



دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد در
گرایش حالت جامد

موضوع :

عایق های توپولوژیکی و اتصالات با پایه
گرافن

استاد راهنما:

دکتر هادی گودرزی

تنظیم و نگارش:

سمیه سرباز

مهر ۹۲

حق چاپ و نشر مطالب این پایان نامه برای دانشگاه ارومیه محفوظ است

تقدیم به

مادر مهربانم

تشکر و قدردانی

در ابتدا از استاد گرانقدرم جناب آقای دکتر هادی گودرزی کمال تشکر را دارم که راهنمای بسیار خوب و دلسوزی برای من در تمام مراحل پایان نامه بودند ، همچنین از سرکار خانم مریم خضریو برای راهنمایی های بی دریغشان ممنون و سپاسگذارم . از خانواده ام که در تمام طول تحصیل همراه و یاور من بودند تشکر می کنم .

فهرست مطالب

چکیده	۱
مقدمه	۲

فصل اول

کلیات	۶
۱-۱-۱ کربن و آلو تراپ های آن	۶
۱-۲-۱ الماس	۶
۱-۱-۳ گرافیت	۶
۱-۱-۴ فولرنها	۷
۱-۱-۵ نانولوله های کربنی	۷
۱-۱-۶ گرافن	۷
۱-۷ هیبریداسیون ارییتال های کربن	۹

فصل دوم

گرافن	۱۴
۲-۱ گرافن	۱۴
۲-۲ یاخته ی واحد گرافن	۱۶
۲-۳ هامیلتونی تنگ بست گرافن	۱۹
۲-۴ گاف دار کردن گرافن	۲۳
۲-۵ خواص مغناطیسی گرافن	۲۴
۲-۶ خواص مکانیکی گرافن	۲۴
۲-۷ تاثیر زیر لایه روی گرافن	۲۵
۲-۸ روش های ساخت گرافن	۲۵
۲-۸-۱ روش جدا کردن مکانیکی	۲۵
۲-۸-۲ روش اپتیکسی رشد گرافن روی سیلیکون کاربید	۲۶
۲-۸-۳ لایه نشانی الکتراستاتیکی	۲۶
۲-۸-۴ باز کردن نانو لوله ها	۲۷
۲-۹ خواص نوری	۲۸
۲-۱۰ پارادوکس کلاین	۳۰

۳۲	۲-۱۱ ترابرد اسپین
۳۲	۲-۱۲ اثر مجاورت ابررسانا
۳۳	۲-۱۳ اثر مجاورت مغناطیسی
۳۴	۲-۱۴ کاربرد گرافن در صنعت

فصل سوم

۳۷	اثر هال در ساختار های گرافن
۳۷	۳-۱ اثر هال
۳۹	۳-۲-۱ اثر کوانتومی هال
۴۰	۳-۲-۲ مافست سیلسیوم
۴۲	۳-۳ اثر کسری کوانتوم هال
۴۲	۳-۴ اثر اسپینی کوانتومی هال
۴۳	۳-۵ مشاهده ی اثر هال کوانتومی در گرافن

فصل چهارم

۴۵	ساختارهای نسبیتی گرافن _ معادله ی دیراک ۲ بعدی
۴۵	۴-۱ معادله ی دیراک -فرمیون های بدون جرم

۴-۲ هامیلتونی گرافنی ذاتی ۴۶

۴-۳ شبه اسپین ۴۸

فصل پنجم

عایق های توپولوژیک ۵۰

۵-۱ عایقهای توپولوژیک ۵۰

۵-۲ عایق های توپولوژیکی دو بعدی و سه بعدی ۵۲

۵-۳ گاف مغناطیسی ناشی در تونل زنی رسانندگی در عایق توپولوژیکی با اتصالات فرومغناطیس /

ابرسانا ۵۳

۵-۳-۱ تعریف مسئله ۵۳

۵-۳-۲ فرآیند پراکندگی ۵۵

۵-۳-۳ فرمالیسم رسانندگی ۵۸

۵-۳-۴ بحث روی نتایج ساختار ۵۸

نتیجه گیری ۶۹

پیشنهادات ۷۰

منابع و مراجع

فهرست اشکال و نمودار ها

- شکل ۱-۱. ساختار بلوری آلوتراپ های کربن ۸
- شکل ۱-۲: اربیتال $2p$ دارای یک بازو با دامنه منفی و بازوی دیگر با دامنه مثبت است..... ۹
- شکل ۱-۳: دو نوع مختلف ترکیب شدن اربیتال $2p_x$ با اربیتال $2s$ ۱۱
- شکل ۱-۴: ساختاری دوبعدی که نشان دهنده هیبرید SP^2 است..... ۱۲
- شکل ۲-۱: ساختار گرافن، اتم های مربوط به زیر شبکه های متفاوت (a ، b) با رنگ های متفاوت ۱۴
- شکل ۲-۲: ساختار های نواری در گرافن نوار رسانش در نقاط K و K' با نوار ظرفیت تلافی دارد ۱۵
- شکل ۲-۳: الف -یاخته واحد شبکه مستقیم گرافن . ب-یاخته وینگر-سایتز شبکه وارون گرافن ۱۶
- شکل ۲-۴: ساختار هندسی شبکه گرافن، a_1 و a_2 بردارهای پایه ی گرافن ۱۷
- شکل ۲-۵: موقعیت نزدیکترین همسایه های یک اتم کربن در ساختار گرافن..... ۱۹
- شکل ۲-۶: شبکه وارون گرافن ۱۹
- شکل ۲-۷: چگالی حالات برای یک صفحه ی گرافنی [۱۲] ۲۰

- شکل ۲-۸: شماتیک جدا کردن یک لایه ی گرافن از گرافیت ۲۶
- شکل ۲-۹: شماتیک لایه نشانی الکترواستاتیکی برای جدا کردن یک لایه گرافن از گرافیت ۲۷
- شکل ۲-۱۰: باز کردن نانولوله ها ۲۷
- شکل ۲-۱۱: آشکار ساز نوری ساخته شده از گرافن ۲۹
- شکل ۲-۱۲: چگونگی رفتار ذرات در برخورد با سدپتانسیل در مکانیک کلاسیک و کوانتومی
نیستی ۳۱
- شکل ۲-۱۳: ساختار گرافن فرومغناطیس ۳۳
- شکل ۲-۱۴: پیل خورشیدی گرافنی با روکش آلی ۳۴
- شکل ۲-۱۵: ترانزیستورهای یک پارچه ی گرافنی ۳۵
- شکل ۳-۱: آرایش آزمایش هال ۳۸
- شکل ۳-۲: رابطه ی خطی میدان مغناطیسی و مقاومت هال ۳۸
- شکل ۳-۳: تغییرات مقاومت هال و مقاومت طولی در اثر کوانتومی هال ۴۰
- شکل ۳-۴: شماتیک مافست سیلیسیم ۴۱
- شکل ۳-۵: شماتیک جهت گیری جریان های اسپینی در اثر اسپین هال ۴۳
- شکل ۳-۶: آرایش جریان اسپینی ۴۳
- شکل ۵-۱: عایق های توپولوژیکی ۲ و ۳ بعدی ۵۲

- شکل ۵-۲: مدل S / F بر پایه ی عایق توپولوژیکی و پتانسیل اعمالی به ناحیه ی ابررسانا و تغییرات انرژی فرمی در آن ناحیه..... ۵۵
- شکل ۵-۳-۱: نمودار تغییرات رسانندگی بر حسب ولتاژ بایاس (در حالت $m = 0$)..... ۵۹
- شکل ۵-۳-۲: نمودار تغییرات رسانندگی بر حسب ولتاژ بایاس (در حالت $m = 0.5E_F$) ۶۰
- شکل ۵-۳-۳: نمودار تغییرات رسانندگی بر حسب ولتاژ بایاس (در حالت $m = -0.95E_F$) ۶۰
- شکل ۵-۴-۱: نمودار رسانندگی بر حسب ولتاژ بایاس V بر حسب $U = -0.95E_F$ ۶۱
- شکل ۵-۴-۲: نمودار رسانندگی بر حسب ولتاژ بایاس V بر حسب $U = 0$ ۶۲
- شکل ۵-۴-۳: نمودار رسانندگی بر حسب ولتاژ بایاس V بر حسب $U \rightarrow \infty$ ۶۳
- شکل ۵-۵-۱: نمودار رسانندگی بر حسب پتانسیل اعمالی (حالت $V = 0$) ۶۴
- شکل ۵-۵-۲: نمودار رسانندگی بر حسب پتانسیل اعمالی (حالت $eV/\Delta = 0.5$) ۶۴
- شکل ۵-۵-۳: نمودار رسانندگی بر حسب پتانسیل اعمالی (حالت $eV/\Delta = 1$) ۶۵
- شکل ۵-۶-۱: نمودار رسانندگی برای حالت $eV/\Delta = 0$ ۶۶
- شکل ۵-۶-۲: نمودار رسانندگی برای حالت $eV/\Delta = 0.5$ ۶۷
- شکل ۵-۶-۳: نمودار رسانندگی برای حالت $eV/\Delta = 1$ ۶۷

چکیده:

بررسی ساختارهای فیزیکی جدید در قالب فرمالیسم کوانتومی نسبیتی هم از لحاظ تئوری و هم از لحاظ تجربی و طراحی سیستم های جدید الکترونیکی بسیار حائز اهمیت می باشد. دو کاندیدای خوب برای ساختار های ماده ی چگال نسبیتی که در ۶-۷ سال اخیر به طور جدی مطرح شده اند، گرافن و عایق توپولوژیکی هستند در این ساختارها بستگی الکترون ها به هسته بطور ذاتی توسط هامیلتونی دیراک دو بعدی با جرم موثر فرمیونی صفر توصیف می شوند. نشان داده شده است که سرعت حامل های بار نسبیتی بوده و طیف انرژی آنها در منطقه ی بریلوئن در نزدیکی نقاط دیراک برخلاف ساختار معمول حالت جامد که سهمی گون می باشد، خطی است. کریستال دوبعدی بودن ساختار گرافن و خواص فیزیکی منحصر به فرد و عجیب آن سبب توجه بسیار زیاد محققان به این حوزه شده است. در این راستا اثر هال و فرمالیسم دو بعدی معادله ی دیراک مورد مطالعه قرار می گیرد. در نهایت رسانندگی تونل زنی در سطح عایق های توپولوژیکی بر پایه اتصالات فرومغناطیس / ابررسانا بررسی می شود. روابط رسانندگی توسط فرمالیسم بولندر-تینخام-کلاپویچ BTK محاسبه شده است. خاصیت مغناطیسی در ناحیه ی فرومغناطیس گاف مغناطیسی را برای الکترون های دیراک ایجاد می کند. در این پایان نامه به تاثیر افزایش گاف مغناطیسی ناشی از میدان مغناطیسی در ناحیه ی فرومغناطیس بر روی رسانندگی تاکید داریم. اثر عدم تطبیق انرژی های فرمی بین ناحیه ی فرومغناطیسی ($E_{Ff} = E_F$) و ناحیه ی ابررسانایی ($E_{FS} = E_F + U$)، هنگامی که پتانسیل ورودی U بر الکتروود ناحیه ی S اعمال میشود نیز مورد بررسی قرار گرفته است. نمودارهای رسانندگی بر حسب پارامترهای مختلف مانند ولتاژ بایاس، پتانسیل U و غیره مورد بحث و مطالعه قرار گرفته است.

مقدمه

هفتاد سال پیش دو فیزیکدان به نام های لاندائو و پالیز [۱] استدلال کردند که شبکه ی ۲ بعدی به لحاظ ترمودینامیکی به شدت ناپایدار است و نمی تواند وجود داشته باشد. نظریه ی آن ها به این نکته توجه داشت که سهم افت و خیز های گرمایی در بلور با ابعاد کم، هم مرتبه و قابل مقایسه با فاصله ی اتمی ذرات در نقاط شبکه ای است. این بحث توسط مرمین توسعه داده شد [۲] و توسط مشاهدات تجربی دیگران تایید گردید. در حقیقت، دمای ذوب یک فیلم نازک با کاهش ضخامت آن شدیداً کاهش می یابد و بنابراین فیلم نازک در حدود ۱۲ لایه ی ناپایدار می شود. تا این که در سال ۲۰۰۴ میلادی گرافن ۲ بعدی پایدار در آزمایشگاه گروه گایم ساخته شد [۳]. چنین لایه ی ۲ بعدی نه تنها پیوسته است بلکه یک بلور با کیفیت بالا است، به طوری که حامل های بار می توانند بدون پراکندگی مسافت حدود هزار فاصله ی اتمی را بپیمایند. به عبارتی تحرک پذیری حامل های بار بالاست. چنین ساختار دو بعدی با حذف ملایم بعد سوم به دست آمده است و شدیداً پایدار است.

پس از کشف گرافن توسط نووسلوف و آندره گایم بررسی های بسیار زیادی بر روی این ماده انجام شده است. گرافن ساختار دو بعدی از یک لایه منفرد شبکه لانه زنبوری کربنی می باشد. به دلیل ضخامت بسیار کم گرافن این ماده را به عنوان باریک ترین ماده ی جهان می شناسند. به دلیل رابطه ی پاشندگی خطی در گرافن سرعت فرمی الکترون های کم انرژی از انرژی آن مستقل است [۴] در نتیجه گرافن یک نیمه رسانای فاقد گاف انرژی است که ساختار نواری آن در منطقه ی بریلوین مخروطی شکل است و نوار رسانش و نوار ظرفیت آن فقط در نقطه ی دیراک هم دیگر را قطع می کنند. طول پیوند کربن - کربن در گرافن در حدود 0.142 نانومتر است این ماده به دلیل خواص منحصر به فرد مکانیکی، الکتریکی، رسانندگی گرمایی، تحرک پذیری حامل های بار و رسانندگی اپتیکی که از خود نشان داده است. جایگزین مناسبی برای سیلیکون و در نسل بعدی قطعه های فوتونیک و الکترونیک و ترکیبات آن در قطعات الکترونیک خواهند شد. این ماده در همجواری ابررسانا، خواص

ابرسائایی به خود می گیرد. از خواص بسیار جالب آن حامل های بار آن هستند که به صورت فرمیون های بدون جرم دیراک می باشند .

مکانیک کوانتوم نسبیتی تلفیقی از مکانیک کوانتومی و نسبیت خاص هست. این نظریه ذرات با سرعت های نسبیتی (سرعت های قابل مقایسه با سرعت نور) و همچنین ذرات بدون جرم را شامل می شود. مکانیک کوانتوم نسبیتی در فیزیک انرژی بالا و فیزیک ذرات و فیزیک شتاب دهنده کاربرد دارد. و با ارائه ی فرمالیسم خاص خود به بررسی موارد فوق می پردازد. با ماده ای (گرافن) سروکار داریم که در آن حامل های بار ذرات دارای جرم موثر صفر هستند و بنا براین در فصل های آینده با فرمالیسم مکانیک کوانتومی نسبیتی آشنا خواهیم شد.

دانش نانو از دانشهای بنیادی هست که برای اعمال کنترل کامل بر ساختار و عملکرد ماده فیزیکی در مقیاس های اتمی و مولکولی را هدف خود قرار داده است. گرافن چون یک ماده ی ۲ بعدی هست یک ماده ی نانو ساختار به شمار می آید. یک ماده ی نانو ساختار، جامدی است که در سراسر بدنه آن انتظام اتمی، کریستال های تشکیل دهنده در مقیاس چند نانومتری گسترده شده باشند. در حقیقت این مواد متشکل از کریستال ها یا دانه های نانومتری هستند که هر کدام از آنها ممکن است از لحاظ ساختار اتمی، از جهات کریستالوگرافی با یکدیگر متفاوت باشند.

در سال ۲۰۰۴ که چارلز کین^۱، فیزیک دان نظری دانشگاه پنسیلوانیا نتیجه مطالعات خود را بر روی ورقه هایی از کربن به نام گرافن منتشر کرد، همه تصورات تغییر کرد. محاسبات کین بیان می کرد که حرکت الکترون ها در این ماده که تنها به اندازه یک اتم ضخامت دارد، یادآور اثر هال است که نخستین بار در سال ۱۹۸۰ مشاهده شد. اثر هال هنگامی اتفاق می افتد که الکترون ها در اثر اعمال میدان های الکتریکی و مغناطیسی قوی به مواد خاصی، در لایه های نازکی از این مواد محبوس شوند و سپس تا نزدیکی صفر مطلق سرد شوند. در چنین دمایی، رفتارهای تصادفی الکترون ها به یک رفتار دسته جمعی منظم تر تبدیل می شود که تابع قوانین مکانیک کوانتوم است. آنچه کین و گروهش در محاسبات مربوط به گرافن مشاهده کردند، دقیقاً مشابه اثر هال نبود. با این وجود، بررسی های بیشتر نشان داد که این ماده ممکن است نوع دیگری از مواد لایه نازک با رفتار مشابه باشد. با این تفاوت که این دفعه برای حرکت هماهنگ الکترون ها، نیازی به استفاده از میدان های عظیم مغناطیسی یا دماهای فوق

^۱ . Charles kane

سرد نیست. جوئل مور^۲، نظریه پرداز دانشگاه برکلی کالیفرنیا از محاسبات کین استفاده کرد تا نشان دهد که تکه های سه بعدی مواد نیز می توانند اثرات کوانتومی از خود نشان دهند. البته در این حالت حرکت الکترون ها در سطح ماده، نسبت به ورقه نازک و مسطح استفاده شده توسط کین پیچیده تر است. مور همچنین به این مواد یک نام جدید داد. کین این مواد را برای نشان دادن مشخصات مکانیک کوانتومی که باعث بروز این پدیده می شد، «ثابت توپولوژیک Z2 جدید» نامید، اما مور نام عایق های توپولوژیک را برای آنها برگزید.

شواچنگ ژانگ و همکارانش در دانشگاه استنفورد، مشغول تحقیق در این خصوص بودند که چه موادی می توانند یک عایق توپولوژیک باشند. آنها دریافتند که در بسیاری از مواد، ارتباط بین الکترون ها و هسته برای ایجاد چنین رفتاری بسیار ضعیف است. اما با سنگین تر شدن هسته، این ارتباط نیز قوی تر می شود. در سال ۲۰۰۶ ژانگ پیش بینی کرد که بلور ساخته شده از عناصر سنگین جیوه و تلوریم، قادر است رفتار یک عایق توپولوژیک را از خود نشان دهد. در همان سال، لاورنس مولنکمپ، فیزیک دان دانشگاه رزبورگ آلمان و گروهش توانستند با گسترش یک لایه نازک از بلور تلورید جیوه، درستی پیش بینی ژانگ را نشان دهند.

عایقهای توپولوژیک حالتی جدیدی از مواد هستند به طوریکه خواص الکتریکی آنها توسط تقارن وارون-زمان حفظ میشود. خاصیت بارز اینگونه مواد وجود کانالهای الکترونی پلاریزه در سطح آنها میباشد که امکان جایگزیدگی برای آنها ممکن نیست. این حالتها به طور نظری ابتدا در گرافن پیش بینی شدند [۶و۵]. ولی از آنجا که برهمکنش اسپین-مدار، که عامل اصلی در وارونگی نوارهای انرژی و سپس توسعه نظم توپولوژیک در سیستم می باشد، در گرافن بسیار ضعیف است، این حالتها به طور تجربی قابل مشاهده در گرافن نیستند. اما وجود حالتی توپولوژیک در سیستمهای ۲ بعدی دیگری نظیر چاههای کوانتومی $HgTe$ ابتدا به صورت نظری و سپس تجربی اثبات شده است [۸و۷]. در عایق های توپولوژیک دو بعدی رسانندگی در لبه مشاهده می شود در حالی که در عایق های توپولوژیکی سه بعدی رسانندگی در سطح جسم مشاهده می شود. عایق های توپولوژیکی دو بعدی اولین بار در چاه های کوانتومی $HgTe$ مشاهده شده است. عایق های توپولوژیکی سه بعدی هم نخستین بار در $Bi_{1-x}Sb_x$ مشاهده شده است. در سال ۲۰۰۹ نسل دوم عایق های توپولوژیکی شامل Bi_2Se_3 بود که دارای ویژگی های مطلوب بیشتر بود، که بطور تجربی و از لحاظ نظری شناسایی شده بود.

^۲ . J.E.moor

در این پایان نامه قصد داریم در فصل اول روی ساختار کربن و هیبریداسیون اربیتال های اتم کربن را مطالعه می کنیم. در فصل دوم با خواص گرافن و ساختار شبکه ی حقیقی و وارون آن و روش های ساخت آن ماده آشنا می شویم و برخی از ویژگی های خاص گرافن را بررسی می کنیم. از آنجا که یکی از مهمترین خواص گرافن تولید اثر کوانتومی هال و اسپینی هال در گرافن است در فصل سوم به بررسی اثر هال پرداختیم.

با توجه به اینکه حامل های بار در گرافن فرمیون های بدون جرم هستند و این حامل ها از روابط نسبیتی دیراک پیروی می کنند. در فصل چهارم معادله ی دیراک دو بعدی و ساختار نسبیتی گرافن را مطالعه خواهیم کرد.

در فصل آخر با خواص عایق های توپولوژیکی می پردازیم و با عایق های توپولوژیکی دو و سه بعدی آشنا می شویم و در نهایت به بررسی رفتار تونل زنی در عایق های توپولوژیکی در اتصالات فرومغناطیس / ابررسانا می پردازیم و تاثیرات میدان مغناطیسی بر گاف مغناطیسی ناشی از میدان مغناطیسی در عایق های توپولوژیکی را بررسی خواهیم کرد.

فصل اول

کلیات فیزیک ساختارهای کربنی

۱-۱-۱ کربن

کربن یکی از جالب ترین عناصر طبیعت است که با عدد اتمی ۶ در گروه ششم جدول تناوبی قرار دارد که می توان آن را به صورت های متفاوتی مشاهده کرد که می توان به الماس و گرافیت با ساختار ۳ بعدی و گرافن با ساختار ۲ بعدی ، نانولوله های کربنی با ساختار ۱ بعدی و فولرنها با ساختار صفر بعدی نام برد که همگی به فرم جامد هستند.

تفاوت در گونه های کربنی صرفا به دلیل تفاوت در شکل گیری اتم های کربن نسبت به هم و یا به ساختار شبکه ی آن ها بر میگردد.

۱-۱-۲ الماس

دارای ساختار بلوری منظمی است. اتم های الماس در شبکه fcc با ثابت شبکه ی $a = 0.356$ نانومتر قرار دارند که هر اتم کربن با ۴ اتم کربن دیگر پیوند ها ی کوالانسی با طول پیوند 0.15 نانومتر برقرار میکند [۹].

۱-۱-۳ گرافیت

ساختار گرافیت به صورت شش ضلعی منتظم است، گرافیت از لایه های روی هم تشکیل شده که در آن هر اتم کربن با ۳ اتم کربن دیگر دارای پیوند کوالانسی می باشد و لایه ها توسط پیوندهای واندروالسی به لایه های زیرین متصل می شوند و به همین دلیل صفحه های گرافیتی به راحتی روی هم می لغزند و از گرافیت در مغز مداد و همچنین در روغن کاری و روان کاری استفاده میکنند.

۴-۱-۱ فولرنها

در سال ۱۹۸۵ ریچارد اسملی^۳ ساختاری جدید از کربن را کشف کرد که فلورن نامگذاری شد [۱۰]. C_{60} اولین فلورنی بود که کشف شد. این ملکول همانند یک توپ فوتبال کروی است و شامل ۶۰ اتم کربن می باشد که در گوشه های شش ضلعی های منتظم و تعدادی مشخص پنج ضلعی قرار دارد. سطح یک کره را نمی توان تنها با شش ضلعی های منتظم پوشش داد بنا بر این اتم های کربن برای جهت قرار گیری بر روی یک سطح کروی ناچار هستند در بعضی از مکان ها تشکیل پنج ضلعی بدهند. مولکول C_{60} متشکل از ساختاری با ۲۰ شش ضلعی و ۱۲ پنج ضلعی است [۹].

۵-۱-۱ نانولوله های کربنی

در سال ۱۹۹۱ ایجیما^۴ موفق به کشف نانولوله های چند دیواره ی کربنی^۵ شد [۱۱]. دوسال بعد از گزارش کشف نانولوله های کربنی چند دیواره، ایجیما و همکارانش موفق به ساخت نانولوله های کربنی تک دیواره^۶ شدند [۱۲ و ۱۳]. نانولوله های کربنی به دلیل خواص الکتریکی جالبی که دارند در قطعات الکتریکی موارد استفاده زیادی می توانند داشته باشند. این مواد به دلیل رسانش یک بعدی در مقیاس نانو می توانند جایگزین مناسبی برای فلزات و یا نیم رساناها باشند.

۶-۱-۱ گرافن^۷

گرافن یک ساختار لانه زنبوری^۸ ۲ بعدی با پهنای یک اتم است [۱۴]. که در سال ۲۰۰۴ یک گروه فیزیکدان از دانشگاه منچستر انگلستان، با سرپرستی آندره گایم و نووسلوو گرافن را در آزمایشگاه تولید کردند.

^۳ Rick Smalley

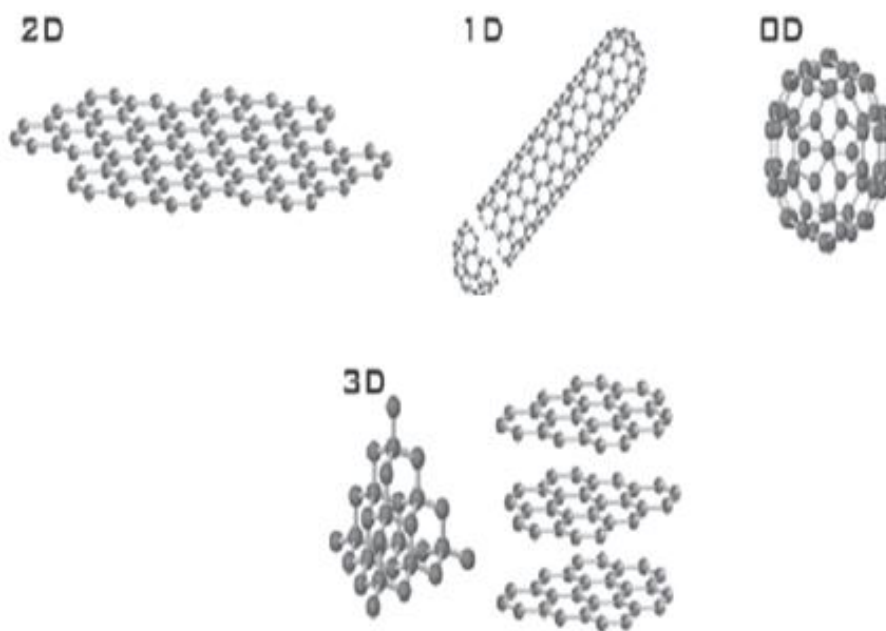
^۴ Iijima

^۵ MWCNT

^۶ SWCNT

^۷ . graphene

^۸ . honeycomb



شکل ۱-۱. ساختار بلوری آلوتراپ های کربن

چپ به راست، الماس و گرافیت ۳ بعدی (۳D) ، گرافن ۲ بعدی (2D) ، نانولوله های یک بعدی (1D) ، و توپ های صفر بعدی (0D)

هفتاد سال پیش دو فیزیکدان به نام های لاندائو^۹ و پالیز [۱] استدلال کردند که شبکه ی ۲ بعدی به لحاظ ترمودینامیکی به شدت ناپایدار است و نمی تواند وجود داشته باشد. نظریه ی آن ها به این نکته توجه داشت که سهم افت و خیز های گرمایی در بلور با ابعاد کم، هم مرتبه و قابل مقایسه با فاصله ی اتمی ذرات در نقاط شبکه ای است. این بحث توسط مرمین توسعه داده شد [۲] و توسط مشاهدات تجربی دیگران تایید گردید. در حقیقت، دمای ذوب یک فیلم نازک با کاهش ضخامت آن شدیداً کاهش می یابد و بنابراین فیلم نازک در حدود ۱۲ لایه ی ناپایدار می شود. تا این که در سال ۲۰۰۴ میلادی گرافن ۲ بعدی پایدار در آزمایشگاه گروه گایم ساخته شد [۳]. چنین لایه ی ۲ بعدی نه تنها پیوسته است بلکه یک بلور با کیفیت بالا است، به طوری که حامل های بار می توانند بدون پراکندگی مسافت حدود هزار فاصله ی اتمی را بپیمایند. به عبارتی تحرک پذیری حامل های بار بالاست. چنین ساختار ۲ بعدی با حذف ملایم بعد سوم به دست آمده است و شدیداً پایدار است. در گرافن فضای بین ترازهای انرژی متناسب با B/E است. که B میدان مغناطیسی عمود بر سطح گرافن است و E انرژی شبه ذرات دیراک است.

^۹. landau

یکی از خواص منحصر به فرد گرافن حامل های بار این ماده می باشد، که به صورت ذرات نسبیته با جرم موثر صفر هستند. چنین شبه ذراتی را فرمیون های دیراک بدون جرم می نامیم که الکترون هایی هستند که جرم سکون خود را از دست داده اند. در آلوتراپ های مختلف کربن الکترون های π و σ هستند که در رسانش دخالت می کنند [۱۵]. برای درک بیشتر ماهیت پیوندها و انرژیهای آن به بررسی انواع هیبریدهایی که هر اتم کربن می تواند با اتم کربن دیگر داشته باشد می پردازیم.

۷-۱ هیبریداسیون^{۱۰} اربیتال های کربن

اتم کربن دارای ۶ الکترون هست و اربیتال های $2p$ اتم کربن در جامدات کربنی به صورت زیر نوشته میشود.

$$u_{2p}(\vec{r}) = R_{21}(\vec{r})Y_{1,m}(\theta, \varphi) \quad (1-1)$$

مؤلفه های اربیتال $2p$ را در راستای محورهای مختصات دکارتی به صورت زیر می توان نوشت.

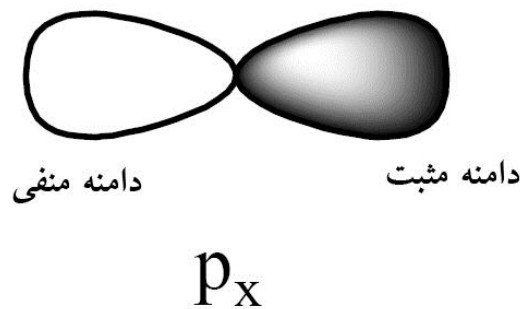
$$u_{2p_x}(\vec{r}) = R_{21}(\vec{r}) \sin(\theta) \cos(\varphi) \quad (2-الف)$$

$$u_{2p_y}(\vec{r}) = R_{21}(\vec{r}) \sin(\theta) \sin \varphi \quad (2-ب)$$

$$u_{2p_z}(\vec{r}) = R_{21}(\vec{r}) \cos(\theta) \quad (2-ج)$$

اندازه این اربیتالها در یکسری از نقاط ویژه در فضا مقدار قابل ملاحظه ای را اتخاذ می کند. اگر این نقاط را در فضا رسم کنیم مشاهده می کنیم که این اربیتالها به صورت دمبلهایی هستند که در امتداد محورهای مختصات قرار گرفته اند [۱۶]. همان گونه که در شکل (۲-۱) نشان داده ایم اربیتال $2p_x$ دارای یک بازو با دامنه منفی و بازوی دیگر با دامنه مثبت است. این موضوع را از رابطه ی (۲-۱ الف) به سادگی می توان فهمید. تجزیه شدن اربیتال $2p$ در مولکولها و جامدات کربنی منشأ پیدایش هیبریدهای گوناگون این عنصر می شود.

^{۱۰} hybridization



شکل ۱-۲: اربیتال $2p_x$ دارای یک بازو با دامنه‌ی منفی و بازوی دیگر با دامنه‌ی مثبت است

چون فاصله‌ی تراز بالاتر $2p$ از تراز پایین تر $2s$ چندان زیاد نیست بنابراین توابع موج این دو اربیتال می‌توانند با هم به صورت خطی ترکیب شوند [۱۵]. از نحوه‌ی ترکیب شدن اربیتال $2s$ با سه مؤلفه‌ی اربیتال $2p$ هیبریدهای گوناگونی به وجود می‌آیند. به طور مثال اگر یک مؤلفه‌ی اربیتال $2p$ با اربیتال $2s$ ترکیب شود تابع موج جدید را هیبرید sp می‌گویند. به همین ترتیب اگر دو مؤلفه از اربیتال $2p$ با اربیتال $2s$ ترکیب شود هیبرید sp^2 و اگر سه مؤلفه‌ی اربیتال $2p$ با اربیتال $2s$ ترکیب شود هیبرید sp^3 خواهیم داشت. تابع موج هیبرید sp را می‌توان به صورت زیر بدست آورد.

هر مؤلفه از اربیتال $2p$ دارای دو بازو است که یک بازوی آن دارای دامنه‌ی منفی و بازوی دیگر دارای دامنه‌ی مثبت است. در مورد هیبرید sp چون اربیتال $2s$ دارای تقارن کروی است دو نوع متفاوت از ترکیب شدن وجود دارد. در حالت اول دامنه‌ی بازوی سمت راست مؤلفه اربیتال p_2 مثبت و در حالت دوم این بازو دارای دامنه‌ی منفی است (شکل ۱-۳). در این دو حالت، مؤلفه‌ی اربیتال $2p$ با دامنه‌ی مثبت را با این فرض که این مؤلفه‌ها در راستای محور x باشند به صورت زیر می‌توان نوشت.

$$2p_{x\alpha} = (1,0,0) \quad (الف \text{ ۱-۳})$$

$$2p_{x\beta} = (-1,0,0) \quad (ب \text{ ۱-۳})$$

دو نوع تابع موج هیبرید sp را با توجه به روابط (الف ۱-۳) و (ب ۱-۳) و با در نظر گرفتن شرط بهنجارش می‌توان به صورت زیر نوشت.

$$|sp_{\alpha}\rangle = C_1|2s\rangle + \sqrt{1 - C_1^2}|2p_x\rangle \quad (الف \text{ ۱-۴})$$