وزارت علوم،تحقیقات و فناوری

دانشگاه شهید مدنی آذربایجان

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

پایان نامه مقطع کارشناسی ارشد

رشته فیزیک-گرایش حالت جامد

عنوان پایان نامه:

بررسی عددی ترابرد الکترونی در نانو نوارهای گرافین

استاد راهنما:

دکتر حکیمه محمدپور

استاد مشاور:

دکتر آرش فیروزنیا

پژوهشگر:

وحید ریاضی مبارکی

اسفند ۱۳۹۲

تبریز- ایران

چکیده

در این پایان‌نامه، به ترابرد کوانتومی در نانو نوار گرافینی با لبه آرمچیر شکل بر اساس فرمول بندی تابع گرین غیر تعادلی پرداخته ایم. تفاوت عمده ای که نانو نوار گرافینی آرمچیر شکل با صفحه ی گرافین پهن دارد، وجود گاف انرژی در آن و حساس بودن به هندسه ی لبه وعرض نوار است. در این پژوهش از نانو نوار آرمچیر به عنوان پایه در سیستم درین + کانال + سورس استفاده کرده ایم، وبا اعمال ولتاژ ثابت و متغیر خطی وبا استفاده از روش گرین غیرتعادلی، چگالی حالات وجریان عبوری از کانال را به دست آورده ایم.

واژگان کلیدی: گرافین، ترابرد همدوس کوانتومی، تابع گرین غیر تعادلی،

فهرست عناوین

عنوان صفحه

چکیده ..... یک

مقدمه ۱

فصل اول: گرافین ٤

۱-۱- ساختار نواری گرافین ۵

۱-۱-۱- مدل تنگ بست در گرافین ٦

۱-۱-۲- حالتهای الکتریکی در حد انرژی پایین ۹

۱-۲- خواص الکتریکی گرافین ۱۱

۱-۲-۱- کایرالیتی ۱۲

۱-۲-۲- تونل زنی ذرات کایرال ۱۳

۱-۲-۳- پارادوکس کلاین ۱٤

۱-۳- نانو نوارهای گرافین ۱۹

۱-۳-۱- هندسه‌ی نوار ۱۹

۱-۳-۲- نوار آرمچیر ۲۰

۱-۳-۳- نوار زیگزاگ ۲۳

فصل دوم: ترابرد همدوس کوانتومی **۲۵**

۲-۱- رسانش از طریق انتقال : روش لاندائور – بوتیکر ۲٦

۲-۱-۱- مقاومت یک رسانای بالستیک ۲۷

۲-۱-۲- فرمول لاندائور ۳۰

۲-۱-۳- بایاس و دمای غیر صفر ۳۳
۲-۲- ترابرد از طریق تونل زنی تشدیدی ۳۸
۲-۳- رسانندگی در سیستمهای مزوسکوپیک : روش گرین غیر تعادلی ۳۹
۲-۳-۱- تابع توزیع فرمی ٤۰
۲-۳-۲- جریان ورودی و خروجی ٤۱
۲-۳-۳- فرمالیسم ترابرد ٤٥
فصل سوم: روش گرین غیر تعادلی ٤٨
۳-۱- سیستم باز ٤۹
۳-۱-۱- مثال ساده ٥۰
۳-۱-۲- حالت عمومی ٥۲
۳-۱-۳- بررسی Σ و s ٥٤
۳-۲- چگالی موضعی حالت ها ٥٥
۳-۲-۱- تابع طیفی ٥٦
۳-۲-۲- تابع گرین ٥۷
۳-۲-۳- ماتریس خود انرژی ٦۰
۳-۲-۳- ماتریس چگالی ٦۱
۳-۳- کانال با دو تماس ٦۳
فصل چهار: نتایج و مدل ها ٦٦
٤-۱- سیستم و روشها ٦۷
٤-۱-۱- معرفی سیستم نانو نوار گرافینی ٦۷

۳-۲-۳- روش گرین غیرتعادلی استفاده شده در سیستم..... ۷۰
٤-۲- چگالی حالات سیستم..... ۷۲
٤-۳- محاسبه¬ی جریان..... ۷۳
٤-۳-۱- نمودار جریان بر حسب اعمال ولتاژ ثابت..... ۷٤
۳-۲-۲- نمودار جریان بر حسب اعمال ولتاژ خطی..... ۷۸
۳-۲-۳- نمودار جریان بر حسب تونل زنی تشدیدی..... ۷۹
نتیجه گیری..... ۸۱
منابع و مآخذ..... ۸۲

فهرست اشکال

عنوان صفحه

شکل(۱-۱) شبکه ی ساختاری شش گوشه ی گرافین.....۵

شکل(۱-۲) هیبرید sp^2 در گرافین.....٦

شکل(۱-۳) ساختار نواری گرافین ۹

شکل(۱-٤) نمای شماتیک از مفهوم کایرالیتی حول دو نقطه دیراک ۱۳

شکل(۱-۵) تونل زنی میرای کوانتومی از سد پتانسیل ۱٤

شکل(۱-٦) تصویر شماتیک از پراکندگی الکترون های دیراک از سد مربعی ۱٤

شکل(۱-۷) نمودارهای رنگی رفتار $T(\varphi)$ ۱٦

شکل(۱-۸) تونل زنی در گرافین و نیمرسانای معمولی ۱٦

شکل(۱-۹) تونل زنی در اتصال $p-n$ گرافینی.....۱۷

شکل(۱-۱۰) تونل زنی کلاین از سد پتانسیل را می توان بر حسب پایستگی دستوارگی درک کرد.....۱۸

شکل(۱-۱۱) ساختار شبکه ای نانو نوارهای گرافینی.....۲۰

شکل(۱-۱۲) a) طیف انرژی نانو نوار آرمچیر برای حالت رسانای بدون گاف b) طیف انرژی نانو نوار آرمچیر برای حالت نیمرسانای گاف دار.....۲۲

شکل(۱-۱۳) طیف انرژی نانو نوار زیگزاگ. نوار انرژی بدون گاف است و رفتار رسانایی دارد ۲٤

شکل(۲-۱) یک رسانا میان دو تماس ساندویچ شده است،تماس ها بدون انعکاس فرض می شوند.....۲٦

شکل(۲-۲) رسانایی که توسط دو هادی به دو تماس بزرگ وصل شده است و احتمال ترابردT دارد....۳۰

شکل(۲-۳) a) یک رسانا که از طریق دو کانال به دو اتصال بزرگ وصل است. (b) توزیع انرژی الکترون‌های ورودی به دو کانال، در دمای صفر. (c)توزیع انرژی در دمای غیر صفر ۳٤

شکل(۲-٤) ترازهای گسسته ی کانال کوانتومی محدودشده بین سدهای پتانسیل ۳۹

شکل(۲-۵) ولتاژ مثبت V_D، پتانسیل الکتروشیمیایی drain را نسبت به source پایین‌تر می‌آورد..... ٤۱

شکل(۲-٦) شار ورودی و خروجی در یک سیستم چند ترازی ٤٤

شکل(۲-۷) جریان خالص عبوری از سیستم دو تماسی ٤۵

شکل(۳-۱) یک سیم نیمه بی نهایت یک بعدی متصل به کانال..... ۵۰

شکل(۳-۲) توابع موج الکترون‌های داخل تماس توابع موج تماس سرریز خواهند کرد و منجر به تابع موج $\{\psi\}$ در داخل کانال و امواج پراکنده‌ی $\{X\}$ در تماس خواهند شد..... ۵۲

شکل(۳-۳) یک کانال با تک تراز انرژی ε به منبعی با چگالی ترازهای (ε_n) وصل شده است ۵٦

شکل(۳-٤) تابع گرین retarded در سیم بی نهایت یک بعدی..... ۵۸

شکل(۳-۵) تابع گرین advanced در سیم بی نهایت یک بعدی ۵۹

شکل(۳-٦) کانال متصل شده به دو تماس..... ٦٤

شکل(٤-۱) کانال نیمرسانای متصل به دو الکترود رسانای سورس و درین..... ٦۷

شکل(٤-۲) سهم خودانرژی الکترود های سورس و درین در کانال..... ۷۱

شکل(٤-۳) با اعمال ولتاژ به سیستم جریان برقرار می شود ۷٤

شکل(٤-٤) پروفایل کانال با گاف انرژی بزرگتر از V_D ۷٤

شکل(٤-۵) با اعمال H_{dop} بر هامیلتونی نوار رسانش و ظرفیت پایین تر می آیند ۷٦

شکل(٤-٦) کانال رسانا بدون گاف انرژی ۷۷

شکل(٤-۷) اعمال ولتاژ متغیر خطی به کانال نیم رسانای نوعn..... ۷۸

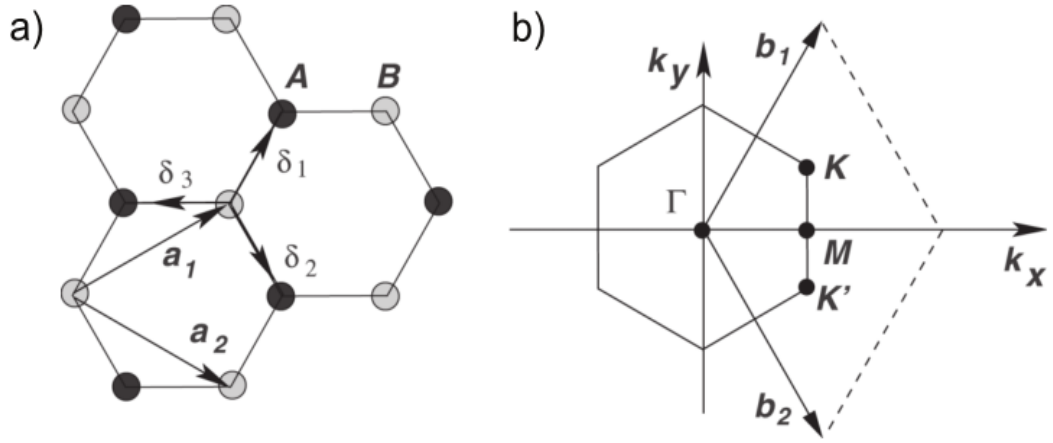
شکل(٤-۸) اعمال ولتاژ متغیر خطی به کانال نیم رسانای نوع p..... ۸۰

فصل اول

گرافین

۱-۱- ساختار نواری گرافین

گرافین یک ورقه‌ی پکیده شده از اتمهای کربن است که در یک ساختار شبکه‌ای شش گوشه، کنار هم مرتب شده‌اند (شکل ۱-۱).



شکل (۱-۱): a) شبکه‌ی ساختاری شش گوشه‌ی گرافین.شبکه ی براوه شامل دو اتم کربن (A, B) در هر یاخته ی واحد است. a_1 و a_2 بردارهای شبکه هستند. b) شبکه‌ی وارون گرافین با بردارهای وارون b_1 و b_2.

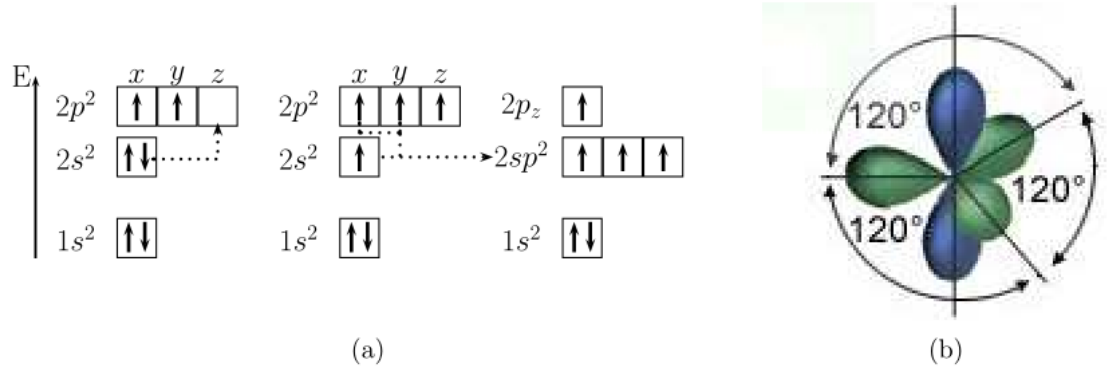
از آنجایی که کربن عنصر گروه ششم جدول تناوبی است، هر اتم در آن شش الکترون دارد. دو الکترون داخلی الکترونهای هسته (اربیتال$1s^2$) و چهار الکترون بیرونی، الکترونهای ظرفیت می‌باشند (اربیتالهای $2s^22p^2$). الکترونهای مرکزی به طور قوی مقید به هسته هستند و واکنشی با اتمهای همسایه ندارند. به عبارت دیگر، الکترونهای ظرفیت با اتمهای کربن اطراف واکنش انجام می‌دهند. بنابر این خواص شیمیایی و الکتریکی گرافین توسط الکترونهای ظرفیت تعیین می‌شود.

الکترونهای ظرفیت اتم کربن به فرم اربیتالهای $2p_y$, $2p_x$, 2s , و $2p_z$ است. این اربیتالها همچون نوارهای کووالانس بین اتمهای همسایه در یک مولکول یا یک شبکه بیان می‌شوند. در فرآیند ایجاد این نوارها، اربیتال 2s با اربیتالهای 2p به فرم اربیتالهای sp^n هیبرید می‌شوند که در آن n=1, 2, 3. برای این امر سه فرآیند هیبرید ممکن است:

هیبرید شدن اربیتالهای sp^1 همانند استیلن(HC=CH) که اربیتالهای 2s کربن با یک اربیتال p هیبرید می شود و دو اربیتال هیبریدی sp به دست می‌آید و دو اربیتال p نیز دست نخورده باقی می‌ماند.

هیبرید شدن اربیتالهای sp^2 همانند گرافیت، نانو لوله‌های کربن[1]، فولرنس[2] و گرافین که یک اربیتال 2s با دو اربیتال 2p هیبرید می‌شود و سه اربیتال sp^2 به دست می‌آید و یک اربیتال 2p دست نخورده باقی می‌ماند. سه اربیتال sp^2 با زاویه‌ی ۱۲۰ درجه در صفحه قرار می‌گیرند و اربیتال p دست نخورده بر این صفحه عمود است. هنگامی که دو کربن دارای هیبرید sp^2 به یکدیگر نزدیک می‌شوند بر اساس نظریه‌ی پیوند ظرفیتی با همپوشانی sp^2-sp^2 یک پیوند σ تشکیل خواهند داد. به طور همزمان اربیتالهای هیبرید نشده‌ی p نیز با وضعیت هندسی مناسب برای همپوشانی از پهلو به هم نزدیک می‌شوند و یک پیوند π تشکیل می‌دهند (شکل ۱-۲).

هیبرید شدن اربیتال sp^3 همانند الماس که اربیتال s با سه اربیتال p هیبرید می‌شود و چهار اربیتال sp^3 به دست می‌آید.



شکل (۱-۲): هیبرید sp^2 در گرافین. a) اشغال اربیتال های اتمی در فرآیند هیبرید b) ساختار اربیتالی بعد از هیبرید، اربیتال های σ به رنگ قهوه ای و اربیتال های π به رنگ آبی نشان داده شده اند[۹].

۱-۱-۱- مدل تنگ بست[3] در گرافین

در این بخش روی هیبرید sp^2 در گرافین و نتایج خصوصیات الکتریکی آن متمرکز می‌شویم. برای هر اتم کربن در گرافین، اربیتالهای $2p_x$ و $2p_y$ با اربیتالهای 2s هیبرید می‌شوند و سه نوار sp^2 با اتمهای همسایه تشکیل می‌دهند که نوار σ نامیده می‌شود و صفحه‌ای در روی ورقه ی گرافین است(صفحه‌ی xy).

اربیتال $2p_z$ باقیمانده بر ورقه‌ی گرافین عمود است. اتمهای همسایه اربیتال p_z خود را به اشتراک می‌گذارند و نتیجه‌ی آن نوارهای π و π^* می‌باشد. این الکترونها به طور ضعیف مقید به اتم می‌باشند بنابراین

[1] nanotubes
[2] fullerenes
[3] Tight binding

همانند الکترونهای آزاد یا الکترونهای رسانش در نظر گرفته می‌شوند. رابطه‌ی پراکندگی برای نوارهای π و$*\pi$ از گرافین را می‌توان به وسیله‌ی استفاده از روش تنگ بست محاسبه کرد[۱۰].

شبکه‌ی براوه[4] گرافین شامل یک یاخته‌ی واحد با پایه‌ی دو اتم کربن می‌باشد که بردارهای شبکه‌ای به صورت زیر:

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

$$a_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}) \qquad (۱-۲)$$

که a در آن فاصله‌ی بین اتم داخلی است($c\text{-}c=1.24A^0$). بردارهای شبکه وارون این شبکه به صورت زیر است:

$$b_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}) \qquad (۱-۳)$$

$$b_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}) \qquad (۱-٤)$$

در شکل (۱-۲) منطقه‌ی اول بریلوئن گرافین نشان داده شده است که دارای نقاط متقارن در فضای تکانه می‌باشد و نقاط زیر در آن مشخص است:

$K'=(\frac{2\pi}{3a},-\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a})$ ،$K=(\frac{2\pi}{3a},\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a})$ ،$M=(\frac{2\pi}{3a},0)$ ،$\Gamma=(0,0)$

حالت ویژه‌ی $|\psi>$ الکترون و انرژی E_k مربوط به آن با حل معادله‌ی شرودینگر به دست می‌آید. معادله‌ی شرودینگر به شکل زیر است:

$$H|\psi>=E_k|\psi> \qquad (۱-۵)$$

که در آن H هامیلتونی تنگ بست است. تابع موج الکترون باید در شرایط بلوخ صدق کند، به این معنی که تحت انتقال بردارهای شبکه کریستال باید رابطه‌ی مقابل برقرار باشد:

$$\psi(r+R) = e^{ik.R}\psi(r) \qquad (۱-٦)$$

برای $R \in G$ که G برای تمامی بردارهای شبکه دلالت می‌کند($R=na_1+ma_2$ با m و n صحیح).

از آنجایی که گرافین، دو اتم در یاخته‌ی واحد دارد (A و B)، تابع موج را می‌توان به صورت زیر نوشت:

[4] Bravais lattice

$$\psi(k,r) = \frac{1}{\sqrt{N}}\left(c_A \sum_{R_A}^{N} e^{ik.R_A}\phi_A(r-R_A) + c_B \sum_{R_B}^{N} e^{ik.R_B}\phi_B(r-R_B)\right) \quad (۱-۷)$$

که N تعداد یاخته‌های واحد در شبکه، R_A(B)R_B بردارهای شبکه از زیر شبکه‌ی A(B)، ϕ_A(B)ϕ_B تابع موج اتم مربوط به زیر شبکه‌ی A(B) می‌باشند. رابطه‌ی پراکندگی انرژی برای تابع موجهای هر دو زیر شبکه می‌تواند با استفاده از رابطه‌های (۱-۸) و (۱-۹) محاسبه شود.

$$< \phi_A|H|\psi >= E_K < \phi_A|\psi > \quad (۱-۸)$$

$$< \phi_B|H|\psi >= E_K < \phi_B|\psi > \quad (۱-۹)$$

در تقریب اول تنها بر هم کنش همسایگان نزدیک نیاز است تا در روش تنگ بست در نظر گرفته شود. به این خاطر که ترمهای بر هم کنش مربوط به اتم‌های با فاصله‌ی دور نسبتا کوچک می‌باشند. اگر از تابع موج معادله‌ی (۱-۷) و سپس از معادله‌ی (۱-۸) استفاده کنیم می‌توان رابطه‌ی (۱-۱۰) را استخراج نمود.

$$c_A < \phi_A|H|\phi_A > + c_B < \phi_A|H|\phi_B > \left(1 + e^{-ik.a_1} + e^{-ik.a_2}\right) = \quad (۱-۱۰)$$
$$E_K\left(c_A < \phi_A|\phi_A > + c_B < \phi_A|\phi_B > \left(1 + e^{ik.a_1} + e^{ik.a_2}\right)\right)$$

و هم چنین با استفاده از رابطه‌ی (۱-۹) می‌توان معادله‌ی (۱-۱۱) را به دست آورد.

$$c_B < \phi_B|H|\phi_B > + c_A < \phi_B|H|\phi_A > \left(1 + e^{ik.a_1} + e^{ik.a_2}\right) = \quad (۱-۱۱)$$
$$E_K\left(c_B < \phi_B|\phi_B > + c_A < \phi_B|\phi_A > \left(1 + e^{ik.a_1} + e^{ik.a_2}\right)\right)$$

در این معادلات، $< \phi_A|\phi_A >=< \phi_B|\phi_B >= 1$ و انرژی مکانی به صورت $< \phi_A|H|\phi_A >=< \phi_B|H|\phi_B >= 0$ تعریف می‌شود. بعلاوه ، ماتریس انتقال بین همسایگان نزدیک Υ_0 است و داریم:

$$\square_0 =< \phi_A|H|\phi_B >=< \phi_B|H|\phi_A >\approx 2.8ev$$

هم چنین ماتریس هم‌پوشانی بین همسایگان نزدیک B_0 است که داریم:

$$B_0 =< \phi_A|\phi_B >=< \phi_B|\phi_A >= 0$$

در نتیجه می‌توان معادله‌ی شرودینگر را به وسیله‌ی معادله‌ی ماتریس (۱-۱۲) تقریب زد.

$$\begin{pmatrix} 0 & \left(1+\mathrm{e}^{\mathrm{ik.a_1}}+\mathrm{e}^{\mathrm{ik.a_2}}\right)\Upsilon_0 \\ \left(1+\mathrm{e}^{-\mathrm{ik.a_1}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{ik.a_2}}\right)\Upsilon_0 & o \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} = E_K \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} \qquad (۱-۱۲)$$

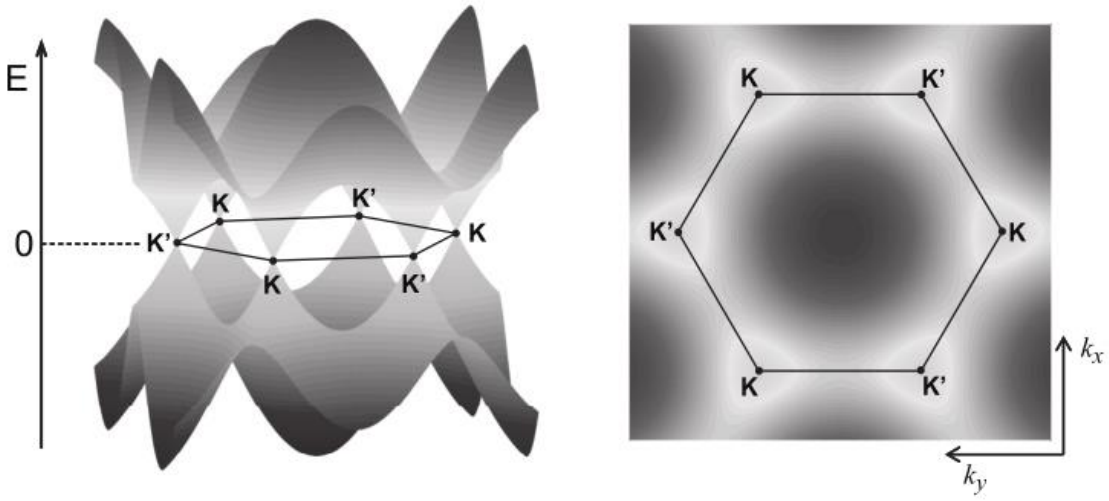
ویژه مقدار مربوط به این ماتریس به صورت زیر است:

$$E(k_x,k_y) = \pm\Upsilon_0\sqrt{1+4\cos\left(\frac{3ak_x}{2}\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}ak_y}{2}\right)+4cos^2\left(\frac{\sqrt{3}ak_y}{2}\right)} \qquad (۱-۱۳)$$

دو نوار متمایز شده است: نوار π برای E<0 و π^* برای E>0.

هر دو نوار در نقاط متقارن K به هم وصل هستند، که این نقاط گوشه‌های منطقه‌ی اول بریلوئن هستند. اگرچه این نقاط شش عدد می‌باشند، تنها دو عدد از این نقاط مستقل‌اند. نقاط K و K'. که در شکل (۱-۲) نشان داده شده‌اند.

از آنجایی که دو الکترون آزاد در هر یاخته‌ی واحد وجود دارد، نوار π که نوار ظرفیت است کاملا پر می‌باشد و نوار π^* که نوار رسانش است کاملا خالی می‌باشد. در نتیجه انرژی فرمی دقیقا در نقاط K و k' است(در E=0).



شکل (۱-۳): ساختار نواری گرافین، که نوار ظرفیت و رسانش را نشان می دهد. سطح فرمی در نقاط K' و K هست، که نوارهای ظرفیت و رسانش همدیگر را لمس می کنند (در E=0) [۱۱].

۱-۱-۲- حالتهای الکتریکی در حد انرژی پایین

حالتهای الکتریکی نزدیک انرژی فرمی (E=0) ویژگی‌های ترابرد الکتریکی الکترون‌های رسانش گرافین را تعیین می‌کنند. بنابراین، حالتهای الکتریکی نزدیک K و K' در حد انرژی پایین را در نظر می-

گیریم. از آنجایی که حالتهای الکتریکی در هر دو شیار به هم وصل نمی‌باشند، حالتهای الکتریکی در هر شیار می‌تواند جداگانه به وسیله‌ی استفاده از هامیاتونی موثر برای هر شیار مطالعه شود. اگر $K = K +\mathrm{k}$ و $K'=K'+\mathrm{k}$ با $\mathrm{k}<<K', K$ باشد می‌توان هامیلتونی تنگ بست را به صورت زیر تقریب زد:

$$H_{K,K'} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{3\Upsilon_0 a}{2}(k_x - ik_y) & 0 & 0 \\ \frac{3\Upsilon_0 a}{2}(k_x + ik_y) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{3\Upsilon_0 a}{2}(k_x + ik_y) \\ 0 & 0 & \frac{3\Upsilon_0 a}{2}(k_x - ik_y) & 0 \end{bmatrix} \quad (۱-۱٤)$$

هر کدام از هامیلتونی‌های موثر روی دو مولفه‌ی تابع موج $(\phi_A, \phi_B)^T$ عمل می‌کنند که ϕ_A و ϕ_B به ترتیب مولفه‌های تابع موج Ψ در زیر شبکه‌های A و B می‌باشند. این هامیلتونی‌های موثر یک رابطه پراکندگی خطی به دست می‌دهند:

$$\varepsilon_k = \pm\left(\frac{3\Upsilon_0 a}{2}\right)|k| = \pm\hbar v_f|k| \quad (۱-۱٥)$$

طبق نتیجه مقدار سرعت فرمی ثابت است و $v_f = \frac{3\Upsilon_0 a}{2} \approx 10^{-6}\frac{m}{s}$.

حاصل این هامیلتونی یک ساختار نواری مخروطی شکل در نقاط K و K' می‌باشد (شکل۱-۳).

ویژگی‌های الکتریکی اساسی گرافین با بررسی توابع موج الکتریکی معلوم می‌شود. هامیلتونی‌های موثر دو مولفه‌ی تابع موج برای هر شیار به دست می‌دهد.

$$\psi_{\pm}, K'(k) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\frac{\theta_k}{2}} \\ \pm e^{-i\frac{\theta_k}{2}} \end{pmatrix} \text{ و } \psi_{\pm}, K(k) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta_k}{2}} \\ \pm e^{i\frac{\theta_k}{2}} \end{pmatrix} \quad (۱-۱٦)$$

که در آن $\theta_k = arctan\left(\frac{k_x}{k_y}\right)$ زاویه‌ی بردار موج k در فضای تکانه است. حالت‌ها با علامت‌های $\pm$ به انرژی‌های $\varepsilon_k = \pm\hbar v_f|k|$ مربوط می‌باشند.

۱-۲- خواص الکتریکی گرافین

چیزی که تحقیق روی گرافین را جذاب می کند این است که طیف آن خیلی شبیه به طیف دیراک برای بدون جرم است. معادله دیراک ذرات کوانتومی نسبیتی با اسپین ۱/۲، مانند الکترونها را توصیف می کند. خصوصیت اساسی طیف دیراک که از اصول پایه مکانیک کوانتومی و نظریه نسبیت نتیجه می شود امکان وجود پاد ذرات است. به طور خاص حالات با انرژی ها ی مثبت و منفی (الکترون ها و پوزیترون[۵] ها)، به طور مطلوبی به هم مربوط هستند(همیوغند) و با مولفه های مختلف یک تابع حالت اسپینوری توصیف می شوند.

این خصوصیت اساسی معادله دیراک اغلب به تقارن همیوغ- بار شناخته می شود. برای ذرات دیراک با جرم m ، یک گاف انرژی بین کمینه انرژی الکترون($E_0 = mc^2$) و انرژی بیشینه پوزیترون ($-E_0$) وجود دارد. وقتی انرژی الکترون $E \rangle\rangle E_0$ باشد، انرژی به صورت خطی با بردار موج وابسته است. برای فرمیون دیراکی بدون جرم گاف انرژی صفر است و این رابطه پاشندگی خطی $E = v_f \hbar |\kappa|$ در هر انرژی برقرار است. در این حالت انرژی، ارتباط درونی بین اسپین و حرکت ذرات وجود دارد. اسپین فقط می تواند در راستای انتشار (برای ذره) یا خلاف آن (برای پاد ذره) جهت گیری کند. در عوض، اسپین ۱/۲ ذرات جرم دار می توانند در هر راستایی دو مقدار تصویر شده داشته باشد. حالتهای حامل جریان در بالای انرژی صفر، الکترون مانند بوده دارای بار منفی هستند. در انرژی های منفی، اگر نوار ظرفیت، پر نباشد حالتهای الکترونی پر نشده مانند شبه ذرات باردار مثبت (حفره ها) رفتار می کنند که هم ارز ماده چگالی پوزیترون ها هستند. یعنی در گرافین الکترونها و حفره ها خصوصیات مشابه تقارن همیوغ- بار در الکترودینامیک کوانتومی (QED)از خود نشان می دهند [۱۲]. حقیقت این است که اینجا با یک موقعیت یکتا روبرو هستیم: ذارت باردار بدون جرم. هر چند این یک مثال معروف در کتب مربوط بوده ولی مثال واقعی آن تا به حال موجود نبوده است.

اینکه حمل بار الکتریکی در گرافین شبیه طیف دیراک توصیف می شود و نه معادله شرودینگر معمولی غیر نسبیتی، می تواند نتیجه ای از ساختار بلوری گرافین باشد. چنین مطلبی با گرافین که از دو زیر شبکه A و B ساخته می شود، سازگار است. پرش کوانتومی الکترونها بین دو زیر شبکه و تقاطع این دو نزدیک لبه های منطقه بریلوین یک توزیع انرژی مخروطی می دهد. شبه ذرات در گرافین، یک رابطه پاشندگی خطی نشان می دهند($E = v_f \hbar |\kappa|$) که اگر این ذرات بدون جرم را نسبیتی در نظر بگیریم سرعت فرمی نقش سرعت نور را بازی می کند $(v_f = \frac{c}{300})$. به خاطر طیف خطی در گرافین، انتظار می رود که شبه ذرات رفتاری متفاوت نسبت به آنچه در فلزات معمولی و نیمه رساناها می شناسیم، داشته باشند که در

[۵] Positron

این حالت رابطه پاشندگی به صورت سهمی تقریب زده می شود. در اینجا می توان ویژگی های جالبی از گرافین به خاطر وجود گاف صفر انتظار داشت: همانطور که گفته شد فرمیونها در گرافین در نزدیکی نقاط دیراک بدون جرم اند. به خاطر اینکه انرژی پیوندی در این نقاط خطی می شود پس مشتق دوم آن صفر است، به این معنی که فرمیون ها جرم ندارند پس سرعت گروه آنها ثابت می باشد و سرعت گروه حرکت الکترونها و حفره ها به صورت متقارن اند و نزدیک به یک صدم سرعت نور در خلا است که در مقایسه با سرعت نیمه هادی های دیگر عدد بسیار بزرگی است. به خاطر اینکه در گرافین ذرات بدون جرم اند و برهمکنش قابل توجهی با ماده ندارند، لذا حرکت ذرات راحت تر صورت می گیرد. عملا خیلی از کاربردهایی که از ابررساناها با دردسر در دمای پایین انتظار داریم گرافین در دمای اتاق به ما بدهد و رسانای الکتریکی بسیار بالایی دارد با وجود اینکه چگالی حجم حامل های بار بسیار پایین است. این پایین بودن چگالی حجم به این علت است که تنها یک لایه در دسترس داریم، اما چون موبیلیته[۶] همین ذرات در دسترس زیاد است، جریان به تعداد اتم در واحد سطح، وجود دارد. بنابراین مقاومت ویژه آن در دمای اتاق در در مقایسه با هادی های ذاتی مقدار بالایی دارد که این به طور عمده به نداشتن گاف مربوط می شود.

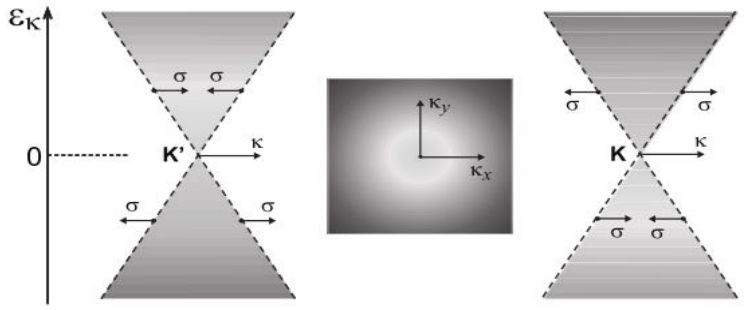
۱-۲-۱ کایرالیتی[۷]

در گرافین اندیس اسپین نه به اسپین واقعی الکترونها بلکه به زیر شبکه موسوم به شبه اسپین اشاره دارد. از اینجا می توان مفهوم کایرالیتی را معرفی کرد [۱۳] که تصویر شبه اسپین در راستای حرکت (با تکانه $p^{\rightarrow}$) بوده و به صورت زیر تعریف می شود :

$$h_{p^{\rightarrow}} = \sigma^{\wedge}.\frac{p^{\rightarrow}}{|p|} \qquad (۱-۱۷)$$

به این ترتیب الکترونها (حفره ها) در حالتهای با انرژی مثبت و منفی نسبت به نقطه دیراک به ترتیب دارای کایرالیتی مثبت و منفی (منفی و مثبت) هستند، به این معنی که در مورد الکترونهای نوار رسانش و ظرفیت (و نیز برای حفره های نوار رسانش و ظرفیت)، شبه اسپین به ترتیب در جهت تکانه و در خلاف جهت تکانه قرار می گیرد. شکل زیر کایرالیتی الکترونها و حفره ها را برای نقاط K و K' گرافینی نشان می دهد. (کایرالیتی نقطه K' وارون نقطه K می باشد)

[۶] mobilite
[۷] Chirality



شکل (۱-٤) : نمای شماتیک از مفهوم کایرالیتی حول دو نقطه دیراک شامل راستاهای شبه اسپین و تکانه .

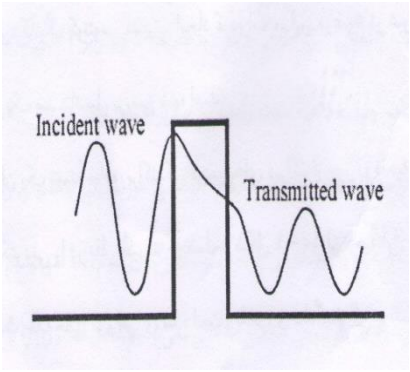
۱-۲-۲- تونل زنی ذرات کایرال

ماهیت کایرالیتی شبه ذرات در گرافین، نوع جدیدی از تونل زنی کوانتومی در سیستم های ماده چگال معرفی می کند که وجود سدهای پتانسیل بزرگ را کم اهمیت می نماید. به این ترتیب فیزیک ادوات الکترونیکی مبتنی بر گرافین، مانند ترانزیستورها، دیودها و غیره را تحت تاثیر قرار می گیرد [١٤]. در ادامه این بخش، به معرفی این تونل زنی و مقایسه آن با ساختارهای غیرگرافینی می پردازیم.

تونل زنی[۸] کوانتومی

تونل زنی کوانتومی نتیجه قوانین بسیار عمومی مکانیک کوانتومی به نام روابط عدم قطعیت[۹] هایزنبرگ است. یک ذره کلاسیکی نمی تواند از میان ناحیه با انرژی پتانسیل بیشتر از انرژی کل ذره منتشر شود، اما به خاطر اصل عدم قطعیت، اندازه گیری همزمان مقادیر دقیق مکان و سرعت ذرات کوانتومی و در نتیجه انرژی جنبشی و پتانسیل آنها امکان پذیر نیست. بنابراین نفوذ از میان نواحی ممنوعه کلاسیکی(سدهای پتانسیل) امکان پذیر است (شکل۱-۵). این پدیده اولین بار توسط اساکی[۱۰] به طور وسیعی در الکترونیک پیشرفته به کار برده می شود [۱۵].

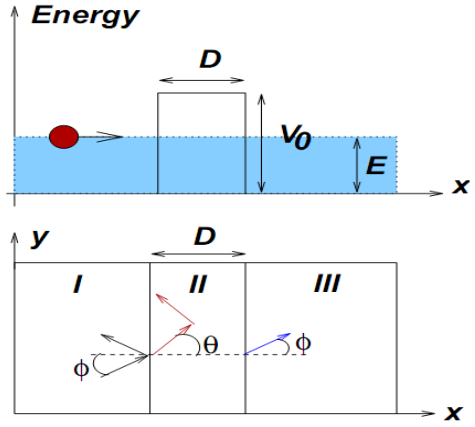
[۸] Tunneling
[۹] Heisenberg uncertainty principle
[۱۰] Esaki



شکل (۱-۵) : تونل زنی میرای کوانتومی از سد پتانسیل ؛ موج فرودی از سمت چپ به سد، با عبور میرا از میان سد، با دامنه کوچکتر، از سمت راست سد خارج می شود[۱۵].

۱-۲-۳- پارادوکس کلاین[۱۱]

در تونل زنی الکترون از میان یک سد پتانسیل، احتمال عبور، به طور نمایی با ارتفاع و عرض سد، کم می شود. در گرافین، احتمال عبور برای الکترون هایی که به طور عمود به سد برخورد می کنند، صرفنظر از ارتفاع و عرض سد، همیشه برابر۱ است [۱۶-۱۷] .در الکترودینامیک کوانتومی، این رفتار به پارادوکس کلاین موسوم است. این پدیده معمولا به یک فرایند غیر شهودی نسبیتی اتلاق می شود که در آن، الکترون فرودی از میان سدی با ارتفاع بیش ۲ برابر انرژی سکون خود، mc^2 عبور می کند. در این مورد احتمال عبور فقط به طور ضعیفی به ارتفاع سد بستگی دارد و در حد سدهای بسیار بزرگ به عبور کامل میل می کند.



شکل (۱-۶) : شکل بالا: تصویر شماتیک از پراکندگی الکترون های دیراک از سد مربعی. شکل پایین: نمایش زوایای استفاده شده θ,φ در فرمول بندی پرکندگی در سه ناحیه I,II,III [۱].

[۱۱] Klein Paradox

تابع موج در ناحیه اول به این شکل است که r ضریب بازتاب است:

$$\psi_I(r)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ s\exp(i\varphi)\end{pmatrix}\exp(i\kappa_x x+i\kappa_y y)+\frac{r}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ s\exp(i(\pi-\varphi))\end{pmatrix}\exp(-i\kappa_x x+i\kappa_y y)$$

(۱–۱۸)

که در این ناحیه زوایا و توابع موج به این شکل تعریف می شوند:

$$\varphi=\arctan(\frac{\kappa_y}{\kappa_x})\ ,\ \kappa_x=\kappa_f\cos(\varphi)\ ,\ \kappa_y=\kappa_f\sin(\varphi)$$

(۱–۱۹)

برای ناحیه دوم تابع موج و پارامتر های آن به این صورت است:

(۱–۲۰)

$$\psi_{II}(r)=\frac{a}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ s'\exp(i\theta)\end{pmatrix}\exp(iq_x x+i\kappa_y y)+\frac{b}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ s'\exp(i(\pi-\theta))\end{pmatrix}\exp(-iq_x x+i\kappa_y y)$$

$$\theta=\arctan(\frac{\kappa_y}{q_x})\ ,\ q_x=\sqrt{\frac{(V_0-E)^2}{v_f^2-\kappa_y^2}}$$

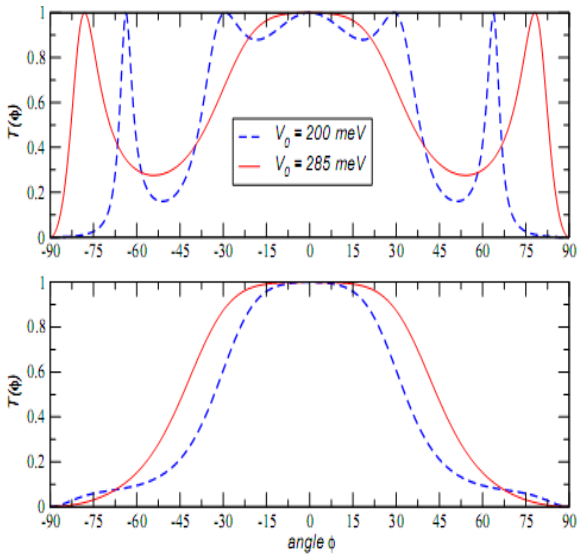
برای ناحیه سوم:

$$\psi_{III}(r)=\frac{t}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ s'\exp(i\varphi)\end{pmatrix}\exp(i\kappa_x x+i\kappa_y y)$$

(۱–۲۱)

$$s=\mathrm{sgn}(E)\ ,s'=\mathrm{sgn}(E-V_0)$$

(۱–۲۲)



شکل (۱-۷) : نمودارهای رنگی رفتار $T(\varphi)$ را نشان می دهند، برای دو مقدار پتانسیل $V_0 = 200mev, V_0 = 285mev$ در نمودار بالایی $D = 110nm$ و برای نمودار پایینی $D = 50nm$ و $E = 80mev$, $\kappa_f = \frac{2\pi}{\lambda}$, $\lambda = 50nm$. [۱۸]

با اعمال شرط مرزی $\psi_I(x=0,y) = \psi_{II}(x=0,y)$, $\psi_{II}(x=D,y) = \psi_{III}(x=D,y)$ و با استفاده از رابطه $T(\varphi) = tt^*$ می رسیم به:

$$T(\varphi) = \frac{\cos^2(\theta)\cos^2(\varphi)}{\left[\cos(Dq_x)\cos(\varphi)\right]^2 + \sin^2(Dq_x)(1 - ss'\sin(\varphi)\sin(\theta))^2} \qquad (۱-۲۳)$$

همانطور که از فرمول بالا می بینیم به ازای $(\varphi \to 0, \theta \to 0)$ و مستقل از هر مقدار برای Dq_x مقدار $T(\varphi)$ برابر یک است.