دانشگاه کاشان

دانشکده فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته فیزیک حالت جامد

ساختار نواری و خواص ترابردی نانونوارهای گرافینی

استاد راهنما:

دکتر ابراهیم حیدری سمیرمی

به وسیله:

زهره جلالی

بهمن ماه ۱۳۹۰

بسم الله الرحمن الرحيم

شا و پاس رای‌را رمرن‌ا یدویاور . .زر ت‌و پاس‌ی ان وردگاریتارا ی‌مان یدو ق

عم‌وداش‌ر ودمان دو ی‌ر وان‌عم‌وداش مان ودو و ی‌ازعم‌و راروزمان

سا ت.

قدم گان‌روی‌ز ن، رروما م

پاس‌ظات ب‌باور ودن، زت‌و وردا ن، سارت وا ن، ت‌ریدن

پاس‌عا . مرشارو مای‌ا یدش‌و ودشان ان مرد ن‌روزگاران مرن ن‌ا ت.

و پاس‌ق ی رشان یادرس‌ا ت‌و مر دای‌و س ناشان جا ت ی ا ید

و ت ی‌ی شان وش ی‌ند.

و قدم وا م و ودش‌شادی ش‌وما آراش ن

و ا ام و ودشان‌ما دل ی ن‌ا ت.

و رردای

مدو پاس ،رای‌را و ق ب‌داش‌و ، را ما طا ودودوام نا ش‌را از از گا ش وا تارم.

ود ی ان تاده‌او، خام مران‌وخا راش.

ا جا ودلازم ی‌دام از ما ی‌اسا ید ر وارم و ه‌اسا یددوره‌کار نا ی‌ار ، ول‌سا یان ز ، ، ا ل

عم‌و و ضا ل‌اخلا ی‌یاری ودهار، قد و مام.

از ا متاد ا ی‌و ر وار" نداب‌آ ی‌د مرا ا م یدرری " مری" را ما ی‌ا جا ، را اجام ق، و مش‌و

گارش‌ان‌پایان ل ودهار، ها و پاس اری‌را دارم.

ن‌از آ یان "د مر بدا عی‌ر ضا ی"و"د مر یدا سان‌روز " وان‌اسا یدداوردا ل‌دا ه ان‌پایان

را ورد طا ، ارداد‌رو جا ،د ، مر ودهار ی‌مام.

پایدان‌از نداب‌آ ی"د مر بدا یدربا مری" توان‌ما ندره میلات‌تا یعی‌دا ه مول‌ز تت ودهار،

پاس اری ی‌مام.

چکیده

در این پایان نامه، خواص ترابرد کوانتومی نانونوارهای گرافینی با لبه‌های زیگزاگ و دسته مبلی، بر اساس ساختار نواری آن‌ها بررسی شده است. در این راستا، توجه خود را به اثرات بی‌نظمی لبه و حضور نقص‌های لبه شامل پراکنده‌سازهای منفرد و جای خالی روی لبه معطوف می‌کنیم و رسانندگی نانونوارها را در حضور این بی‌نظمی‌ها و نقص‌ها، مورد مطالعه قرار می‌دهیم. همچنین ترابرد وابسته به اسپین نانونوارهای زیگزاگ (zGNR) با لبه‌های مغناطیده به کمک فرمول‌بندی لاندائور در مدل بستگی قوی بررسی شده است. اثر نقص منفرد و پراکنده‌ساز ضعیف روی ترابرد اسپین مطالعه می‌شود. برای شدت‌های مختلف مغناطیدگی روی لبه‌ها، اثر فیلترشدگی در انرژی‌های خاصی مشاهده شده است. در مورد zGNR با یک لبه‌ی مغناطیده، قطبش در یک انرژی مشخص به ۱۰۰٪ می‌رسد، اما در مورد zGNR با دو لبه‌ی مغناطیده قطبش در یک بازه انرژی به ۱۰۰٪ می‌رسد. روند فیلترشدگی در مورد دو لبه در مقایسه با یک لبه بهبود می‌یابد. با افزایش شدت مغناطیدگی در یک لبه، انرژی که فیلترشدگی در آن روی می‌دهد، انتقال می‌یابد. در حالی که در مورد دو لبه با افزایش شدت مغناطیدگی، بازه انرژی که در آن فیلترشدگی رخ می‌دهد، افزایش می‌یابد. در حضور پراکنده‌ساز منفرد در لبه‌ی سیستم، قطبش با افزایش شدت پراکنده‌ساز افزایش می یابد.

کلمات کلیدی:

۱. ترابرد وابسته به اسپین ۲. نانونوارهای زیگزاگ گرافین ۳. پراکنده‌ساز ضعیف ٤. لبه‌های مغناطیده

فهرست مطالب

عنوان صفحه

پیشگفتار ۱

فصل اول: گرافین و خواص آن ۲

۱-۱. مقدمه ۳

۱-۲. پایداری در دو بعد ٦

۱-۳. دلیل توجه به گرافین ۷

۱-٤. ویژگی‌های اصلی الکترونی گرافین ۷

۱-٤-۱. ساختار شبکه ۷

۱-٤-۲. ساختار نواری ۹

۱-۵. الکترون‌های دیراک: حد انرژی کم ۱۱

۱-٦. جرم سیکلوترونی ۱٤

۱-۷. ساختار بلوری ۱۵

۱-۸. تونل زنی کلاین ۱۹

۱-۹. تونل زنی کلاین در صفحات گرافینی تک لایه ۲۱

۱-۱۰. الکترون‌های کایرال دیراک ۲٤

۱-۱۱. اثر کوانتومی غیرعادی هال در گرافین ۲٦

۱-۱۲. الکترودینامیک کوانتومی غیر عادی در گرافین دولایه ۳۰

فصل دوم: مفهوم رسانندگی در ابعاد مزوسکوپی ۳۳

۲-۱. مقدمه ۳٤

۲-۲. رژیم‌های ترابرد در سیستم‌های مزوسکوپی ۳٤

۲-۲-۱. مقیاس‌های طولی مزوسکوپی ۳۵

۲-۲-۲. رژیم ترابردی پخشی ۳۷

۲-۲-۳. رژیم جایگزیدگی قوی ۳۷

۲-۲-٤. مدل اندرسون برای بی نظمی ۳۸

۲-۳. فرمولبندی لاندائور ۳۹

۲-٤. تابع گرین ٤۲

۲-٤-۱. تابع گرین تک ذره ٤۲

۲-٤-۲. رابطه بین تابع گرین و ضریب عبور ٤۳

۲-٤-۳. روش تابع گرین شبکه ٤٤
۲-٤-٤. خودانرژی رابط‌های نیمه نامتناهی ٤٥
۲-٤-٥. روش تابع گرین بازگشتی ٤٧
۲-٤-٦. شبکه گرافین ٥٠
۲-٥. خواص الکترونی نانونوارهای گرافینی ٥٠
۲-٥-۲. خواص الکترونی نانونوارهای دسته مبلی (aGNRs) ٥٣
۲-٥-۳. خواص الکترونی نوارهای زیگزاگ (zGNRs) ٥٧

فصل سوم: اثرات بی نظمی لبه بر خواص ترابرد کوانتومی ٦١

۳-۱. مقدمه ٦١
۳-۲. ترابرد کوانتومی در نانونوارهای گرافینی ٦١
۳-۳. رسانندگی کوانتومی نانو نوارهای گرافینی با نقص لبه ٦٤
۳-٤. نقص‌های منفرد ٦٨
۳-٤-۱. جای خالی منفرد ٦٩
۳-٤-۲. پراکنده‌سازهای ضعیف منفرد ٧١
۳-٥. یک مدل یک بعدی ساده ٧٣
۳-٦. بی نظمی‌های ضعیف ٧٥
۳-۷.GNRs با لبه‌های مغناطیده ٧٧
۳-۸. با مغناطیدگی لبه در غیاب بی‌نظمی‌ها و نقص‌ها ٧٩
۳-۸-۲. افزایش طول مغناطیدگی ٨٤
۳-۹. نقص منفرد ٨٦
۳-۹-۲. جای خالی منفرد ٨٧
۳-۹-۳. پراکنده‌ساز ضعیف منفرد ٨٩
۳-۱۰. نتیجه‌گیری ٩٣
پیوست الف ٩٤
پیوست ب ٩٧
فهرست مراجع ١٠٠

فهرست شکل ها

عنوان صفحه

شکل ۱-۱. مادر تمام ساختارهای گرافیت،گرافین است. این ساختار دوبعدی می‌تواند به صورت فلورین صفر بعدی در هم پیچیده شود، نقش یک نانولوله دو بعدی را بازی کند و یا به گرافیت سه‌بعدی تبدیل شود..... ٤

شکل ۱-۲. چپ: شبکه لانه زنبوری.راست: شبکه وارون لانه زنبوری..... ۸

شکل ۱-۳. جرم سیکلوترونی حامل‌های بار در گرافین به عنوان تابعی از چگالی آن‌ها n. مثبت و منفی n به ترتیب به حفره‌ها و الکترون‌ها مربوط است. علامت‌ها داده‌های آزمایشگاهی هستند و منحنی، بهترین تطبیق با معادله (۱-۲۸) است. (m_0 جرم الکترون آزاد) ١٤

شکل ۱-٤. تصویری از اوربیتال‌های ظرفیت کربن. سه اوربیتال σ در صفحه گرافین و اوربیتال π عمود بر صفحه. ب- نوار σ پیوندی و غیرپیوندی با یک گاف انرژی به بزرگی ۱۲ eV جدا شده اند در حالی که حالت‌های π پیوندی و غیرپیوندی نزدیک تراز فرمی واقع شده است. ج- پیوندهای σ برای پیش‌بینی ویژگی‌های الکترونی حول فرمی صرف نظر می‌شود. ۱۵

شکل ۱-۵. پاشندگی الکترونی در شبکه لانه زنبوری.چپ: طیف انرژی (در واحد t) برای مقادیر متناهی t و t' ، با $t = ۲/۷\ eV$ و $t' = -۰/۲\,t$. راست : بزرگ نمایی نوارهای انرژی نزدیک به یکی از نقاط دیراک ١٦

شکل ۱-٦. تونل زنی کلاین..... ۲۰

شکل ۱-۷. الف- طرح کلی از طیف گرافین تک لایه حول نقطه دیراک که بر اثر پتانسیل اعمالی V_0 به سه ناحیه تقسیم می‌شود. شبه اسپین (σ) موازی(پادموازی) با جهت حرکت الکترون(حفره) است ب- تراز فرمی (نقطه چین) در نوار هدایت بیرون سد و نوار ظرفیت درون سد قرار گرفته است. ۲۱

شکل ۱-۸. تونل زنی کوانتومی کلاین برای گرافین تک لایه، احتمال عبور T از یک سد پتانسیل با عرض nm ۱۰۰ به عنوان تابعی از زاویه ورودی برای گرافین که چگالی الکترون‌های خارج از سد $۱۰^{۱۲}\ cm^{-2}$ ۰/۵ انتخاب شده است. با انرژی الکترون‌های فرودی $E \approx ۸۰\ meV$ ، $V_0 = ۲۰۰\ meV$ ، $\lambda \approx ۵۰\ nm$ ۲۳

شکل ۱-۹. الف- کوانتیده شدن ترازهای لاندائو بر حسب چگالی حالت‌های انرژی برای فرمیون‌های دیراک در گرافین تک لایه. سمت راست: در این حالت $E \propto \sqrt{N}$ است. سمت چپ: کوانتیده شدن ترازهای انرژی برای نیمرسانای معمولی. در این حالت $E_N \propto (N+1/2)$ ۲۸

شکل ۱-۱۰. رسانندگی عرضی و مقاومت ویژه طولی بر حسب چگالی حامل‌ها در اثر کوانتومی هال گرافین تک لایه. [۱] وجود نواحی تخت برای σ_{xy} در ضرایب نیمه صحیح $4e^2/h$ ۲۹

شکل ۱-۱۱. اثر کوانتومی هال غیرعادی برای فرمیون‌های دیراک جرم دار در گرافین دولایه ۳۱

شکل ۱-۱۲. گونه‌های متفاوت از کوانتش لاندائو در گرافین. الف- دنباله ترازهای لاندائو در چگالی حالت‌ها D با $E_N \propto \sqrt{N}$ برای فرمیون‌های دیراک بدون جرم در گرافین تک لایه بیان شده است و ب- برای فرمیون‌های دیراک جرم دار در گرافین دولایه با $E_N \propto \sqrt{N(N-1)}$. ج- با اعمال ولتاژ در گرافین دولایه انتظار ترازهای لاندائو استاندارد، $E_N \propto N + 1/2$ ، می‌رود ۳۲

شکل۲-۱. سیستم فرضی برای فرمولبندی لاندائور. دو مخزن از طریق رابطها به یک قطعه مزوسکوپیک با ضریب عبور T(E) متصل شده اند. ٤٠
شکل۲-۲. رابطهای نیمه نامتناهی را می‌توان به کمک خود انرژی آنها توصیف کرد. ٤٦
شکل۲-۳. دوبخش منزوی به کمک معادله دایسون به هم وصل می‌شوند..... ٤٨
شکل۲-٤. روش تابع گرین بازگشتی، قطعه را به ستون‌های منفرد تقسیم می‌کند. سپس تابع گرین ستون‌های منزوی را محاسبه کرده و توابع گرین را از چپ اضافه می‌کند تا انتشارگر بین اولین و آخرین ستون به دست آید..... ٤٩
شکل۲-۵. شبکه لانه زنبوری می‌تواند با صفر گذاشتن عناصر جهش مشخص در شبکه مربعی به‌دست‌آید... ٥٠
شکل۲-٦. شبکه لانه زنبوری گرافین. (a) برش صفحه گرافین در دو جهت که نامگذاری شده با (*b*) *zGNRs* و (*c*) *aGNRs*..... ٥١
شکل۲-۷. هندسه نوارهای گرافین. (a) نواز زیگزاگ (N=5)، نوار دسته مبلی (N=8). یک یاخته واحد دارای $2N$ اتم است..... ٥٢
شکل۲-۸. طول پیوند c-c برای لایه‌های متفاوت کربن برحسب فاصله آنها از لبه نانونوار دسته مبلی (a) N=8 و (*b*) N=14 ..... ٥٣
شکل۲-۹. ساختار نواری انرژی دو نانونوار دسته مبلی (N-aGNRs) و یک نانونوار زیگزاگ (N-zGNR) برای پهناهای متفاوت (N=16,17). ساختار نواری مدل بستگی قوی(بالا) با ساختار نواری محاسبات ابتدا به ساکن مقایسه شده است(پایین)..... ٥٥
شکل۲-۱۰. ساختار نواری انرژی برای سه نانوار دسته مبلی در سه پهنای متفاوت نشان می‌دهد که با افزایش پهنا (N)، گاف انرژی کاهش می‌یابد. ٥٦
شکل۲-۱۱. ساختار نواری انرژی برای دو نانونوار زیگزاگ (N-zGNRs) برای پهناهای متفاوت (N=8,32). ٥٨
شکل۲-۱۲. چگالی الکترونی قطبش اسپینی ساختار (a) فرومغناطیس، (b) پادفرومغناطیس 8-zGNRs. قرمز و سبز به ترتیب به اسپین بالا و پایین مربوط می‌شود..... ٥٩
شکل۳-۱. ساختار اتمی، ساختار نواری و رسانندگی کوانتومی(از محاسبات ابتدا به ساکن) نانونوارهای مختلف گرافین: (a) 16-aGNR (b), 17-aGNR, 8-zGNR با (c) سمت گیری اسپین پادموازی (↑↓) یا (d) موازی (↑↑) بین دو لبه مغناطیسی. ترابرد وابسته به اسپین تنها برای اسپین موازی (فرومغناطیس) قابل مشاهده است. سمت گیری اسپین با اسپین α- و اسپین β- (خط چین) نمادگذاری شده است ٦٢
شکل۳-۲. ساختار نواری انرژی و رسانندگی کوانتومی در مدل بستگی قوی برای 16,17-aGNR و 8-zGNR..... ٦٤
شکل۳-۳. هندسه نانونوار گرافینی، (a) : نوار زیگزاگ(N=4) (b) : نوار دسته مبلی(N=7) . یک یاخته واحد شامل دو زیرشبکه A و B است. پهنای یاخته با N و طول آن با M نمایش داده می‌شود..... ٦٥
شکل۳-٤. (۱) رسانندگی نوار زیگزاگ (N=8,W=17.3) ایده‌آل و نوار با جای خالی در لبه. (۲) LDOS برای اتم $1B$ نوار ایده آل و نوار دارای یک جای خالی در نزدیک‌ترین همسایه آن یعنی $1A$ ٦٩

شکل۳-۵. (a) رسانندگی نوار دسته مبلی(N=14,W=17.4 A°) بدون جای خالی در لبه، با یک جای خالی تک اتمی و با یک جای خالی دواتمی. (b) $LDOS$ برای اتم $2B$ وقتی که هیچ جای خالی وجود ندارد و وقتی نزدیک ترین جفت از اتم‌های همسایه آن $(1A,1B)$ برداشته شود.(c) $LDOS$ اتم $1B$ وقتی جای خالی وجود ندارد و وقتی نزدیکترین اتم همسایه آن $1A$ برداشته شود. ۷۰

شکل۳-٦.(a) رسانندگی نوار زیگزاگ $(N=8)$ برای شدت‌های متفاوت پتانسیل نقص وقتی نوار یک پراکنده‌ساز ضعیف در لبه اش دارد و (b) LDOS یک اتم لبه برای $V=0$ eV (بدون نقص) و $V=2.0$ eV در آن جایگاه. ۷۲

شکل۳-۷. (a) رسانندگی یک نوار دسته مبلی $N=14$ برای شدت‌های مختلف پتانسیل نقص وقتی نوار یک پراکنده‌ساز ضعیف در لبه‌اش دارد. (b) $LDOS$ یک اتم لبه برای $V=0$ eV (بدون نقص) و $V=2.0$ eV در آن جایگاه. ۷۲

شکل۳-۸ مدل یک بعدی از یک سیستم شامل نوارهای رسانش و حالت شبه جایگزیده (QLS). حجم سیستم با یک سیم کوانتومی (QW) نمایش داده شده است که یک نوار رسانش دارد. ۷۳

شکل۳-۹. نمودار رسانایی بر حسب انرژی برای نوار زیگزاگ (N=۸) با بی‌نظمی که روی هر دو لبه در طول‌های $۱۰۰\ A^{\circ}$ و $۱۰۰۰\ A^{\circ}$ توزیع شده است. حضور بی‌نظمی ضعیف باعث می‌شود نوار زیگزاگ از فلز تبدیل به نیمرسانا شود . ۷۵

شکل۳-۱۰. رسانایی بر حسب طول نوار برای دو نوار زیگزاگ (N=8,12) با شدت‌های متفاوت بی‌نظمی (V_{random}=0.25eV , 1.0 eV)رسم شده است. خط‌های راست، نمایی هستند و برای طول بزرگ‌تر از 50 Å با داده‌های نوار تطبیق می‌کنند. ۷٦

شکل۳-۱۱. رسانایی برحسب طول نوار برای نوارهای دسته‌مبلی(N=8,14) با شدت‌های بی‌نظمی متفاوت ۷۷

شکل۳-۱۲. مغناطیده کردن لبه‌های گرافین با روش مجاورت مغناطیسی ۷۹

شکل۳-۱۳. رسانندگی نانونوار دسته مبلی با پهنای N=14 برای نوار ایده آل و نوار مغناطیده در یک لبه با شدت مغناطیدگی برابر با یک(d=1). مغناطیدگی اثری روی رسانندگی آن ندارد. ۸۰

شکل۳-۱٤. رسانندگی برای نانونوار زیگزاگ (N=8). مقایسه حالت غیرمغناطیده و مغناطیده با شدت d=1 .. ۸۰

شکل۳-۱۵. رسانندگی برای شدت‌های مختلف مغناطیدگی (d=0.4,0.6,1). با افزایش d انرژی که در آن رسانندگی صفر است، زیاد می‌شود. ۸۱

شکل۳-۱٦. قطبش zGNR با یک لبه‌ی مغناطیده در شدت‌های مختلف مغناطیدگی. با افزایش d انرژی که در آن قطبش بیشینه است، افزایش می‌یابد. ۸۲

شکل۳-۱۷. رسانندگی برای zGNR با دو لبه‌ی مغناطیده در شدت مغناطیدگی برابر با یک. ۸۳

شکل۳-۱۸. قطبش zGNR با دو لبه‌ی مغناطیده. با افزایش d بازه‌ای که قطبش بهبود می‌یابد. ۸۳

شکل۳-۱۹. قطبشzGNR با شدت مغناطیدگی برابر با یک برای یک لبه و دو لبه مغناطیده ۸٤

شکل۳-۲۰. قطبشzGNR برای یک و دو لبه مغناطیده در طول‌هایی با ۱۰و٦۰ یاخته واحد. . ۸۵

شکل۳-۲۱. رسانندگی برای شدت‌های متفاوت مغناطیدگی (d=0.4,0.6,1) برای zGNR یک لبه مغناطیده با طول M=60 . ۸۶
شکل۳-۲۲. در سیستم مورد بررسی، قطعه بین دو رابط ایده‌آل قرار گرفته است. قطعه، نوار زیگزاگ با پهنای $W=7.5a_0$ و طول $L=8\sqrt{3}\ a_0$ با سه جای خالی در هر لبه است. ۸۶
شکل۳-۲۳. موقعیت هندسی جای خالی در جایگاه1A در یاخته M=5 در zGNR و رسانندگیzGNR در حضور جای خالی و بدون جای خالی برای یک لبه مغناطیده با شدت مغناطیدگی برابر با یک. ۸۷
شکل۳-۲٤. رسانندگیzGNR با یک جای خالی در شدت‌های متفاوت مغناطیدگی. ۸۸
شکل۳-۲۵. رسانندگیzGNR با دو لبه‌ی مغناطیده که دارای یک جای خالی است . ۸۸
شکل۳-۲٦. رسانندگیzGNR با مغناطیدگی در یک لبه با شدت یک در حضور پراکنده ساز و عدم حضور پراکنده ساز. ۸۹
شکل۳-۲۷. رسانندگیzGNR با یک لبه مغناطیده با شدت مغناطیدگی یک در شدت‌های متفاوت پراکنده‌ساز . ۹۰
شکل۳-۲۸. رسانندگی zGNR با شدت‌های مختلف مغناطیدگی در حضور پراکنده ساز با شدت ۵ . ۹۱
شکل۳-۲۹. رسانندگیzGNR برای مغناطیدگی دولبه با شدت یک در حضور پراکنده ساز و عدم حضور پراکنده ساز . ۹۲

پیشگفتار

نازک ترین ماده شناخته شده در جهان گرافین است که تک صفحه اتمی گرافیت است. برای این که بتوان آن را به طور خالص بررسی کرد، باید از محیط اطرافش منزوی شود. صفحات اتمی موضوع شناخته شده‌ای بودند، اما ماده ای با ضخامت تک اتم ناشناخته مانده بود که دلیل اصلی آن، ماهیت به ظاهر ممنوع رشد کریستال‌های کم بعد است. تا اینکه گروه منچستر در سال ۲۰۰٤ ایده مداد را دنبال کرد و موفق به منزوی کردن گرافین برای اولین بار شد. مداد که ماده اصلی آن همان گرافیت است، از توده لایه‌های گرافین تشکیل شده که به طور ضعیف بوسیله نیروهای واندروالس کوپل شده است. با کشیدن مداد روی کاغذ، توده ای از گرافین تولید می‌شود و جایی بین آنها، احتمال وجود تک لایه‌های گرافین هست. اگرچه این احتمال کم است ولی صفر نیست.

طیف الکترونی غیر معمول گرافین، آن را به پدیده‌ای جدید در فیزیک ماده چگال تبدیل کرده است، زیرا محاسبات نسبیتی را در آزمایشگاه برای ما ممکن ساخته است و پلی بین فیزیک ماده چگال و فیزیک انرژی‌های بالا است.

در فصل اول، به معرفی ساختار شبکه گرافین می‌پردازیم و برخی از خواص گرافین از جمله محاسبه رابطه پاشندگی گرافین بیان می‌شود. همچنین برخی از خواص غیرعادی در گرافین، از جمله اثر کوانتومی غیر عادی هال و الکترودینامیک کوانتومی در گرافین و پارادکس کلاین بررسی می‌شود.

فصل دوم، به معرفی سیستم‌های مزوسکوپی می‌پردازیم و تکنیک تابع گرین و روش لاندائور که برای محاسبات رسانندگی نیاز داریم، معرفی می‌شوند. سپس خواص الکترونی گرافین که شدیداً به هندسه نانونوارها بستگی دارند، بیان می‌شود.

فصل سوم، ترابرد الکترونی نانوارها در حضور بی‌نظمی‌هایی مانند نقص شبکه و پراکندسازها بررسی می‌شود. سپس ترابرد اسپین در حضور مغناطیدگی و بی‌نظمی‌های شبکه به‌دست می‌آید. محاسبات ما براساس مدل بستگی قوی انجام شده و برنامه‌ها با زبان برنامه‌نویسی فرترن ۹۰ نوشته شده است.

فصل اول

گرافین و خواص آن

۱-۱. مقدمه

کربن یکی از پرکاربرد ترین عناصر در جدول تناوبی است، نقش منحصر به فردی در طبیعت دارد. شکل گیری کربن در ستاره‌ها نتیجه‌ی یکی شدن سه ذره آلفا، پدیده ای است که باعث به وجود آمدن تمام عناصر نسبتاً سنگین در عالم می شود. توانایی اتم‌های کربن در تشکیل شبکه‌های پیچیده (حداقل در شکل‌های شناخته شده) اساس شیمی آلی و مبنایی برای وجود حیات در عالم است. سیستم‌های بر پایه کربن تعداد نامحدودی از ساختارهای گوناگون با خواص فیزیکی بسیار متفاوت را نشان می دهد. کربن خالص در طبیعت به صورت الماس و گرافیت یافت شده است، با این که تنها آرایش اتم‌های کربن آنها متفاوت است، اما خواص بسیار متفاوتی دارند. الماس عایق است و بسیار سخت در حالیکه گرافیت رسانا و نرم است.

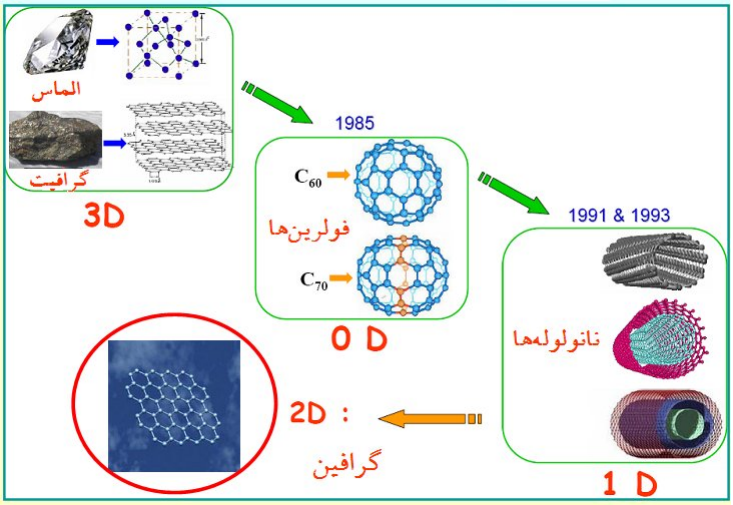
در سال ۱۹۸۵ اولین ماده کربنی خالص مصنوعی، مولکول کروی به نام فلورین کشف شد. از آن به بعد تحقیقات زیادی روی سایر مواد کربنی محض صورت گرفت. در سال ۱۹۹۱، کربن به شکل نانولوله شبه یک بعدی تولید شد. پس از کشف آزمایشگاهی گرافین دو بعدی در سال ۲۰۰٤ توسط آندره گایم[۱] و کوستیا نووسلوو[۲] تحول مهمی در علم مواد الکترونی به وجود آمد، که باعث تحول عظیم علمی در مطالعه خواص الکترونی شد. همین امر جایزه نوبل فیزیک ۲۰۱۰ را برای آن‌ها در پی داشت.

---

[۱] Andre Geim

[۲] Kostya Novoselov

در بین سیستم‌های فقط شامل کربن، گرافین تنها گونه دو بعدی کربن است که می‌تواند به عنوان اساس ساخت سایر مواد گرافیتی در نظر گرفته شود و مبنای فهم خواص الکترونی در گونه‌های دیگر است [۱].



شکل ۱-۱. مادر تمام ساختارهای گرافیت،گرافین است. این ساختار دوبعدی می‌تواند به صورت فلورین صفر بعدی در هم پیچیده شود، نقش یک نانولوله دو بعدی را بازی کند و یا به گرافیت سه‌بعدی تبدیل شود [۲].

فلورین را می‌توان به عنوان گرافین به هم پیچیده ی صفر بعدی در نظر گرفت، نانولوله‌ها به عنوان گرافین لوله شده یک بعدی و گرافیت توده ای از گرافین است وسه بعدی است. به همین دلیل نظریه‌ی گرافین به مدت ٦٠ سال مورد بررسی قرار گرفته بود. با این حال برای مدت طولانی فرض شده بود که گرافین نمی تواند به صورت آزاد در طبیعت یافت شود. این ایده توسط لاندائو[۱] و پیرز[۲] مطرح شد که بلورهای دقیقاً دو بعدی نمی توانند وجود داشته باشند. زیرا آن‌ها به لحاظ ترمودینامیکی ناپایدارند. در واقع دمای ذوب لایه‌های نازک با کاهش ضخامت، به سرعت کاهش می یابد. اما با کشف گرافین در آزمایشگاه، این قانون دچار تناقض شد. با این وجود باز می توان قرارداد کرد که نظریه آن‌ها برقرار باشد، چون صفحه گرافین بتدریج در بعد سوم مچاله می شود و دقیقا دو بعدی نیست [۲].

---

۱ Landau

۲ Peierls

گرافین، تنها ساختار دو بعدی کربن، لایه ای از گرافیت بـه ضـخامت یـک اتـم اسـت کـه اتم‌های کربن روی شبکه لانه زنبوری، شش ضلعی‌های منتظم قرار گرفته اند. به خـاطر رفتـار شگفت‌آور و غیر معمول این سیستم دو بعدی و کاربردهای عملی فراوان این مـاده، تحقیقـات گسترده ای روی این ماده صورت گرفته است. این رفتار غیر عادی به رابطه‌ی پاشندگی خطی و در نتیجه پیروی دینامیک الکترون‌ها از معادله ی نسبیتی دیراک بدون جرم مربوط می‌شود. از طرفی الکترون‌های برانگیخته در گرافین به صورت ذراتی با جرم صـفر رفتـار مـی‌کننـد. پـس معادله‌ی حاکم بر گرافین همانند معادله ی نوترینوی باردار است! [۱]

به نظر می‌رسد که گرافین به خاطر قابلیت آن در ساخته شـدن در ابعـاد بسـیار کوچـک و بسیاری ویژگی‌های مناسب الکتریکی و عملکرد با سرعت بالاتر نسبت به سیلیکون جـایگزین مناسبی برای سیلیکون و حرکت به سمت نانو الکترونیک مدرن است. گرافین نیمرسانایی بدون گاف انرژی است که حامل‌های بار آن در انرژی‌های کم، شبیه فرمیونهای بـدون جـرم دیـراک رفتار می‌کنند. در نتیجه یک سیستم ماده چگال در دسـترس بـه صـورت آزمایشـگاهی، بـرای مطالعه مکانیک کوانتومی نسبیتی است. الکترون‌ها در آن رفتار ترابردی شـبه- پرتـابی از خـود نشان داده و با مقاومت کمی که در برابر خود می‌بینند گرمای اندکی تولید مـی‌کننـد، از طرفـی آزمایش‌های اخیر نشان از رسانندگی گرمایی بالای گرافین می‌دهد که دارای رسانندگی گرمایی بالاتری نسبت به نانو لوله‌های کربنی است. همچنین آزمایش‌های اخیر خبر از تحـرک پـذیری بالای الکترون‌ها در گرافین حتی در دمای اتاق می‌دهد که در مقایسه با بالاترین تحرک پذیری ثبت شده در *MOSFET*، که در دمای کم به دست آمده بسیار بزرگ‌تر است.

این ویژگی‌های مطلوب ذکر شـده در گـرافین و همچنـین قابلیـت کنتـرل نـوع و چگـالی حامل‌های بار در گرافین به وسیله ی ولتاژ دریچه، آن را مناسب بـرای سـاخت قطعـات نـانو الکترونیک مدرن ساخته است.

در بررسی خواص ترابردی گرافین، باید اثرات لبـه‌هـای متفـاوت روی خـواص ترابـردی ابزارهای گرافینی به اندازه نانومتر، بررسی شود. به ویژه این که دو شکل پایه ای لبه، به نام‌های زیگراگ و دسته مبلی، منجر به طیف‌های الکترونی متفاوتی برای نانو نوارها می‌شود.

۱-۲. پایداری در دو بعد

وجود بلور دو بعدی و این که تحت شرایط خاصی پایدار باشد به خودی خود شگفت‌انگیز است. به موجب قضیه مرمین – وگنر، نظم بلند برد در سیستم دو بعدی نمی‌تواند وجود داشته باشد. پس در هر دمایی در سیستم بلوری دو بعدی جابجایی ساختاری ظاهر خواهد شد. در توصیف استاندارد نوسانات اتمی، دامنه نوسانات اتمی u حول جایگاه تعادلی شان، خیلی کوچک تر از فواصل بین اتمی، d، است. در غیر اینصورت بلور بر طبق معیار تجربی لیندمن ذوب می شود (در نقطه ذوب $u = ۰/۱\, d$).

به عنوان نتیجه‌ای از دامنه نوسانات کوچک، تصویر گاز ایده آل فونون‌ها، می تواند به خوبی ترمودینامیک جامدات را توصیف کند. در تقریب هماهنگ، فونون‌ها کوانتای امواج جابجایی اتمی هستند. در سیستم‌های سه بعدی، این نوسانات اتمی در تقریب هماهنگ، در دمای به قدر کافی پایین، کوچک و مسئله خودسازگار است. ولی در بلور دو بعدی تعداد فونون‌ها با طول موج بلند در دماهای پایین واگرا می شود و بنابر این فواصل اتمی محاسبه شده در تقریب هماهنگ واگرا می شود. به همین خاطر، بلور دو بعدی به خاطر افت و خیزهای شدید خمشی با طول موج‌های بلند مچاله می شود. تا اینکه دو دهه پیش نظریه پردازان نشان دادند که که این افت و خیزهای گرمایی شدید می‌توانند از طریق برهم کنش غیرهماهنگ (غیر خطی) بین انرژی خمیدگی و کششی از بین بروند. در نتیجه پوسته‌های بلورین دوبعدی می توانند وجود داشته باشند اما به شرطی که سطح موج دار باشد. این باعث نوسانات یا زبری سطح دو بعدی می‌شود که به طور نوعی با اندازه سطح رابطه دارد. این امواج در گرافین مشاهده شده اند و در خواص الکترونیکی نقش مهمی بازی می کنند [۳].

نکته مهم دیگر نقش نواقص هندسی در پایداری ترمودینامیکی بلور دوبعدی است. تعداد محدود ناجابجایی‌ها[۱] و ناهم خطی‌ها[۲]، نظم بلند برد از نوع انتقالی[۳] و یا سمتی[۴] را نقض خواهد کرد. یک تحلیل دقیق نشان می دهد که ناجابجایی‌ها در یک غشای نرم، انرژی محدود

---

[۱] Dislocation

[۲] Dislination

[۳] Translational

[۴] Orientational

دارند (در مرتبه انرژی همدوسش) که ناشی از پوشیده شدن تغییر شکل‌های خمشی است. درحالیکه انرژی ناهم خطی به طور لگاریتمی با اندازه سیستم واگرا می شود. و این به این معنی است که به طور قطع نظم بلند برد جابجایی و نظم جهتی در هر دمای محدودی شکسته می شود.ولی وقتی یک برهم کنش قوی در بلورهای دوبعدی مثل گرافین، وجود داشته باشد این محدودیت چندان مشکل ساز نیست [۱].

۱-۳. دلیل توجه به گرافین

گرافین، نازک ترین ماده شناخته شده در جهان، کیفیت الکترونیکی فوق العاده ای از خود نشان داده است به طوری که در اثر میدان الکتریکی حامل‌های بار می تواند به طور پیوسته بین الکترون و حفره تنظیم شوند و با وجود چگالی به بزرگی $۱۰^{۱۳} cm^{-3}$، تحرک پذیری آن حتی تحت شرایط محیط به بیشتر از $۱۵۰۰۰ cm^2 v^{-1} s^{-1}$ می رسد. از خواص عجیب گرافین، مشاهده اثر کوانتومی هال در دمای اتاق است. میانگین پویش آزاد بزرگ و حتی چند برابر فاصله بین اتمی دارد و الکترون‌ها فواصل میکرومتری را در دمای اتاق بدون پراکندگی طی می کند. ابررسانای حرارتی و دارای مقاومت مکانیکی عالی است. غیر قابل نفوذ حتی توسط مولکول‌های کوچک هلیوم است. به خاطر سرعت بالای حامل‌های بار (۱/۳۰۰ سرعت نور) از معادله شرودینگر پیروی نمی‌کند و نمونه خوبی برای نظریه کوانتومی ذرات نسبیتی بدون جرم است. این خواص می‌توانند ایجاد انگیزه کنند که روی ترابرد الکترونی نانونوارهای گرافینی کار کنیم [۲].

۱-٤. ویژگی‌های اصلی الکترونی گرافین

۱-٤-۱. ساختار شبکه

گرافین از اتم‌های کربنی تشکیل شده که در ساختار شش گوشی آرایش یافته اند. همان طور که در شکل ۱-۲ نشان داده شده این ساختار می تواند به صورت شبکه سه گوش با پایه دو اتمی در هر یاخته واحد در نظر گرفته شود. بردارهای شبکه می توانند به صورت زیر

نوشته شوند [٤] :

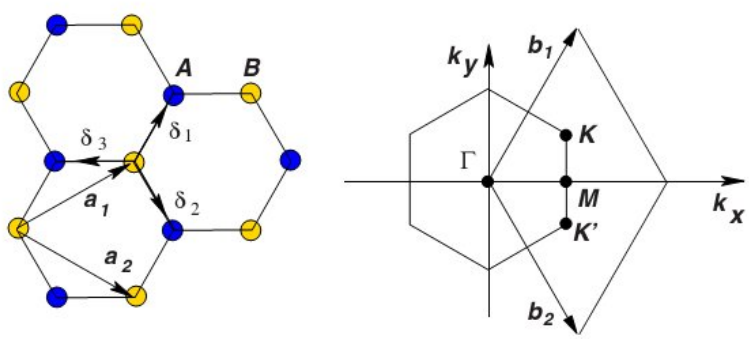
$$a_1 = \frac{a}{2}(3,\sqrt{3}) \ , \quad a_2 = \frac{a}{2}(3,-\sqrt{3}) \qquad (۱-۱)$$

که $a \approx 1.42^0 A$ فاصله کربن – کربن است. بردارهای شبکه وارون نیز به این صورت است:

$$b_1 = \frac{2\pi}{3a}(1,\sqrt{3}) \ , \quad b_2 = \frac{2\pi}{3a}(1,-\sqrt{3}) \qquad (۲-۱)$$

اهمیت فیزیکی ویژه گرافین در دو نقطه k' , k در گوشه‌های منطقه بریلوئن (BZ) است. این‌ها نقاط دیراک نامیده می‌شوند که بعداً توضیح داده خواهد شد. مکان آن‌ها در فضای تکانه عبارتند از:

$$K = (\frac{2\pi}{3a},\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}) \ , \quad K' = (\frac{2\pi}{3a},-\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}) \qquad (۳-۱)$$



شکل۱-۲. چپ: شبکه لانه زنبوری.راست: شبکه وارون لانه زنبوری

بردارهای سه همسایه اول در فضای واقعی عبارتند از :

$$\delta_1 = \frac{a}{2}(1,\sqrt{3}) \ , \ \delta_2 = \frac{a}{2}(1,-\sqrt{3}), \ \delta_3 = -a(1,0) \qquad (٤-۱)$$

در حالیکه شش همسایه دوم در مکـان‌هـای $\delta' = \pm(a_2 - a_1)$, $\delta' = \pm a_2$, $\delta' = \pm a_1$ قـرار گرفته‌اند.

۱-٤-۲. ساختار نواری

هامیلتونی بستگی قوی برای الکترون‌ها در گرافین با در نظر گرفتن همسایه اول و دوم به شکل زیر است :

$$H=-t\sum_{<i,j>,\sigma}(a^{+}_{\sigma,i}b_{\sigma,j}+H.c.)-t'\sum_{<<i,j>>,\sigma}(a^{+}_{\sigma,i}a_{\sigma,j}+b^{+}_{\sigma,i}b_{\sigma,j}+H.c.) \qquad (۱-۵)$$

که $a_{i,\sigma}(a^{+}_{i,\sigma})$ عملگر نابودی (خلق) یک الکترون با اسپین $\sigma(\sigma=\uparrow,\downarrow)$ در مکان R_i روی زیرشبکه A است (تعریفی معادل نیز برای زیر شبکه B به کار رفته است)، ($t(\approx ۲/۷eV$ انرژی جهش[۱] نزدیک‌ترین همسایه (جهش بین زیرشبکه‌های متفاوت)، t' انرژی جهش همسایه دوم[۲] (جهش در زیرشبکه‌های یکسان) است [٦].

برای پیدا کردن ساختار نواری گرافین، باید ویژه مقادیر معادله شرودینگر را محاسبه کنیم. به همین منظور، هامیلتونی را برای تک الکترون گرافین به صورت زیر می‌نویسیم [۷]:

$$H\xi_k(r)=E\xi(r) \quad , \quad \mathrm{H}=\frac{p^2}{2m}+\sum_R V(r-R) \qquad (۱-٦)$$

جمله اول انرژی جنبشی الکترون و جمله دوم پتانسیل تناوبی را توصیف می‌کند. برای تابع موج الکترون برحسب دو زیرشبکه A و B داریم:

$$\xi_k(r)=\psi_A\phi^k_A(r)+\psi_B\phi^k_B(r) \qquad (۱-۷)$$

که $\phi^k_B(r)$ و $\phi^k_A(r)$ توابع بلوخ اند و داده شده اند با:

$$\phi^k_{A/B}(r)=\frac{1}{\sqrt{N_c}}\sum_{R_{A/B}}e^{ikR_{A/B}}\chi(r-R_{A/B}) \qquad (۱-۸)$$

N_c تعداد یاخته‌های واحد است و $R_{A/B}$، نماد مکان اتم A/B است. $\chi(r-R_{A/B})$ توابع جایگزیده در آن اتم‌ها هستند. فاکتور $e^{ikR_{A/B}}$ به دلیل خصلت تناوبی بودن شبکه است. ضرایب

---

۱ - hopping

۲ - مقدار t' بدرستی شناخته شده نیست، اما در محاسبات نسبت $0.02t<t'<0.2t$ را پیدا کرده اند که بسته به پارامترهای مدل بستگی قوی، $t'\approx 0.1eV$ را اندازگیری کردند [۵. *S. Reich, J Maultzsch, C. Thomsen, Phys. Rev. B.* **66**(2002 .035412).