده می‌شود [35]:

$$\frac{d\hat{A}(\tau)}{d\tau} = [\hat{H}_\tau, \hat{A}(\tau)], \quad 6$$

و پذیرفتاری مغناطیسی نانودیسک‌ها و نانوسیم‌های کربنی با قطرهای مختلف محاسبه می‌گردد. ابتدا فرمول‌بندی تقریب تنگ‌بست و رهیافت تابع گرین با در نظر گرفتن الکترون‌های  $\pi$  ارائه می‌شوند. سپس با استفاده از هامیلتونی‌های تنگ‌بست به دست آمده برای ساختارهای مختلف و تابع گرین متناظر با آنها، چگالی حالت‌های نانوساختارها محاسبه می‌گردند. پس از آن با استفاده از چگالی حالت‌های محاسبه شده، کمیت‌های فیزیکی نام برده برحسب دما برای نانودیسک‌ها و نانوسیم‌ها با قطرهای مختلف به دست می‌آیند و نتایج آن با هم مقایسه می‌شوند و در نهایت بحث و نتیجه‌گیری بیان می‌گردد.

### تقریب تنگ‌بست و رهیافت تابع گرین

هامیلتونی تنگ‌بست به طور کلی در کوانتس دوم به صورت زیر نوشته می‌شود [31-34]:

$$H = \sum_{i,j} t_{ij} c_i^\dagger c_j, \quad 1$$

که در رابطه بالا عملگر  $c_i^\dagger$  ذره را در جایگاه  $i$  می‌آفریند و عملگر  $c_j$ ، ذره را در جایگاه  $j$  نابود می‌کند.  $t_{ij}$  احتمال جهش الکترون از جایگاه  $i$  به جایگاه  $j$  است. حال در ادامه با توجه به رابطه<sup>1</sup> و رهیافت تابع گرین، معادله حرکت الکترون‌های  $\pi$  محاسبه می‌شود [35, 36].

تابع گرین الکترون‌های ظرفیت همان تابع گرین ماتسوبارای<sup>1</sup> دو زمانی است که برابر است با [35]:

$$G(i, j; \tau) = -\langle T c_i(\tau) c_j^\dagger(0) \rangle, \quad 2$$

<sup>1</sup> Matsubara

$$\sum_l (i\omega_n \delta_{il} + t_{il}) G(l, j; i\omega_n) = \delta_{ij}, \quad 13$$

رابطه 13 معادله حرکت مربوط به الکترون‌های ظرفیت در تقریب تنگ‌بست برای یک جامد بلوری در فضای حقیقی و انرژی است. از آنجا که جسم جامد در فضای حقیقی نقاط بسیار زیادی دارد، در نتیجه برای سادگی، محاسبات، به جای فضای حقیقی در فضای وارون انجام می‌شود. روابط 14 تا 16 برای تبدیل فوریه از فضای حقیقی به وارون مورد نیاز است.

$$\delta_{il} = \frac{1}{N_c} \sum_k^{\text{FBZ}} e^{-ik \cdot R_{il}}, \quad 14$$

در رابطه بالا  $N_c$  تعداد یاخته‌های یک شبکه براوه،  $\mathbf{k}$  بردار موج ذره در مرز ناحیه اول بریلوئن و  $\mathbf{R}_{il} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_l$  که در آن  $\mathbf{R}_i$  موقعیت یاخته یک  $i$ ام شبکه براوه را نشان می‌دهد.

$$t_{il} = -\frac{1}{N_c} \sum_k^{\text{FBZ}} h_k e^{-ik \cdot R_{il}}, \quad 15$$

$h_k$  تبدیل فوریه  $t_{il}$  است و

$$G(l, j; i\omega_n) = \frac{1}{N_c} \sum_{k'}^{\text{FBZ}} G(\mathbf{k}'; i\omega_n) e^{-ik' \cdot R_{lj}}. \quad 16$$

با جای‌گذاری روابط 14 تا 16 در رابطه 13 و انجام محاسبات به رابطه زیر می‌رسیم:

$$\frac{1}{N_c} \sum_k^{\text{FBZ}} [(i\omega_n - h_k) G(\mathbf{k}; i\omega_n) - 1] = 0, \quad 17$$

شرط اینکه عبارت بالا به‌ازای تمام مقادیر  $\mathbf{k}$  برقرار باشد این است که داخل کروشه باید برابر صفر باشد.

$$(i\omega_n - h_k) G(\mathbf{k}; i\omega_n) - 1 = 0, \quad 18$$

پس در نتیجه داریم:

$$G(\mathbf{k}; i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - h_k}, \quad 19$$

که در این رابطه [...] نماد جابه‌جاگر دو عملگر است. به جای  $A(\tau)$  عملگر نابود کننده  $c_i(\tau)$  و به جای  $H_\tau$  هامیلتونی تنگ‌بست 1 را در زمان  $\tau$  جایگذاری می‌شوند:

$$\frac{dc_i(\tau)}{d\tau} = \left[ -\sum_{kl} t_{kl} c_k^\dagger(\tau) c_l(\tau), c_i(\tau) \right], \quad 7$$

با توجه به رابطه زیر که در آن {...} نماد پادجایجاگر دو عملگر است

$$[AB, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B \quad 8$$

رابطه 7 برابر می‌شود با:

$$\frac{dc_i(\tau)}{d\tau} = \sum_l t_{il} c_l(\tau), \quad 9$$

با جایگذاری رابطه 9 در 5 و با استفاده از رابطه 3 داریم:

$$\frac{dG(i, j; \tau)}{d\tau} = -\delta(\tau) \delta_{ij} + \sum_l t_{il} G(l, j; \tau), \quad 10$$

پس از مرتب کردن و ساده‌سازی، رابطه 10 برابر می‌شود با:

$$\sum_l (-\delta_{il} \frac{d}{d\tau} + t_{il}) G(l, j; \tau) = \delta(\tau) \delta_{ij}, \quad 11$$

رابطه 11 در واقع معادله حرکت الکترون‌های ظرفیت برای یک جامد بلوری در مدل تنگ‌بست است. در گام بعدی معادله 11 از فضای زمان به انرژی برده می‌شود، از آنجا که تابع گرین دارای تقارن زمانی است پس می‌توان از تبدیل فوریه استفاده نمود. رابطه تبدیل فوریه از فضای زمان به انرژی به صورت زیر است [35]:

$$G(l, j; \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G(l, j; i\omega_n), \quad 12$$

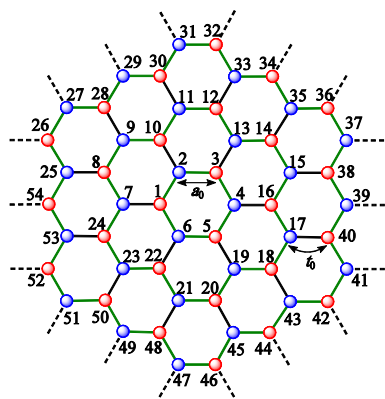
که در آن  $\beta = 1/(k_B T)$  و  $\omega_n$  بسامدهای ماتسوبارا هستند. رابطه 12 در 11 جای‌گذاری می‌شود و پس از ساده‌سازی به رابطه زیر می‌رسد.

## چگالی حالت‌های الکترونی، ظرفیت گرمایی،

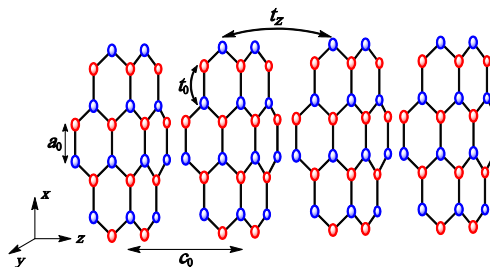
## پذیرفتاری مغناطیسی

هدف این مقاله محاسبه چگالی حالت‌های نانودیسک‌ها و نانوسیم‌ها با قطرهای مختلف است. برای این کار هامیلتونی نانودیسک‌ها در فضای حقیقی و هامیلتونی نانوسیم‌ها در فضای وارون نوشته می‌شود و با استفاده از رابطه 23 تابع گرین آن‌ها به دست می‌آید و سپس با استفاده از تابع گرین به دست آمده

الف



ب



شکل 1. الف: ساختار هندسی نانودیسک کربنی. خطوط سبز رنگ مرز نانودیسک‌ها را نشان می‌دهد. برای مثال نانودیسک 6، 24 و 54 اتمی در این شکل نشان داده شده است.  $a_0$  فاصله بین اتمی و  $t_0$  احتمال پرش الکترون بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها است. ب: نانوسیم 24 اتمی که طول آن در راستای محور  $z$  تا بی‌نهایت گسترش دارد.  $c_0$  طول یاخته یکه شبکه براوه،  $t_0$  احتمال پرش الکترون بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها در درون لایه و  $t_z$  احتمال پرش بین لایه‌ای است.

رابطه 19 تابع گرین الکترون با انرژی  $\omega_n$  و با بردار موج  $k$  در ناحیه اول بریلوئن است.

قطب‌های تابع گرین ترازهای انرژی دستگاه را نشان می‌دهند، طبق رابطه 19 قطب‌های تابع گرین، موهومی محض هستند، یعنی در تابع گرین زمان موهومی، ترازهای انرژی موهومی محض هستند.

$$i\omega_n - h_k = 0 \Rightarrow h_k = i\omega_n, \quad 20$$

از طریق امتداد تحلیلی، ترازهای موهومی محض به ترازهای انرژی شامل دو بخش حقیقی و موهومی تبدیل می‌شوند. در این صورت تمام قطب‌های تابع گرین به فاصله بسیار کوچک بالای نیم‌صفحه مختلط انرژی قرار می‌گیرند که همان ترازهای انرژی وابسته به الکترون‌ها هستند. در نتیجه داریم:

$$i\omega_n \rightarrow E = \varepsilon + i0^+ \quad 21$$

که  $0^+$  یک مقدار مثبت بی‌نهایت کوچک است. پس در نهایت با استفاده از روابط 19 و 21 شکل ماتریسی تابع گرین برابر می‌شود با:

$$G(k; E) = (EI - h_k)^{-1}, \quad 22$$

با تبدیل فوریه  $h_k$  به رابطه زیر برای تابع گرین می‌رسیم:

$$G(E) = (EI - H)^{-1}, \quad 23$$

رابطه 23 کلی‌ترین شکل تابع گرین است، تابع گرین در هر فضایی که مورد نیاز باشد، باید هامیلتونی را هم در همان فضا به دست آورد. در نتیجه برای داشتن شکل ماتریسی تابع گرین باید شکل ماتریسی هامیلتونی هم در همان فضا محاسبه شود.

$$D(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Tr Im} G(E), \quad 25$$

با استفاده از رابطه 25 چگالی حالت‌ها برای نانودیسک‌ها برابر است با:

$$D(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi N_a} \sum_{\alpha=1}^{N_a} \text{Im} g^{\alpha\alpha}(E), \quad 26$$

که در آن  $N_a$  تعداد اتم‌های نانودیسک و  $g^{\alpha\alpha}(E)$  عناصر قطر اصلی ماتریس تابع گرین هستند، چگالی حالت‌ها برای نانوسیم‌ها نیز برابر می‌شود با:

27

$$D(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi N_c N_a} \sum_{\alpha=1}^{N_a} \sum_k^{\text{FBZ}} \text{Im} g_{ii}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}; E).$$

حال به بررسی ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی می‌پردازیم. مقدار گرمایی که به یک جسم داده می‌شود تا دمای آن را به اندازه یک درجه افزایش دهد، به عنوان ظرفیت گرمایی تعریف می‌شود. در واقع مقدار گرمای داده شده به یک جسم با تغییر دمای آن جسم متناسب است و با ضرب کردن ظرفیت گرمایی در طرف دوم این معادله، رابطه تناسبی به یک تساوی تبدیل می‌شود. ظرفیت گرمایی در حجم ثابت برابر است با:

$$C = \left( \frac{\partial u}{\partial T} \right)_V. \quad 28$$

اگر دمای یک سامانه از صفر تا  $T$  افزایش یابد، تغییر انرژی آن برابر است با:

$$\Delta u = u(T) - u(0), \quad 29$$

انرژی کل دستگاه بلوری برابر است با:

$$u(T) = \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) \varepsilon f(\varepsilon, T), \quad 30$$

چگالی حالت‌ها محاسبه می‌گردد. در این مقاله 5 نانودیسک با قطرهای مختلف شامل 24 اتم (7 حلقه)، 54 اتم (19 حلقه)، 96 اتم (37 حلقه)، 216 اتم (91 حلقه) و 384 اتم (169 حلقه) و نانوسیم‌های متناظر با این نانودیسک‌ها را بررسی می‌شوند. شکل (الف) ساختار نانودیسک‌ها و (ب) ساختار نانوسیم 24 اتمی را نشان می‌دهد. هامیلتونی تنگ‌بست در کوانتس دوم برای ساختارهای مورد مطالعه در این مقاله برابر است با [31-34]:

24

$$H = \sum_{\alpha=1}^{N_a} \sum_{i=1}^{N_c} \varepsilon_i^\alpha c_i^{\alpha\dagger} c_i^\alpha + \sum_{\alpha,\beta=1}^{N_a} \sum_{i,j=1}^{N_c} t_{ij}^{\alpha\beta} c_i^{\alpha\dagger} c_j^\beta$$

در این رابطه  $\alpha$  و  $\beta$  به زیرجایگاه‌ها و  $i$  و  $j$  به موقعیت یاخته یک شبکه براوه اشاره دارد.  $N_a$  تعداد اتم‌های یاخته یک و  $\varepsilon_i^\alpha$  انرژی درون جایگاهی الکترون اتم  $\alpha$  در جایگاه  $i$  است. با استفاده از تقریب تنگ‌بست، ماتریس هامیلتونی مربوط به نانوساختارهای گفته شده در بالا را محاسبه می‌نماییم. بعد ماتریس هامیلتونی برای نانودیسک‌ها برابر با تعداد اتم هر نانودیسک و برای نانوسیم‌ها برابر با تعداد اتم‌های درون یاخته یک شبکه براوه است. برای مثال ماتریس‌های هامیلتونی نانودیسک و نانوسیم 24 اتمی، ماتریس‌هایی 24 بعدی می‌شوند. محاسبات هامیلتونی مربوط به آن‌ها در پیوست آورده شده است. با به دست آمدن ماتریس هامیلتونی، تابع گرین نیز با استفاده از رابطه 23 حاصل می‌شود، سپس با داشتن تابع گرین می‌توان چگالی حالت‌های الکترونی را توسط رابطه زیر به دست آورد [35]:



از روابط 31 و 34 می توان ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی مربوط به آنها را محاسبه نمود.

### بحث و نتایج

در این پژوهش، چگالی حالت های الکترونی برای نانودیسک های مختلف شامل 24 تم (7 حلقه)، 54 تم (19 حلقه)، 96 تم (37 حلقه)، 216 تم (91 حلقه) و 384 تم (169 حلقه) و همچنین نانوسیم های متناظر با این نانودیسک ها محاسبه شده است و نمودار آنها برحسب انرژی به ترتیب در شکل های 2 و 3 نشان داده شده است. در این مقاله تمام ثابت های فیزیکی برابر یک در نظر گرفته شده است و در تمامی شکل ها برای اینکه محور افقی بدون بعد شود، بر  $t_0$  تقسیم شده است.

همان طور که در شکل 2 مشاهده می شود نانودیسک 24 اتمی که کمترین قطر را دارد، نیم رسانا است و با افزایش تعداد اتم ها و در نتیجه افزایش قطر نانودیسک ها، چگالی حالت ها در نزدیکی سطح فرمی تغییر می کند و گاف انرژی نانودیسک ها کم شده و سامانه ها از حالت نیم رسانا به سمت شبه فلز شدن پیش می روند. با توجه به شکل 2 دیده می شود، نانودیسک 24 اتمی که کمترین قطر را دارد، یک نیم رسانا با گافی بزرگ تر از سایر نانودیسک ها است و نانودیسک 384 اتمی که بیشترین قطر را دارد یک شبه فلز است. که در توافق خوبی با کارهای انجام شده قبلی است که در قسمت مقدمه به آنها اشاره شد [20، 21]. با مشاهده شکل 13 درمی یابیم که نانوسیم های 24 و 54 اتمی نیم رسانا

که در آن  $d\varepsilon D(\varepsilon)$  تعداد الکترون ها در بازه  $\varepsilon$  تا  $\varepsilon + d\varepsilon$  است، انرژی یک الکترون و  $f(\varepsilon, T)$  تابع توزیع فرمی - دیراک می باشند. چون در دمای صفر تمامی ترازها تا تراز فرمی پر هستند پس احتمال وقوع ترازهای پر برابر یک است. پس  $u(0)$  برابر می شود با:

$$u(0) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon D(\varepsilon)\varepsilon, \quad 31$$

در نتیجه با توجه به روابط 28 تا 31 ظرفیت گرمایی به صورت زیر حاصل می گردد [37, 30]:

$$C(T) = \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon D(\varepsilon) \frac{\partial f(\varepsilon, T)}{\partial T} d\varepsilon. \quad 32$$

پذیرفتاری مغناطیسی معیاری از قابلیت مغناطیسی شدن ماده در یک میدان مغناطیسی است:

$$M = \chi B \quad 33$$

$M$  مغناطش،  $\chi$  پذیرفتاری مغناطیسی و  $B$  شدت میدان مغناطیسی است. هرگاه به سامانه ای میدان مغناطیسی اعمال شود پاسخ سامانه به این اعمال میدان، مغناطش است و ضریب تناسب بین این دو، همان پذیرفتاری مغناطیسی است. در اینجا می خواهیم پذیرفتاری مغناطیسی الکترون های اوربیتال  $p_z$  را حساب کنیم. سهم پارامگناطیس ناشی از الکترون های تقریباً آزاد در نوار ظرفیت را سهم پائولی<sup>1</sup> می گویند که برابر است با [38-40]:

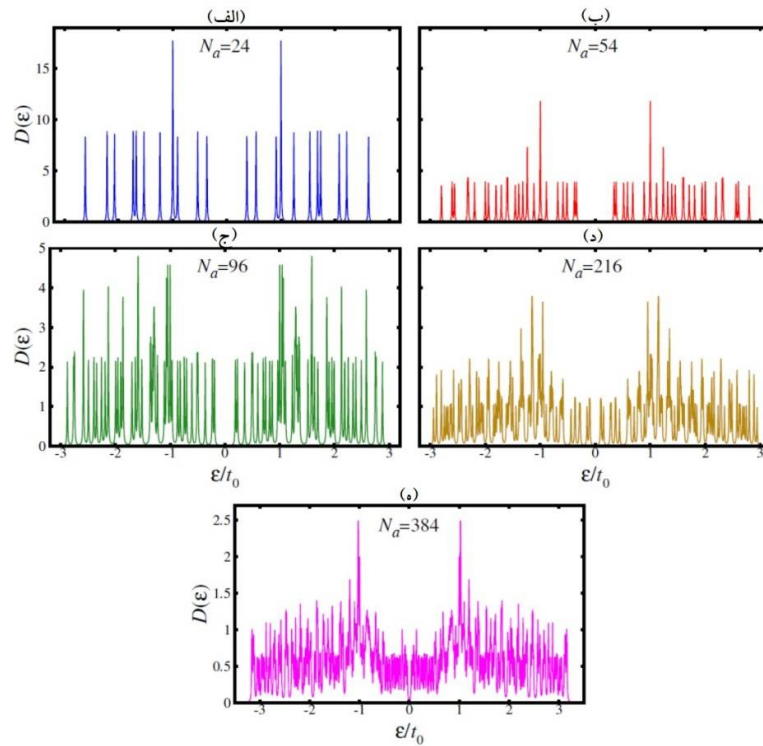
$$\chi(T) = \int_{-\infty}^{\infty} D(\varepsilon) \left( -\frac{\partial f(\varepsilon, T)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon. \quad 34$$

پس به طور کلی با داشتن چگالی حالت های مربوط به نانوساختارهای مورد بررسی در این مقاله و با استفاده

<sup>1</sup> Pauli

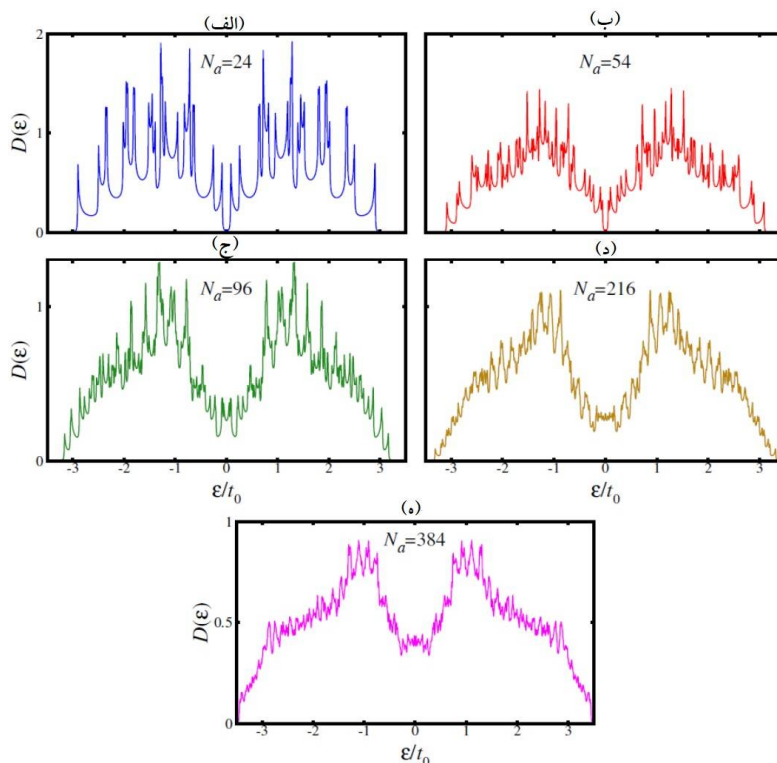
شکل 2 و 3 مشاهده می‌گردد که با افزایش تعداد اتم‌ها و در نتیجه افزایش قطر نانودیسک‌ها و نانوسیم‌ها تعداد تکنیگی‌های وان-هوف<sup>1</sup> نیز افزایش می‌یابد.

هستند و سایر نانوسیم‌ها خاصیت فلزی دارند. در اینجا نیز دیده می‌شود که نانوسیم 24 اتمی با کمترین قطر، خاصیت نیم‌رسانایی دارد و با افزایش قطر نانوسیم‌ها، سامانه‌ها رفتار فلزی از خود نشان می‌دهند. در هر دو



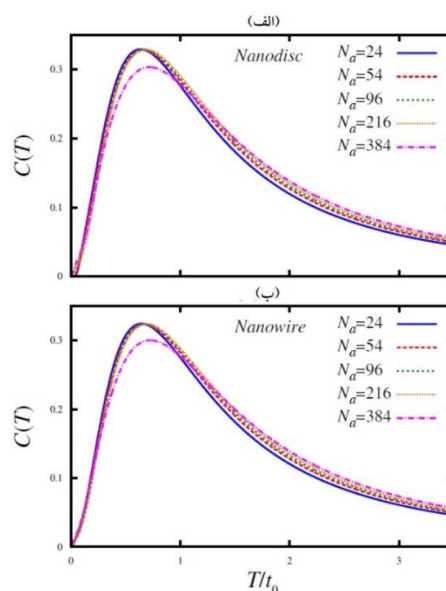
شکل 2. چگالی حالت‌های الکترونی نانودیسک‌های الف: 24، ب: 54، ج: 96، د: 216، ه: 384 اتمی

<sup>1</sup> Van Hove singularity



شکل 3. چگالی حالت‌های الکترونی نانوسیم‌های الف: 24، ب: 54، ج: 96، د: 216، ه: 384 اتمی.

نتایج محاسبات ظرفیت گرمایی برحسب دما در شکل 4 نشان داده شده است. همان‌طور که می‌بینیم در تمامی منحنی‌ها یک قله وجود دارد که به قله بی‌هنجاری شاتکی<sup>1</sup> معروف است. این مقدار بیشینه در نمودار ظرفیت گرمایی سایر نانو ساختارهای کربنی مانند گرافین، گرافین دولایه و نانونوارهای گرافینی آرمچیر و همچنین ساختار شبه‌گرافینی مولیبدینوم دی‌سولفید نیز مشاهده شده است [40-43]. از آن جهت به این قله، بی‌هنجاری می‌گویند که انتظار می‌رود که ظرفیت گرمایی با افزایش دما افزایش یابد یا ثابت بماند ولی در اینجا این گونه نیست. این حالت غیرعادی



شکل 4. ظرفیت گرمایی نانودیسک‌ها و نانوسیم‌ها با قطر مختلف.

1. Schottky anomaly

پذیرفتاری مغناطیسی پائولی برای این نانوساختارها می‌پردازیم. نتایج محاسبات مربوط به پذیرفتاری مغناطیسی پائولی در شکل 5 نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل‌ها می‌بینیم، به دلیل وجود تکینگی‌های وان-هوف در نمودار چگالی حالت‌ها، در تمام منحنی‌های مربوط به پذیرفتاری یک قله وجود که منحنی را به دو بخش دماهای پایین و بالا تقسیم می‌کند. در دماهای پایین با افزایش دما پذیرفتاری نیز افزایش می‌یابد و در دماهای بالا، با بیشتر شدن دما پذیرفتاری کاهش می‌یابد. این رفتار در منحنی پذیرفتاری مغناطیسی دیگر ساختارهای گرافینی و شبه‌گرافینی، مانند گرافین، گرافین دولایه، نانونوارهای گرافینی آرمچیر و تک لایه مولیبیدوم دی سولفید نیز دیده شده است [40-43]. با مقایسه پذیرفتاری قطره‌های مختلف نانودیسک‌ها مشاهده می‌کنیم که در دماهای پایین، با افزایش قطر، پذیرفتاری نیز افزایش می‌یابد و دیده می‌شود که منحنی مربوط به نانودیسک 384 اتمی که شبه‌فلز است، در دمای پایین‌تری نسبت به باقی نانودیسک‌ها به بیشینه مقدار خود می‌رسد زیرا الکترون‌های این نانوساختار، درجه آزادی بیشتری نسبت به سایر نانودیسک‌ها دارند. در مقایسه پذیرفتاری نانوسیم‌ها نیز مشاهده می‌گردد که در اینجا نیز قبل از مقدار بیشینه، با افزایش قطر، پذیرفتاری افزایش می‌یابد و نانوسیم 384 اتمی سریع‌تر از سایر نانوسیم‌ها به بیشینه مقدارش می‌رسد.

را می‌توان با مفهوم آنتروپی توضیح داد. در دمای صفر پایین‌ترین سطوح انرژی اشغال شده‌اند و آنتروپی برابر صفر و احتمال گذار به سطوح بالاتر انرژی بسیار کم است، با افزایش دما آنتروپی افزایش می‌یابد و احتمال گذار به سطوح بالاتر نیز بیشتر می‌شود، زمانی که انرژی گرمایی به اندازه اختلاف انرژی بین دو سطح انرژی می‌رسد، این قله ظاهر می‌شود و ظرفیت گرمایی بیشترین مقدار را دارد، بعد از آن در دماهای بالا از آنجا که همه سطوح اشغال می‌شوند تغییر دما، تأثیرات کمی در آنتروپی دارد و ظرفیت گرمایی کم می‌شود. در مقایسه ظرفیت گرمایی نانودیسک‌ها مشاهده می‌شود که منحنی نانودیسک‌های نیم‌رسانا از دمای غیرصفر شروع می‌شود اما نانودیسک 384 اتمی که شبه‌فلز است از مبدأ آغاز می‌گردد، سپس با افزایش دما ظرفیت گرمایی سامانه‌ها افزایش می‌یابد و همگی تقریباً در دمای یکسانی به قله شاتکی می‌رسند اما ارتفاع این قله، برای نانودیسک 384 اتمی، به دلیل همان خاصیت شبه‌فلز بودن، ارتفاع کمتری نسبت به سایر نانودیسک‌ها دارد. این موضوع همچنین نشان می‌دهد که الکترون  $\pi$  این نانودیسک نسبت به سایر نانودیسک‌ها درجه آزادی بیشتری دارد. در مقایسه ظرفیت گرمایی نانوسیم‌ها نیز دیده می‌شود که ظرفیت گرمایی همه نانوسیم‌ها با افزایش دما، تا قله شاتکی، افزایش می‌یابد و همگی نانوسیم‌ها نیز در دمای تقریباً یکسانی به بیشینه مقدار خود می‌رسند و در اینجا نیز ارتفاع قله شاتکی برای نانوسیم 384 اتمی کمتر از سایر نانوسیم‌ها است. در هر دو ساختار، ظرفیت گرمایی بعد از قله شاتکی با افزایش دما، کاهش می‌یابد. حال به بررسی خاصیت

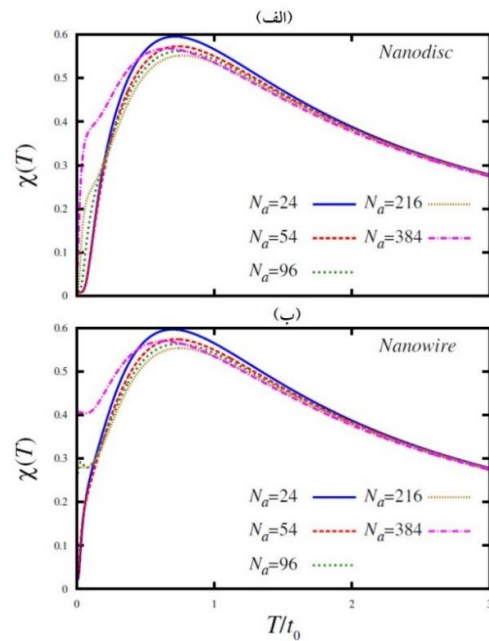
هوف افزایش می‌یابد. به دلیل وجود این تکینگی‌ها در منحنی چگالی حالت‌ها، یک مقدار بیشینه در منحنی‌های پذیرفتاری مغناطیسی و قله بی‌هنجاری شاتکی در منحنی ظرفیت گرمایی مشاهده می‌گردد. قله شاتکی برای نانودیسک و نانوسیم 384 اتمی در ارتفاع کمتری نسبت به سایر نانوساختارها اتفاق می‌افتد. همچنین در مورد پذیرفتاری مشاهده گردید با افزایش قطر نانوساختارها در دمای پایین، قبل از مقدار بیشینه، پذیرفتاری افزایش می‌یابد.

### پیوست

در این قسمت ماتریس هامیلتونی تنگ‌بست برای نانودیسک‌ها و نانوسیم‌ها محاسبه می‌گردد. هامیلتونی تنگ‌بست نانودیسک‌ها در فضای حقیقی محاسبه می‌شود و بعد ماتریس آن برابر با تعداد اتم‌های هر نانودیسک است. هامیلتونی مربوط به نانودیسک‌ها به‌طور کلی به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = \begin{pmatrix} t^{C_1 C_1} & t^{C_1 C_2} & \dots & t^{C_1 C_{N_a}} \\ t^{C_2 C_1} & t^{C_2 C_2} & \dots & t^{C_2 C_{N_a}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t^{C_{N_a} C_1} & t^{C_{N_a} C_2} & \dots & t^{C_{N_a} C_{N_a}} \end{pmatrix}, \quad 35$$

در رابطه بالا  $t^{\alpha\beta}$  احتمال جهش الکترون از اتم  $\alpha$  به نزدیک‌ترین همسایه‌اش، اتم  $\beta$  و  $t^{\alpha\alpha}$  انرژی درون جایگاهی الکترون اتم  $\alpha$  است که در اینجا برای اتم کربن است به‌عنوان مبدأ انرژی برابر صفر در نظر گرفته شده است. برای مثال با توجه به شکل 1 الف ماتریس هامیلتونی نانودیسک 24 اتمی برابر می‌شود با:



شکل 5. پذیرفتاری مغناطیسی نانودیسک‌ها و نانوسیم‌ها با قطر مختلف در تمامی منحنی‌ها، بعد از قله، با افزایش دما، پذیرفتاری نانوساختارها به یک مقدار یکسان میل می‌کند زیرا در دماهای بالا، اثرات دمایی غلبه می‌کند.

### نتیجه‌گیری

در این پژوهش با استفاده از رهیافت تابع گرین در تقریب تنگ‌بست، چگالی حالت‌های الکترونی، ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی نانودیسک‌ها و نانوسیم‌ها با قطرهای مختلف بررسی شد. پس از انجام محاسبات، مشاهده گردید که نانودیسک 24 اتمی، نیم‌رسانا است و با افزایش قطر نانودیسک‌ها، گاف انرژی آن‌ها کاهش می‌یابد و خاصیت شبه‌فلزی از خود نشان می‌دهند. نانوسیم‌ها نیز با افزایش قطر از حالت نیم‌رسانا به فلزی میل می‌کنند. در هر دو ساختار دیده می‌شود با افزایش تعداد اتم‌ها، تعداد تکینگی‌های وان -



$$h_k = \begin{pmatrix} f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t_0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & f_k & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & 0 & 0 \\ t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & f_k & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_0 & f_k & t_0 \\ 0 & t_0 & f_k & t_0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & f_k \end{pmatrix} \quad 39$$

در این رابطه  $f_k$  برابر است با:

$$f_k = 2t_z \cos(k_z c_0), \quad 40$$

که در آن  $t_z = t_0/7$  [44] همان‌طور که در شکل 1ب

نشان داده شده است، پارامتر احتمال پرش بین لایه‌ای

است.  $k_z$  بردار موج در ناحیه اول بریلونن است و

برابر است با:

$$-\frac{\pi}{c_0} \leq k_z \leq \frac{\pi}{c_0}, \quad 41$$

که در آن  $c_0$  طول یاخته یک شبکه براوه است.

همایلتونی دیگر نانودیسک‌ها و نانوسیم‌ها نیز به‌طور

مشابه محاسبه می‌گردد.

مرجع‌ها

[2] S. Iijima, Helical microtubules of graphitic carbon, *Nature* **354** (1991) 56-58. <https://doi.org/10.1038/354056a0>

[3] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science* **306** (2004) 666-669. <https://10.1126/science.1102896>

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

[5] J. Wu, W. Pisula, K. Müllen, Graphenes as potential material for electronics, *Chemical reviews* **107** (2007) 718-747. <https://doi.org/10.1021/cr068010r>

[1] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley, C60: Buckminsterfullerene, *Nature* **318** (1985) 162-163. <https://doi.org/10.1038/318162a0>

- nanotubes, *Macromolecules* **39** (2006) 5194-5205.  
<https://doi.org/10.1021/ma060733p>
- [13] H. Mousavi, S. Mohmmadi, S. Jalilvand, Electrical conductivity of armchair carbon and boron nitride nanotubes in tight-binding model, *Iranian Journal of Applied Physics* **9** (2019) 83-94.  
<https://doi.org/10.22051/JAP.2020.31076.1159>
- [14] A.C. Neto, F. Guinea, N.M. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, The electronic properties of graphene, *Reviews of modern physics* **81** (2009) 109-162.  
<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
- [15] M.D. Mosher, S. Ojha, Hybridization and structural properties: a physical organic chemistry experiment, *Journal of chemical education* **75** (1998) 888-890.  
<https://doi.org/10.1021/ed075p888>
- [16] H.J. Rader, A. Rouhanipour, A.M. Talarico, V. Palermo, P. Samori, K. Müllen, Processing of giant graphene molecules by soft-landing mass spectrometry, *Nature materials* **5** (2006) 276-280.  
<https://doi.org/10.1038/nmat1597>
- [17] P. Zygouri, T. Tsoufis, A. Kouloumpis, M. Patila, G. Potsi, A.A. Sevastos, Z. Sideratou, F. Katsaros, G. Charalambopoulou, H. Stamatis, P. Rudolf, Synthesis, characterization and assessment of hydrophilic oxidized carbon nanodiscs in bio-related applications. *RSC advances* **8** (2018) 122-131.  
<https://doi.org/10.1039/C7RA11045F>
- [18] S.N. Naess, A. Elgsaeter, G. Helgesen, K.D. Knudsen, Carbon nanocones: wall structure and morphology, *Science and Technology of advanced materials* **10** (2009) 065002.
- [6] P.K. Ang, S. Wang, Q. Bao, J.T. Thong, K.P. Loh, High-throughput synthesis of graphene by intercalation– exfoliation of graphite oxide and study of ionic screening in graphene transistor, *Acs Nano* **3** (2009) 3587-3594.  
<https://doi.org/10.1021/nn901111s>
- [7] A. Kumar, A.L.M. Reddy, A. Mukherjee, M. Dubey, X. Zhan, N. Singh, L. Ci, W.E. Billups, J. Nagurny, G. Mital, P.M. Ajayan, Direct synthesis of lithium-intercalated graphene for electrochemical energy storage application, *ACS nano* **5** (2011) 4345-4349.  
<https://doi.org/10.1021/nn201527p>
- [8] I.V. Pavlidis, M. Patila, U.T. Bornscheuer, D. Gournis, H. Stamatis, Graphene-based nanobiocatalytic systems: recent advances and future prospects, *Trends in biotechnology* **32** (2014) 312-320.  
<https://doi.org/10.1016/j.tibtech.2014.04.004>
- [9] T. Tsoufis, C. Tampaxis, I. Spanopoulos, T. Steriotis, F. Katsaros, G. Charalambopoulou, P.N. Trikalitis, High-quality graphene sheets decorated with ZIF-8 nanocrystals, *Microporous and Mesoporous Materials* **262** (2018) 68-76.  
<https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2017.11.010>
- [10] R. Andrews, D. Jacques, D. Qian, T. Rantell, Multiwall carbon nanotubes: synthesis and application, *Accounts of chemical research* **35** (2002) 1008-1017.  
<https://doi.org/10.1021/ar010151m>
- [11] A. Galano, Carbon nanotubes: promising agents against free radicals, *Nanoscale* **2** (2010) 373-380.  
<https://doi.org/10.1039/B9NR00364A>
- [12] M. Moniruzzaman, K.I. Winey, Polymer nanocomposites containing carbon



- nanospheres, *Nanoscale* **9** (2017) 15786-15795.  
<https://doi.org/10.1039/C7NR04679K>
- [26] A. Nieto-Márquez, R. Romero, A. Romero, J.L. Valverde, Carbon nanospheres: synthesis, physicochemical properties and applications, *Journal of Materials chemistry* **21** (2011) 1664-1672.  
<https://doi.org/10.1039/C0JM01350A>
- [27] E. Esmaili, M. Mardaani, H. Rabani, The electronic conductance of a nanowire including vibrating surface atoms, *Journal of Research on Many-body Systems* **6** (2015) 1-6.  
<https://dx.doi.org/10.22055/JRMBS.2016.12454>
- [28] A. Tarokh, M. Mardaani, H. Rabani, The study of electronic conductance of a three terminal nanowire, *Journal of Research on Many-body Systems* **6** (2015) 13-17.  
<https://dx.doi.org/10.22055/JRMBS.2016.12456>
- [29] S.M.A Aleomraninejad, M. Solaimani, Trial wave function approach to calculate the Ground state energy of nonlinear Schrodinger equation in many body physics, *Journal of Research on Many-body Systems* **8** (2018) 73-82.  
<https://dx.doi.org/10.22055/JRMBS.2018.13638>
- [30] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*, 8th edn, Wiley, New York, (2004).
- [31] E. Kaxiras, *Atomic and electronic structure of solids*, Cambridge University Press, United Kingdom, (2003).
- [32] G. Grosso, G.P. Parravicini, *Solid State Physics*, 2nd ed., Academic Press, USA, (2014).
- <https://doi.org/10.1088/1468-6996/10/6/065002>
- [19] J.G.S. Moo, M. Pumera, Electrochemical properties of carbon nanodiscs, *RSC advances* **2** (2012) 1565-1568.  
<https://doi.org/10.1039/C1RA00866H>
- [20] M. Ezawa, Graphene nanoribbon and graphene nanodisk, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **40** (2008) 1421-1423.  
<https://doi.org/10.1016/j.physe.2007.09.031>
- [21] M. Ezawa, Metallic graphene nanodisks: Electronic and magnetic properties, *Physical Review B* **76** (2007) 245415.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.245415>
- [22] P. Ulloa, M. Pacheco, L.E. Oliveira, A. Latge, Electronic and optical properties of carbon nanodisks and nanocones, arXiv preprint arXiv:1302.6568 (2013).  
<https://arxiv.org/abs/1302.6568v1>
- [23] M. Guo, I. Hernandez-Neuta, N. Madaboosi, M. Nilsson, W. Van Der Wijngaart, Efficient DNA-assisted synthesis of trans-membrane gold nanowires, *Microsystems and nanoengineering* **4** (2018) 1-8.  
<https://doi.org/10.1038/micronano.2017.84>
- [24] B. Teschome, S. Facsko, T. Schönherr, J. Kerbusch, A. Keller, A. Erbe, Temperature-dependent charge transport through individually contacted DNA origami-based Au nanowires, *Langmuir* **32** (2016) 10159-10165.  
<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.6b01961>
- [25] Y.W. Jiang, G. Gao, X. Zhang, H.R. Jia, F.G. Wu, Antimicrobial carbon

- armchair graphene nanoribbons in the two-band Harrison model, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **469** (2019) 405.  
<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.08.064>
- [41] H. Mousavi, S. Jalilvand, J.M. Kurdestany, Pauli magnetic susceptibility of bilayer graphene and hexagonal boron-nitride, *Physica B: Condensed Matter* **502** (2016) 132-139.  
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2016.08.049>
- [42] H. Mousavi, M. Bagheri, J. Khodadadi, Magnetic susceptibility and heat capacity of graphene in two-band Harrison model, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **74** (2015) 135-139.  
<https://doi.org/10.1016/j.physe.2015.06.032>
- [43] S. Jalilvand, H. Mousavi, Multi-band Tight-Binding Model of MoS<sub>2</sub> Monolayer, *Journal of Electronic Materials* (2020) 1-10.  
<https://doi.org/10.1007/s11664-020-08069-y>
- [44] C.L. Lu, C.P. Chang, Y.C. Huang, R.B. Chen, M.L. Lin, Influence of an electric field on the optical properties of few-layer graphene with AB stacking, *Physical Review B* **73** (2006) 144427.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.144427>
- [33] J.C. Slater, G.F. Koster, Simplified LCAO method for the periodic potential problem, *Physical Review* **94** (1954) 1498-1524.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.94.1498>
- [34] A.W. Harrison, *Structure and the properties of Solids*, Dover, New York, (1989).
- [35] H. Bruus, K. Flensberg, *Many-Body quantum theory in condensed matter physics: an introduction*, 2nd Ed., Oxford University Press, United Kingdom, (2004).
- [36] E.N. Economou, *Green's functions in quantum physics*, 3rd Ed., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, (2006).
- [37] H. Mousavi, J. Khodadadi, J.M. Kurdestany, M. Grabowski, Electronic thermal conductivity of armchair graphene nanoribbons and zigzag carbon nanotubes, *Physica. E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **85** (2017) 248-252.  
<https://doi.org/10.1016/j.physe.2016.09.006>
- [38] W. Nolting, A. Ramakanth, *Quantum theory of magnetism*, Springer, New York, 2009.
- [39] H. Mousavi, S. Jalilvand, Electrical and thermal conductivities of few-layer armchair graphene nanoribbons, *The European Physical Journal B* **92** (2019) 4.  
<https://doi.org/10.1140/epjb/e2018-90581-x>
- [40] H. Mousavi, S. Jalilvand, F. Mirzaei, Magnetic and thermal characteristics of