

ارزیابی بار و انرژی ذخیره شده در نانوخازنهای مولکولی

سید محمد اعظمی^{۱*}، مهدی خیرمند^۲

۱ و * - نویسنده مسئول: دانشیار، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه یاسوج، azami@yu.ac.ir

۲ - دانشیار، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه یاسوج، kheirmand@yu.ac.ir

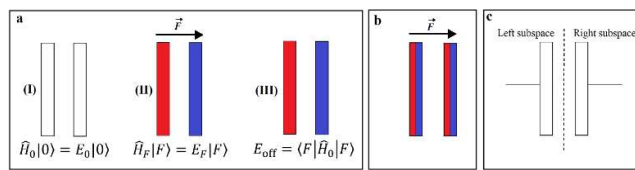
واژگان کلیدی: نانوخازن، پولک گرافن، میدان الکتریکی

۱- مقدمه

الکترونیک مولکولی علم مهندسی الکترونیک در مقیاس نانو یا اندازه مولکولی است [۱-۳]. از این نظر، مکانیسم و سرعت انتقال بار از طریق یک مولکول، نقش تعیین کننده‌ای در تجزیه و تحلیل پدیده هدایت مولکولی دارد که البته به موقعیت مکانی و جفت شدن بین اجزای مولکول بستگی دارد [۱]. به همین ترتیب، انواع مختلفی از دستگاه‌های الکترونیکی نانومقیاس از جمله خازن‌های مولکولی، ترانزیستورها، دیودها، سیم‌ها و غیره وجود دارد و تحقیقات زیادی برای بررسی خواص رسانایی این دستگاه‌ها در زمانی که در معرض پتانسیل خارجی قرار می‌گیرند یا به عنوان یک جزء الکترونیکی در مدار عمل می‌کنند، انجام شده است. [۲]. دو ویژگی اصلی خازن‌های (مولکولی) قابلیت ذخیره بار و انرژی است. بیشتر کارهای نظری روی خازن‌های معمولی متشکل از نانوصفحات دولایه به ظرفیت کوانتومی مربوط می‌شوند، برخلاف ظرفیت کلی که ظرفیت قابل مشاهده را اندازه‌گیری می‌کند [۳]. از این رو، در کار حاضر، مدلی ارائه شده است تا نشان دهد چگونه انرژی ذخیره شده و ظرفیت کلی یک خازن معمولی متشکل از تکه‌های گرافن را می‌توان محاسبه کرد، جایی که خلاء به عنوان فاصله دهنده دی الکتریک در نظر گرفته می‌شود.

۲- نظریه پردازی و روش

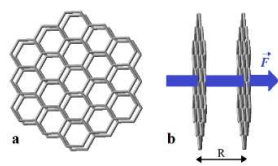
انرژی کل یک خازن به عنوان یک سیستم کوانتومی بسته یک کمیت کاملاً تعریف شده ولی تعریف انرژی ذخیره شده به فرضیات بیشتری نیاز دارد. در کار حاضر، فرآیند شارژ یک نانو خازن دولایه به عنوان یک مکانیسم سه مرحله‌ای در نظر گرفته می‌شود: (مرحله اول) نانو خازن دولایه در عدم حضور میدان الکتریکی، (مرحله دوم) میدان الکتریکی خطی در امتداد بردار عمود به صفحه الکترونها اعمال می‌شود. و (مرحله سوم) میدان الکتریکی حذف شده و حالت الکترونیکی به مرحله دوم منجمد می‌شود. شکل ۱ نمای شماتیک این سه مرحله و هامیلتونین‌ها، انرژی‌ها و توابع موج مربوطه را نشان می‌دهد. هامیلتونین‌های مراحل اول و سوم یکسان هستند و شامل عملگرهای متعارف انرژی جنبشی و پتانسیل برای یک نانو خازن منفرد است، در حالی که در مرحله دوم، برهمکنش میدان الکتریکی با الکترون اضافه می‌شود و در نتیجه بار به سمت خلاف جهت بردار میدان الکتریکی پمپ می‌شود، حالت‌های الکترونی مراحل اول و دوم، توابع ویژه هامیلتونین‌های مربوطه به شمار می‌روند ولی از آنجایی که حالت مرحله سوم ویژه‌تابعی برای هامیلتونین آن نیست، مرحله سوم در حالت تعادل به سر نمی‌برد و انرژی آن را می‌توان به عنوان مقدار چشمداشتی تابع موج مرحله دوم نسبت به هامیلتونین مرحله اول محاسبه نمود.



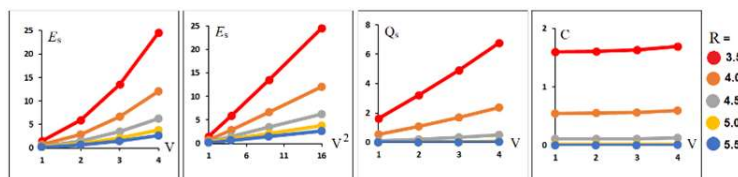
شکل ۱. (a) نمای سه مرحله شارژ یک نانوخازن دولایه، (b) قطبش الکترودها توسط میدان الکتریکی و (c) تقسیم فضای سه‌بعدی به زیر فضاهای چپ و راست.

۳- نتایج و بحث

شکل ۲، دو پولک گرافنی موازی به عنوان نانوخازن مولکولی را نمایش می‌دهد که در آن میدان الکتریکی در امتداد بردار نرمال به صفحات پولک‌ها اعمال شده است. محاسبات در سطح محاسباتی M062X/6-31G* و توسط نرم‌افزار Gaussian09 [۴] انجام شده‌اند.



شکل ۲. نمای بالا و جانبی پولک گرافنی که در آن جهت بردار میدان الکتریکی و فاصله بین دو پولک به عنوان الکترون نشان داده شده است.



شکل ۳. نمودار بار ذخیره شده (C/g)، انرژی ذخیره شده (J/g)، ظرفیت خازن (F/g) بر حسب ولتاژ اعمال شده (V).

همانطور که شکل ۳ نشان می‌دهد، فواصل بین‌فلکه‌های پایین‌تر دارای ظرفیت‌های بالاتر و انرژی‌های ذخیره‌شده‌ای هستند که مطابق با انتظارات کلی از ظرفیت خازنی نسبت معکوس با فاصله بین دو صفحه است. اگرچه ظرفیت‌های محاسبه شده در فواصل ۳/۵ آنگستروم بسیار کمتر از خازن‌های الکتروشیمیایی و ابرخازن‌ها است، اما آنها نزدیک به یک نانوخازن معمولی گرافنی هستند. به همین ترتیب، انرژی ذخیره شده در مقابل ولتاژ اعمالی خطی نیست، در حالی که این کمیت در مقابل مربع ولتاژ کاملاً خطی است که با رابطه کلاسیک آن سازگار است.

۴- نتیجه‌گیری

بار و انرژی ذخیره شده در نانوخازن مولکولی تشکیل شده از پولک‌های گرافنی می‌تواند توسط روش‌های مکانیک کوانتومی مورد ارزیابی قرار بگیرد و یک مکانیسم سه مرحله‌ای برای این منظور ارائه شده است. نتایج محاسبه شده تطابق خوبی با نتایج تجربی نشان می‌دهند که حاکی از درستی مدل مورد استفاده است.

منابع و مراجع

- [1] J.R. Heath, M.A. Ratner, Molecular Electronics, Phys. Today 56, 43 (2003).
- [2] T.A. Su, M. Neupane, M.L. Steigerwald, L. Venkataraman, C. Nuckolls, Chemical principles of single-molecule electronics, Na. Rev. Mater. 1, 16002 (2016).
- [3] S.V. Aradhya, L. Venkataraman, Single-molecule junctions beyond electronic transport, Nat. Nanotechnol. 8, 399 (2013).
- [4] Gaussian 09, Revision D.01, M. J. Frisch, et al, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.