

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



## گروه مهندسی اپتیک و لیزر

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک گرایش اتمی - مولکولی

عنوان پایان نامه:

پارادوکس کلین در سدهای چندگانه‌ی ناهمگن گرافن

اساتید راهنما:

دکتر حسین لطفی

دکتر آرش فیروزنیا

پژوهشگر:

اکبر رشیدی

شهریور ۱۳۹۱

کلیه حقوق مادی مرتبط بر نتایج مطالعات، ابتکارات و نوآوری‌های ناشی از تحقیق موضوع این پایان‌نامه متعلق به دانشگاه بناب است.

نام خانوادگی: رشیدی

نام: اکبر

عنوان پایان نامه: پارادوکس کلین در سدهای چندگانه‌ی ناهمگن گرافن

اساتید راهنما: دکتر حسین لطفی، دکتر آرش فیروزنیا

مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد رشته: فیزیک گرایش: اتمی-مولکولی

دانشگاه: بناب تاریخ فارغ التحصیلی: تعداد صفحه: ۸۱

کلید واژه ها: احتمال عبور، پارادوکس کلین، گرافن، ماتریس انتقال، سد الکترواستاتیکی

چکیده:

در این پایان نامه، خواص فیزیکی و نوارهای انرژی ویژه‌ی گرافن توضیح داده شده و در ادامه پارادوکس کلین در گرافن، با استفاده از معادله‌ی دیراک را مطالعه کرده‌ایم. مجموعه‌ای از تعدادی سد الکترواستاتیکی، در دو حالت همگن و ناهمگن مشتمل بر دو شکل از پتانسیل افزایشی خطی و گاوسی که ارتفاع سدها و عرض چاهها ثابت است را در نظر می‌گیریم. با استفاده از روش ماتریس انتقال، احتمال عبور و رسانندگی تمام حالت‌ها بصورت عددی محاسبه شده‌اند. در هر دو مورد، در زاویه فرود مایل، میزان عبور و رسانندگی با افزایش تعداد سدها کاهش می‌یابد. در حالی که در زاویه فرود عمود، عبور کامل بدون امواج ناپایدار وجود دارد، که نتیجه‌ای از عدم وجود پراکندگی رو به عقب بر اساس پایستگی شبه اسپین است. در نهایت در می‌یابیم که احتمال عبور و رسانندگی به نحوی چیدمان و ارتفاع سدها وابسته است.

کربن ساختارهای هندسی مختلفی را به خود می‌گیرد، که برخی از آنها مانند الماس<sup>۱</sup> و گرافیت<sup>۲</sup> از زمانهای قدیم شناخته شده‌اند، و بعضی دیگر مانند فولرین<sup>۳</sup> ها و نانولوله‌ها از ۱۰-۲۰ سال پیش کشف شده‌اند. جالب است که شکل دو بعدی آن (گرافن<sup>۴</sup>) به تازگی به دست آمده است و به سرعت توجه زیادی را به خود جلب کرده است. در گرافن الکترونها از رابطه‌ی پاشندگی خطی تبعیت کرده و شبیه ذرات نسبیتی بدون جرم رفتار می‌کنند، این امر به مشاهده‌ی خواص الکترونی بسیار عجیب (از اثر کوانتومی هال غیرعادی تا نبود جایگزیدگی الکترونها) در این اولین ماده‌ی دوبعدی منجر می‌شود. گرافن همچنین پلی بین فیزیک ماده چگال و الکترودینامیک کوانتومی برقرار می‌کند و چشم‌انداز جدیدی از الکترونیک بر پایه‌ی کربن به روی ما می‌گشاید.

در این فصل ابتدا به شرحی از خواص فیزیکی گرافن می‌پردازیم و نوارهای انرژی و ویژه‌ی گرافن را با استفاده از مدل بستگی قوی<sup>۵</sup> در تقریب نزدیکترین همسایه بدست خواهیم آورد و در ادامه مروری بر پارادوکس کلین نسبیتی و امکان‌پذیری آن در گرافن خواهیم داشت.

---

<sup>1</sup> Diamond

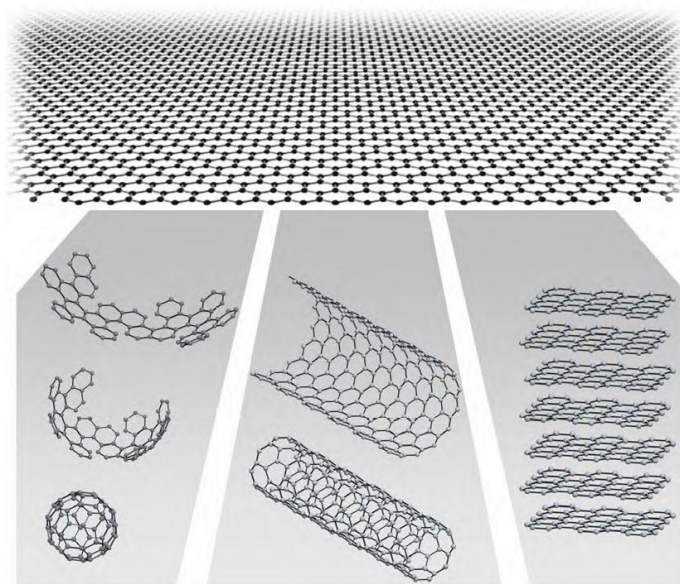
<sup>2</sup> Graphite

<sup>3</sup> Fullerene

<sup>4</sup> Nanotube

<sup>5</sup> Graphene

<sup>6</sup> Tight binding



شکل (۱-۱) ساختارهای کربن. بالا: گرافن، راست: گرافیت، وسط: نانوتیوب، چپ: فولرین [۳]

## ۱-۱) کشف گرافن

با گرافیت (ساختار کربنی سه‌بعدی) از حدود ۴۰۰ سال پیش آشنا بودیم. در طبیعت کربن خالص به دو شکل الماس و گرافیت یافت می‌شود، که خواص شیمیایی و فیزیکی کاملاً متفاوتی دارند. الماس عایق الکتریسیته و بسیار سخت می‌باشد، در حالیکه گرافیت رسانا و نرم می‌باشد. این تفاوتها ناشی از اتمهای کربن می‌باشد که به ذات کربن مربوط است چرا که اتمهای کربن این قابلیت را دارند که سمت‌گیریهای مختلفی بگیرند، یعنی می‌توانند هیبریدهای مختلفی را تشکیل دهند و بنابراین خواص فیزیکی و شیمیایی مختلفی داشته باشند. به بیان دیگر، یکی از جنبه‌های جالب شیمی کربن، توصیف حالت‌های الکترونیکی آن با حالت‌های خاص S و P هیدروژن‌گونه‌ی هیبرید<sup>۱</sup> شده است. این اوربیتال‌های هیبرید شده پیوندهای کووالانسی جهت‌داری را تشکیل می‌دهند که منجر به تعداد زیادی از ساختارها یا آلوتروپ‌های<sup>۲</sup> کریستالی مختلف می‌شود. شکل (۱-۱) بعضی از مهمترین ساختارهای کربن را نشان می‌دهد. بررسی دقیق‌تر این ساختارها نشان می‌دهد که همگی آنها دارای

<sup>۱</sup> هیبریداسیون یعنی اختلاط اوربیتالها، به نحوی که بعد از عمل اختلاط تعداد اوربیتالهای ایجاد شده با تعداد اوربیتالهای مخلوط شده برابر و انرژی و شکل آنها با هم یکسان باشد.

<sup>۲</sup>Allotrope

منشأ و اصل یکسانی بنام حلقه‌ی بنزن هستند. پائولینگ<sup>۱</sup> یکی از اولین دانشمندانی بود که طبیعت این ساختارها را فهمید. او در شاهکار دهه‌ی ۱۹۵۰ خود "ماهیت پیوند شیمیایی"، توضیح داد که گرافیت (تنها ساختاری که تا آن زمان شناخته شده بود، نمونه‌های دیگر در ۵۰ سال بعدی کشف شد) از لایه‌هایی از مولکولهای گول‌پیکر که امروزه گرافن<sup>۲</sup> نامیده می‌شود، ساخته شده است. بیشتر اشکال کربن دارای داستان کشف جالبی هستند. آنها کاربردها و ویژگی‌های جالب توجهی دارند، مثلاً گرافن ماده‌ای است که در صنعت الکترونیک کاربردهای زیادی خواهد داشت [۱ و ۲].

نزدیک به هفتاد سال پیش دو فیزیکدان به نام‌های لاندائو<sup>۳</sup> و پیرلز<sup>۴</sup> استدلال کردند که کریستال اکیداً دوبعدی<sup>۵</sup> به لحاظ ترمودینامیکی ناپایدار است و نمی‌تواند وجود داشته باشد. نظریه‌ی آنها به این نکته اشاره داشت که سهم افت و خیزهای گرمایی در بلور با ابعاد کم، هم‌مرتبه و قابل مقایسه با فاصله‌ی اتمی ذرات در نقاط شبکه‌ای است. این بحث توسط مرمین<sup>۶</sup> توسعه داده شد و توسط مشاهدات تجربی دیگران تایید گردید. درحقیقت، دمای ذوب یک فیلم با کاهش ضخامت آن، شدیداً کاهش می‌یابد. تا اینکه در سال ۲۰۰۴ میلادی گرافن دو بعدی پایدار در آزمایشگاه گروه گایم<sup>۷</sup> ساخته شد. چنین لایه‌ی دو بعدی نه تنها پیوسته است بلکه یک بلور با کیفیت بالا است، به طوری که حامل‌های بار می‌توانند بدون پراکندگی مسافت حدود هزار برابر فاصله‌ی بین اتمی را بپیمایند. به عبارتی تحریک‌پذیری حامل‌ها بالاست. چنین ساختار بلوری با حذف ملایم بعد سوم به دست آمده است و شدیداً پایدار است با این حال می‌توان گفت نظریه‌ی مرمین همچنان معتبر است چرا که اولاً گرافن واقعاً یک صفحه‌ی تخت دوبعدی نیست<sup>۸</sup>، ثانیاً "گرافن همواره روی یک زیرلایه رشد داده می‌شود [۳]. جالب است بدانیم اینطور نیست که عنوان گرافن برای اولین بار در سال ۲۰۰۴ بعد از کشف آن بکار رفته باشد بلکه در سال ۱۹۴۶، بسیار قبل‌تر از کشف گرافن، والاس نظریه‌ی بستگی

<sup>1</sup> Linus Pauling

<sup>2</sup> Graphene

<sup>3</sup> Landau

<sup>4</sup> Peierls

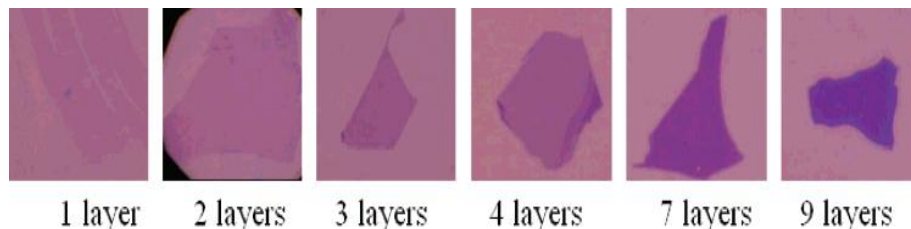
<sup>5</sup> strictly two-dimensional

<sup>6</sup> Mermin

<sup>7</sup> Geim

<sup>۸</sup> اگر بخواهیم راجع به فیزیک مربوط به سطح گرافن بحث کنیم، گرافن حرکت‌های خارج از سطح دارد یعنی در جهت Z مولفه دارد.

قوی ساختار باند گرافن را گسترش داد و خصوصیات غیرعادی آن را توضیح داد. ولی تا زمان کشف آن، گرافن تنها یک ماده‌ی تئوری<sup>۱</sup> بود [۴].



شکل (۲-۱) طیف صفحات گرافن با ضخامت‌های مختلف [۵].

## ۲-۱ جداسازی گرافن

روش جداسازی یک تک لایه‌ی گرافن از گرافیت به طریقه‌ی نسبتاً ساده‌ای انجام شده است. با استفاده از نوارچسب<sup>۲</sup>‌های معمولی ابتدا توده‌های مختلف گرافیت را از هم جدا می‌نمایند، سپس با تکرار این فرآیند جداسازی، که به جداسازی مکانیکی معروف است توده‌ی بسیار نازکی از گرافیت بدست می‌آید که با قرار دادن آن روی زیرلایه‌ی<sup>۳</sup> سیلیکونی امکان آشکار ساختن گرافن با توجه به طیف نوری زیرلایه‌ی سیلیکونی فراهم می‌شود. به این صورت که ماده‌ی زیرلایه تمامی رنگ‌های موجود در طیف رنگین‌کمان را منعکس می‌سازد طوری که با توجه به تغییر آن می‌توان گرافن را آشکار ساخت. از این‌رو با توجه به اینکه تک‌لایه‌های گرافیت طیف نوری خاصی را در مقایسه با توده‌های چندلایه به نمایش می‌گذارند می‌توان با استفاده از میکروسکوپ نوری به جستجوی گرافن پرداخت.

روش‌های مختلفی برای تولید گرافن وجود دارد، اما هیچکدام از آنها نمونه‌هایی به خالصی روش نوار چسب نمی‌دهد. در حال حاضر گرافن هنوز یکی از گرانترین مواد (به نسبت وزن آن) می‌باشد. یک شرکت نمونه‌هایی را برای تحقیقات طراحی کرده است برای نمونه‌ای بر روی اکسید سیلیکون به ازای هر میکرومتر مربع ۱/۱۵ دلار و به همان مقدار و بر روی زیر لایه‌ی رسانا ۴/۹۰ دلار

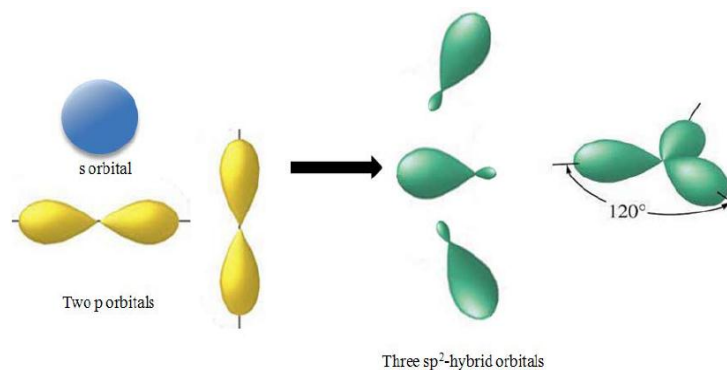
<sup>1</sup> Theoretical material

<sup>2</sup> Scotch tape

<sup>3</sup> Substrate



هزینه کرده است [۴]. اخیراً پژوهشگران دانشگاه آرکانزاس روشی برای تولید سیستماتیک و کنترل شده جهت تبدیل گرافیت به گرافن یافتند. برای این کار آنها از میکروسکوپ تونل‌زنی استفاده کردند. نتایج این تحقیق می‌تواند برای مطالعات بنیادین فیزیک نیز مفید باشد. همانطور که قبلاً نیز بیان شد، فیزیکدانان دانشگاه منچستر اولین کسانی بودند که گرافن را تولید کردند، آنها این ماده‌ی نازک را که ضخامتی در حد یک اتم دارد، با استفاده از چسب بدست آوردند. برای این کار محققان چسب را روی سطح گرافیت قرار داده و یک لایه از روی آن برداشتند. الکترون‌ها در گرافیت به دلیل ممانعت‌هایی بر سر راهشان به سختی حرکت می‌کنند این در حالی است که حرکت آنها در گرافن کاملاً آزادانه و بدون ممانعت است. این ویژگی موجب شده تا گرافن ماده‌ی ایده‌آلی برای استفاده در حوزه‌هایی نظیر محاسبات کوانتومی باشد با استفاده از گرافن می‌توان محاسبات بسیار پیچیده را با کمترین انرژی مصرفی انجام داد. با این حال گرافن ماده‌ی جدید بوده که به تازگی در سال ۲۰۰۴ کشف شده است، بنابراین موضوعات بسیاری درباره آن وجود دارد که هنوز برای دانشمندان شناخته شده نیست [۶].



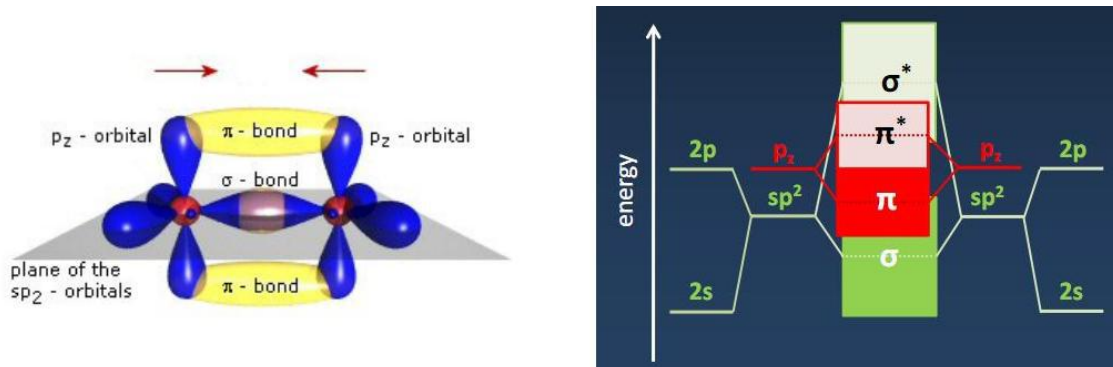
شکل (۳-۱) هیبریداسیون  $sp^2$  [۷]

### ۳-۱) گرافن و هیبرید $sp^2$

کربن ششمین عنصر از جدول تناوبی است و هر اتم کربن شش الکترون با پیکربندی  $1s^2, 2s^2, 2p^2$  از اوربیتال‌های اتمی دارد. بدین صورت که دو الکترون پوسته داخلی  $1s$  را پر می‌کنند که به هسته نزدیک‌ترند و در برهمکنش‌های شیمیایی بی‌تاثیر هستند، در حالی که چهار الکترون باقی مانده پوسته‌ی داخلی از اوربیتال‌های  $2s$  و  $2p$  را اشغال می‌کنند. به دلیل اینکه ترازهای انرژی اوربیتال‌های  $2s$  و  $2p$  دارای اختلاف انرژی کمی هستند، توابع موج الکترونیکی این چهار الکترون

می‌توانند با همدیگر ترکیب شوند، تغییر در پرشدن اوربیتال اتمی  $2s$  و اوربیتالهای اتمی  $2p$  انرژی پیوندی اتم کربن با اتمهای همسایه‌اش را زیاد می‌کند. این اوربیتالها، اوربیتالهای هیبریدی نامیده می‌شوند. در اتم کربن ترکیب اوربیتالهای  $2s$  و  $2p$  منجر به تشکیل هیبریدهای ممکن  $sp$ ،  $sp^2$  و  $sp^3$  می‌شود که بطور کلی هیبرید  $sp^n$  نامیده می‌شوند با  $n=1,2,3$ . اگر اوربیتالهای  $2p$  را با اوربیتال  $2s$  ترکیب کنیم، سه اوربیتال هیبریدی  $sp^2$  خواهیم داشت. این نوع پیوند هیبریدی از برهم‌نهی اوربیتال  $2s$  و دو اوربیتال  $2p$  که می‌توانند هر کدام از حالت‌های  $2p_x, 2p_y$  یا  $2p_z$  باشند، تشکیل یافته است که در شکل (۳-۱) نشان داده شده است.

همانگونه که از شکل (۴-۱) پیداست، حالتی که توسط این اوربیتالها ساخته می‌شوند در صفحه‌ی  $xy$  قرار دارند که با یکدیگر زاویه 120 درجه می‌سازند. اوربیتال باقی مانده  $2p_z$  که عمود بر صفحه‌ی  $xy$  است به سبب همپوشانی سر به سر با اوربیتال  $p_z$  اتمهای مجاور که توسط پیوندهای قوی کووالانسی به هم متصل هستند، پیوند ضعیف  $\pi$  (پای) را می‌سازند. به دلیل اینکه نوارهای پیوندی و ضد پیوندی  $\sigma$  از تراز فرمی به اندازه‌ی کافی دور هستند در نتیجه نقش چندانی را در محاسبات بازی نمی‌کنند شکل (۴-۱). تنها پیوندهای  $\pi$  باقی می‌مانند که در توصیف خصوصیات الکترونیکی گرافن مورد نیاز هستند. و از آنجایی که همپوشانی بین اوربیتالهای  $p_z$  و الکترونیهای  $s, p_x, p_y$  (به علت تقارن) صفر است، بنابراین الکترونیهای  $p_z$  که تشکیل پیوندهای  $\pi$  را در گرافن می‌دهند می‌توانند به طور مستقل از سایر الکترونیهای نوار والانس رفتار کنند [۸].



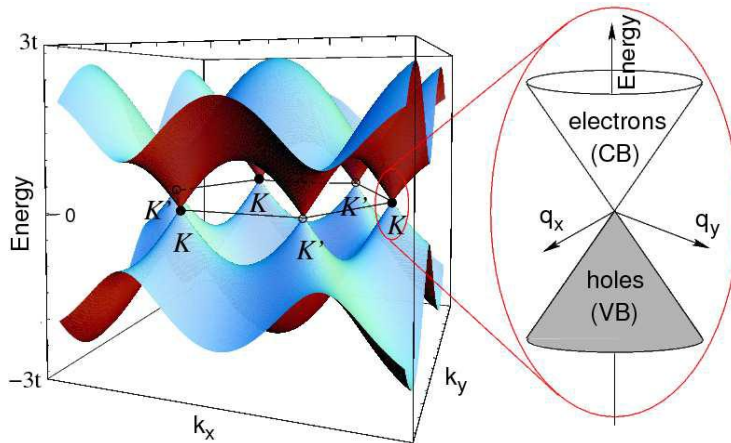
شکل (۴-۱): حالت‌های پیوندی و ضد پیوندی  $\pi$  در نزدیکی تراز فرمی قرار دارند ( $E_F$ ). پیوندهای  $\sigma$  برای پیش‌بینی خصوصیات الکترونیکی گرافن حول تراز فرمی قابل نظر می‌باشند.

#### (۴-۱) رابطه‌ی پاشندگی در گرافن

در این بخش با استفاده از مدل بستگی قوی، رابطه‌ی پاشندگی را برای حامل‌های بار در

گرافن بدست می‌آوریم.

همانگونه که قبلاً اشاره شد، گرافن دارای ساختار کریستالی است و همانگونه که می‌دانیم در صورتیکه ساختار از نوع کریستالی و پتانسیل حاکم بر سیستم از نوع پتانسیل دوره‌ای باشد توابع موج سیستم از نوع تابع بلوخ خواهد بود، با بیان این مطالب و با در نظر گرفتن اینکه در گرافن دو اتم A و B به ازای سلول واحد داریم تابع موج سیستم گرافنی را به صورت زیر می‌نویسیم [۸]:



شکل (۵-۱) رابطه‌ی پاشندگی انرژی برای گرافن، که در کل فضای منطقه‌ی اول بریلوئن رسم شده است و از جفت‌شدگی بین صفحات گرافن صرف‌نظر شده است. نوار  $\pi$  کاملاً پر است و با نوار  $\pi^*$  در نقاط  $\mathbf{k}$  و  $\mathbf{k}'$  برخورد می‌کند. نزدیک این نقاط هر دو نوار، پاشندگی خطی که در متن توضیح داده شده است را دارند [۹].

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = c_A(\mathbf{k}) \tilde{p}_z^A(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + c_B(\mathbf{k}) \tilde{p}_z^B(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (1-1)$$

که  $p_z$  ها بیان‌کننده‌ی تابع موج اوربیتال اتمی هستند و به صورت زیر معرفی می‌گردند:

$$\tilde{p}_z^A(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cells}}}} \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}} p_z(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A - \mathbf{l}), \quad (2-1)$$

$$\tilde{p}_z^B(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cells}}}} \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}} p_z(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B - \mathbf{l}), \quad (3-1)$$

که  $\mathbf{k}$  تکانه‌ی الکترون،  $N$  تعداد سلول واحد در ورقه‌ی گرافن،  $\mathbf{l}$  شاخص موقعیت سلول است. طیف انرژی با استفاده از معادله‌ی تعریف شده در مدل بستگی قوی به شکل یک ماتریس  $2 \times 2$  درمی‌آید:

$$\begin{pmatrix} H_{AA} - E & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} - E \end{pmatrix}, \quad (4-1)$$

که عناصر ماتریس به شکل زیر تعریف می‌شوند:

$$H_{AA}(\mathbf{k}) = \frac{1}{N_{\text{cells}}} \sum_{l,l'} e^{ik \cdot (l'-l)} \langle p_z^{A,l} | H | p_z^{A,l'} \rangle, \quad (5-1)$$

$$H_{AB}(\mathbf{k}) = \frac{1}{N_{\text{cells}}} \sum_{l,l'} e^{ik \cdot (l'-l)} \langle p_z^{A,l} | H | p_z^{B,l'} \rangle, \quad (6-1)$$

با یک سری محاسبات ساده و با در نظر گرفتن تنها برهمکنش با اتم‌های نزدیکترین همسایه (همسایه‌ی اول):

$$H_{AB}(\mathbf{k}) = \frac{1}{N_{\text{cells}}} \sum_{l,l'} e^{ik \cdot (l'-l)} \langle p_z^{A,l} | H | p_z^{B,l'} \rangle, \quad (7-1)$$

$$H_{AB}(\mathbf{k}) = \frac{N_{\text{cells}}}{N_{\text{cells}}} \left\{ \sum_{l'} e^{ik \cdot (l'-l)} \langle p_z^{A,l} | H | p_z^{B,l'} \rangle \right\}, \quad (8-1)$$

$$= \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{B,0} \rangle + e^{-ik \cdot a_1} \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{B,-a_1} \rangle + e^{-ik \cdot a_2} \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{B,-a_2} \rangle, \quad (9-1)$$

با در نظر گرفتن عبارت زیر

$$-\gamma_0 = \langle p_z^{A,l} | H | p_z^{B,l'} \rangle, \quad l=0, l'=0, -a_1, -a_2 \quad (10-1)$$

که  $\gamma_0$  انتگرال همپوشانی بین اولین همسایه‌های اوربیتال‌های  $\pi$ ، و مقدار آن بین 2.5- و 3- است [10].

$$H_{AB} = -\gamma_0 (1 + e^{-ik \cdot a_1} + e^{-ik \cdot a_2}), \quad (11-1)$$

با معرفی عبارت زیر:

$$\alpha(\mathbf{k}) = (1 + e^{-ik \cdot a_1} + e^{-ik \cdot a_2}), \quad (12-1)$$

هامیلتونی را به شکل ساده‌ی زیر می‌نویسیم:

$$H_{AB} = -\gamma_0 \alpha(\mathbf{k}), \quad (13-1)$$

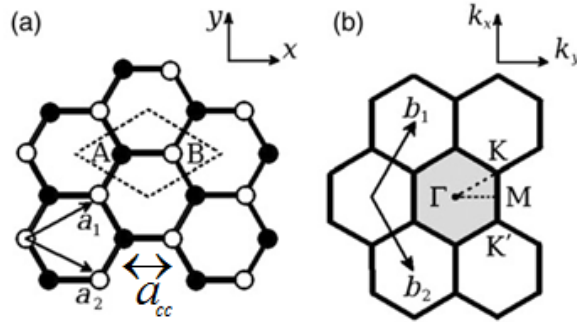
و با آگاهی از اینکه:

$$H_{BA} = (H_{AB})^\dagger,$$

---

<sup>1</sup>  $\gamma_0$ ، معادل همان انتگرال پویس (hopping integral) است که از فرم کوانتش دوم برای بدست آوردن طیف انرژی گرافن در اکثر مراجع از آن استفاده شده است.

و با در نظر گرفتن عبارتهای زیر به عنوان مبدأ انرژی:



شکل (۶-۱) (a) شبکه‌ی گرافن در فضای واقعی، (b) شبکه‌ی وارون. سلول واحد گرافن شامل دو اتم A و B است. منطقه‌ی اول بریلوئن به صورت هگزاگون سایه‌دار در شکل مشخص است. بردار پایه‌های شبکه‌ی مستقیم و شبکه‌ی وارون به ترتیب  $a_i$  و  $b_i$  با  $i=1,2$  مشخص شده‌اند. [۸].

$$H_{AA} = H_{BB} = \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{A,0} \rangle = \langle p_z^{B,0} | H | p_z^{B,0} \rangle = 0, \quad (14-1)$$

دترمینان زیر را تشکیل می دهیم :

$$\begin{vmatrix} 0-E & -\gamma_0(1+e^{-ik \cdot a_1} + e^{-ik \cdot a_2}) \\ -\gamma_0(1+e^{ik \cdot a_1} + e^{ik \cdot a_2}) & 0-E \end{vmatrix} = 0,$$

سرانجام حل دترمینان بالا ما را به رابطه‌ی پاشندگی زیر برای گرافن رهنمون می‌کند:

$$E^\pm(\mathbf{k}) = \pm\gamma_0 \times \sqrt{3 + 2\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + 2\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + 2\cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1))}, \quad (15-1)$$

و با توجه به اینکه بردار پایه‌ها در شبکه‌ی گرافن به شکل زیر بدست می‌آیند (شکل (۶-۱) را ببینید):

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \sqrt{3}a_{cc} \left( \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right) \\ \mathbf{a}_2 &= \sqrt{3}a_{cc} \left( \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) \\ a &= |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \sqrt{3}a_{cc} \end{aligned} \quad (16-1)$$

بنابراین در تقریب نزدیکترین همسایه، ویژه مقادیر انرژی به شکل زیر بدست می‌آید

$$E^\pm(\mathbf{k}) = \pm\gamma_0 \times \sqrt{1 + 4\cos \frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4\cos^2 \frac{k_y a}{2}}, \quad (17-1)$$

که پاشندگی گرافن دو بعدی مطابق با این فرمول در شکل (۵-۱) بر حسب بردار موج  $k$  رسم شده است. نیمه‌ی بالایی منحنی  $\pi^*$  یا نوار ضد پیوندی و نیمه‌ی پایینی  $\pi$  و نوار پیوندی نامیده می‌شود.

### (۵-۱) نقاط دیراک

اکنون مشخص است که طیف انرژی گرافن از دو نوار انرژی تشکیل یافته است که در شش نقطه در فضای وارون تماس پیدا می‌کنند. همانگونه که از شکل (۵-۱) آشکار است در این نقاط گاف انرژی ناپدید می‌شود. این نقاط که دو نقطه‌ی آن غیر معادل و به نقاط دیراک معروفند (که علت آن در ادامه روشن می‌شود) نقش مهمی را در ویژگی‌های گرافن ایفا می‌کنند و این همان چیزی است که باعث شده گرافن استثنا شود. نقاط دیراک در نقاط  $k^D$  که پاشندگی انرژی در رابطه‌ی (۱۲-۱) صفر می‌باشد قرار دارند، این رابطه زمانی برقرار است که:

$$\operatorname{Re} \alpha(k^D) = 1 + \cos \left[ \frac{1}{2} a (\sqrt{3}k_x^D + k_y^D) \right] + \cos \left[ \frac{1}{2} a (\sqrt{3}k_x^D - k_y^D) \right] = 0, \quad (18-1)$$

و به طور معادل:

$$\operatorname{Im} \alpha(k^D) = \sin \left[ \frac{1}{2} a (\sqrt{3}k_x^D + k_y^D) \right] + \sin \left[ \frac{1}{2} a (\sqrt{3}k_x^D - k_y^D) \right] = 0, \quad (19-1)$$

با انتخاب  $k_y^D = 0$  از معادله‌ی اولی، می‌توانیم بنویسیم

$$1 + 2 \cos \left[ \frac{\sqrt{3}a}{2} k_x^D \right] = 0 \quad \Rightarrow \quad k_x^D = \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \quad (20-1)$$

و به همین ترتیب به طور خلاصه مختصات شش نقطه از نقاط دیراک به شکل زیر بیان می‌شود:

$$K^\pm = \left( \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right), \quad K^\pm = \left( \pm \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}, \pm \frac{2\pi}{3a} \right), \quad (21-1)$$

دو نقطه‌ی غیر معادل وجود دارد که انرژی در آن نقاط صفر است به این نقاط معمولاً نقطه‌ی خنثای بار یا نقاط دیراک گفته می‌شود [۱۱ و ۱۲].

### (۶-۱) بسط مرتبه‌ی اول، هامیلتونی موثر گرافن

با بسط انرژی حول یکی از نقاط دیراک به انرژی کاملاً ساده شده‌ای می‌رسیم، وجود این نقاط نقش مهمی در خواص جالب گرافن دارد چراکه الکترونی که مقدار تکانه‌ی آن نزدیک این نقاط

باشد دارای جرم موثر صفر خواهد بود درست مانند فوتونهای نور که بدون جرم‌اند. با استفاده از رابطه‌ی (۱۱-۱) و (۱۲-۱) یعنی:

$$\alpha(\mathbf{k}) = (1 + e^{-ik \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-ik \cdot \mathbf{a}_2}), \quad (22-1)$$

می‌توانیم بردار تکانه‌ی مربوط به یک برانگیختگی کم انرژی را حول نقاط دیراک بسط دهیم. بنابراین می‌توان نوشت:

$$\mathbf{k} = \mathbf{K}^\pm + \boldsymbol{\kappa}, \quad (23-1)$$

که در آن  $\boldsymbol{\kappa} \ll \frac{1}{a}$ ، از این رو داریم  $\boldsymbol{\kappa} a \ll 1$ .

$$\begin{aligned} \alpha(\mathbf{K}^\pm + \boldsymbol{\kappa}) &= 1 + e^{-i(\mathbf{K}^\pm + \boldsymbol{\kappa}) \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i(\mathbf{K}^\pm + \boldsymbol{\kappa}) \cdot \mathbf{a}_2}, \\ &= 1 + e^{\pm i \frac{2\pi}{3} e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{a}_1}} + e^{\mp i \frac{2\pi}{3} e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{a}_2}}, \\ &= 1 + e^{\pm i \frac{2\pi}{3} \left[ 1 - i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{a}_1 - \frac{1}{2} (i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{a}_1)^2 + \dots \right]} + e^{\mp i \frac{2\pi}{3} \left[ 1 - i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{a}_2 - \frac{1}{2} (i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{a}_2)^2 + \dots \right]}, \end{aligned} \quad (24-1)$$

به دلیل وجود رابطه‌ی  $\boldsymbol{\kappa} a \ll 1$ ، تنها جملات مرتبه‌ی اول بسط را در نظر می‌گیریم و جملات مرتبه‌ی صفرم مطابق رابطه‌ی زیر خود مساوی صفر خواهد بود. در واقع این جملات تنها به  $\mathbf{K}^\pm$  که طیف انرژی به ازای آنها مساوی صفر است، وابسته است.

$$= \underbrace{1 + e^{\pm i \frac{2\pi}{3}} + e^{\mp i \frac{2\pi}{3}}}_{=0} - i e^{\pm i \frac{2\pi}{3}} (\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{a}_1) - i e^{\mp i \frac{2\pi}{3}} (\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{a}_2) \quad (25-1)$$

$$= -i e^{\pm i \frac{2\pi}{3}} (\kappa_x a_{1x} + \kappa_y a_{1y}) - i e^{\mp i \frac{2\pi}{3}} (\kappa_x a_{2x} + \kappa_y a_{2y}),$$

$$= e^{-i \frac{\pi}{2}} \frac{3a_{cc}}{2} (\kappa_x \pm i \kappa_y), \quad (26-1)$$

اینکه که عناصر ماتریس را بدست آوردیم در ماتریس تعریف شده در رابطه‌ی (۴-۱) جایگذاری می‌کنیم، بنابراین هامیلتونی متناظر با  $\mathbf{K}^+$  را در تقریب انرژی‌های کم، صرف نظر از ضریب فازی  $e^{-i \frac{\pi}{2}}$  به صورت زیر نشان دهیم:

$$H_{\boldsymbol{\kappa}} = \hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & \kappa_x + i \kappa_y \\ \kappa_x - i \kappa_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (27-1)$$

سرعت فرمی را با رابطه‌ی  $v_F = \gamma_0 \frac{\sqrt{3}}{2} a \hbar^{-1} = \gamma_0 \frac{3}{2} a_{cc} \hbar^{-1}$  ، تعریف می‌کنیم که مقدار آن تقریباً برابر با  $v_F = 10^8 \text{ cm/s}$  است [۱۰].

با معرفی ماتریس‌های پائولی به شکل زیر:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (28-1)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

$$H = \gamma_0 \frac{3}{2} a_{cc} \begin{pmatrix} 0 & \kappa_x + i \kappa_y \\ \kappa_x - i \kappa_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F (\sigma_x \kappa_x + \sigma_y \kappa_y), \quad (29-1)$$

و سرانجام هامیلتونی موثر گرافن تک لایه به شکل زیر حاصل می‌شود:

$$H = \hbar v_F (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{k}). \quad (30-1)$$

و ویژه مقادیر هامیلتونی مذکور را می‌توان به سادگی به دست آورد:

$$E^\pm = \pm \hbar v_f |k|, \quad v_F = \pm \frac{3}{2\hbar} \gamma_0 a_{cc} = \frac{3a_{cc} |\gamma_0|}{2\hbar}. \quad (31-1)$$

رابطه‌ی بالا نشان می‌دهد که در اطراف نقاط دیراک انرژی به طور خطی با تکانه تغییر می‌کند، پدیده‌ای که تا پیش از این در فیزیک حالت جامد هرگز مشاهده نشده بود. این خطی بودن رابطه‌ی پاشندگی ناشی از بدون جرم بودن حامل‌های بار در گرافن می‌باشد زیرا می‌دانیم که انرژی یک ذره‌ی نسبیتی را می‌توان توسط معادله‌ی دیراک به صورت زیر بدست آورد:

$$E = \pm \sqrt{\hbar^2 c^2 k^2 + mc^2}.$$

که با صفر قرار دادن جرم در آن، به رابطه‌ی پاشندگی مشابه با طیف انرژی گرافن می‌رسیم با این تفاوت که در رابطه‌ی (۳۱-۱)،  $v_F$  اکنون دیگر سرعت فرمی نقش سرعت نور را داراست. از این رو شبه‌ذرات در گرافن به مانند فرمیونهای بدون جرم دیراک رفتار می‌کنند که سرعت حدی آنها  $v_F$  است و نقاط  $K, K'$  به این سبب نقاط دیراک نامیده می‌شوند.

در پایان این بخش خاطر نشان می‌کنیم که در ادامه به منظور مطابقت با مقالات انتشار یافته،

در معادله‌ی (۳۱-۱)  $\gamma_0$  را معادل با  $t$  در نظر گرفته و  $v_F$  را به شکل زیر در نظر می‌گیریم:

$$v_F = \frac{3}{2} a t \hbar^{-1}, \quad (32-1)$$



### (۷-۱) فرمیون‌های بدون جرم دیراک

اینک توضیح می‌دهیم که چگونه فرمیون‌های بدون جرم دیراک، که با استفاده از مدل بستگی قوی بدست آمد و در بخش قبلی بحث شد، مطالعه‌ی تک لایه‌ی گرافن را بسیار جالب می‌کند. همانطور که قبلاً نیز اشاره شد، انرژی فرمی مطابق با  $E^\pm = 0$  در نقاط  $K$  قرار دارد. ویژگی‌های کم انرژی، مطابق با حالت‌های الکترونیکی نزدیک انرژی فرمی، با بسط انرژی پاشندگی حول نقاط  $K$  توصیف می‌شود. با نوشتن بردار موج گرافن به صورت  $k = K^\pm + \kappa$ ، که  $\kappa \ll 1$ ، با بسط تیلور  $E^\pm(\mathbf{k})$  حول نقاط  $K$  رابطه‌ی  $E^\pm(\mathbf{k}) = \pm \frac{3}{2} \gamma_0 a_{cc} \kappa = \pm v_f \hbar \kappa$ ، می‌آید که  $v_f = \pm \frac{3}{2\hbar} \gamma_0 a_{cc} \approx 10^6 \text{ ms}^{-1}$  سرعت فرمی است. این سرعت مستقل از چگالی حامل‌ها است، بنابراین پاشندگی انرژی مطابق با دو مخروط که با وابستگی خطی با بردار موج در نقاط  $K$  برخورد می‌کنند، است (شکل (۵-۱) را ببینید).

چگالی حالت‌ها مطابق با  $\rho(E) \propto |E|$  بدین معنی است که چگالی حالت‌ها خطی است و در انرژی صفر از بین می‌رود، که پیامد مستقیمی از پاشندگی خطی در نقاط  $K$  است، و با گاز الکترونی دوبعدی که در آن چگالی حالت‌ها ثابت است، در تناقض است [۱۳].

### (۸-۱) ویژه بردارهای گرافن

اینک به سادگی می‌توانیم ویژه مقادیر گرافن را به شکل زیر بدست آوریم:

با تعریف عبارت زیر با استفاده از رابطه‌ی اوایلر

$$\kappa_x + i\kappa_y = \kappa e^{i\theta}, \quad (۳۳-۱)$$

که در آن:

$$\theta = \tan^{-1} \frac{\kappa_y}{\kappa_x}, \quad (۳۴-۱)$$

و با در نظر گرفتن ماتریس هامیلتونی مؤثر گرافن حول نقاط دیراک که در رابطه‌ی (۲۷-۱) بدست آمده است:

$$H = v_F \hbar \begin{pmatrix} 0 & \kappa_x + i\kappa_y \\ \kappa_x - i\kappa_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (۳۵-۱)$$

ویژه بردارهای متناظر با ویژه مقادیر  $E^{\pm} = \pm v_F \hbar k$ ، به شکل زیر بدست می‌آید [۱۴]:

$$|E^{\pm} = \pm v_F \hbar k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i k_x x + i k_y y} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad (36-1)$$

بنابراین معادله‌ی توصیف کننده‌ی الکترون در گرافن (الکترونی که تکانه‌ی آن نزدیک به تکانه‌های دیراک است) معادله‌ی دیراک بوده که ویژه حالت‌های آن اسپینورهای دو بعدی دیراک است. مولفه‌های مختلف اسپینورهای دیراک احتمال یافتن الکترون را در هر یک از زیرشبکه‌های شبکه‌ی لانه زنبوری گرافن، نشان می‌دهد. در ادامه در فصل دوم و سوم از این ویژه بردارها برای بدست آوردن عبور الکترون گرافن از یک سد پتانسیل در محاسبات مان استفاده خواهیم کرد.

در یک جمع‌بندی می‌توان گفت که معادله‌ی توصیف کننده‌ی حامل‌های بار در گرافن، معادله‌ی بدون جرم دیراک است. الکترونی که (الکترونی که تکانه‌ی آن به  $K, K'$  نزدیک است) تحت پتانسیل دوره‌ای شبکه‌ی گرافن است همانند ذره‌ی آزاد رفتار می‌کند.

### ۹-۱ چرا گرافن مهم است؟

گرافن یک تک لایه‌ی شفاف<sup>۱</sup> از اتمهای کربن است که این اتمها در یک آرایش شش‌گوشی<sup>۲</sup> و به شکل لانه‌زنبوری<sup>۳</sup> مرتب شده‌اند. چنین ساختاری یک ماده‌ی دو بعدی بسیار محکم را بوجود می‌آورد، آنچنان استحکامی که دویست برابر محکم‌تر از فولاد است<sup>۴</sup>. گرافن برخی ویژگی‌های جالبی دارد که تا به حال در هیچ ماده‌ای مشاهده نشده است. ترکیب بندی الکترون در الگوی شش‌گوشی باعث می‌شود سه الکترون از هر چهار الکترون نوار ظرفیت کربن، یک شبکه‌ی کریستالی بوجود آورند، چنین ساختاری اجازه می‌دهد که تک الکترون باقی مانده از پیوندهای شیمیایی رها شود و به صورت آزاد شناور بماند که دریایی از الکترونهای آزاد بوجود می‌آید که این الکترونها تقریباً بدون هیچ مقاومتی جریان پیدا می‌کنند. این دریای الکترون به گرافن ویژگی مبهوت کننده‌ای می‌دهد: گرافن نوار گاف<sup>۵</sup> ندارد (همانطور که قبلاً در بخش‌های قبل به این موضوع

<sup>1</sup> Transparent

<sup>2</sup> Hexagonal

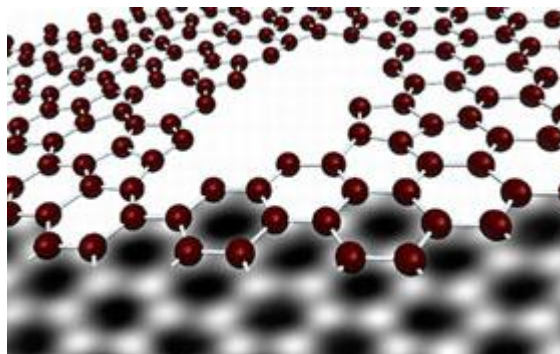
<sup>3</sup> Honeycomb

<sup>۴</sup> البته قابل ذکر است که گرافن در برابر کشش بسیار مقاوم است. مثالی که در این مورد می‌توان زد: اگر صفحه‌ی گرافنی که به صورت معلق درآمده است، داشته باشید، یک سوزن فولادی را روی آن قرار دهید برای اینکه سوزن بتواند این صفحه گرافن را بشکافد باید تقریباً ۵۰ تن نیرو روی آن اعمال کنیم که این نشان می‌دهد این تک لایه‌ی اتمی از نظر مکانیکی چه استحکام باورنکردنی دارد.

<sup>5</sup> Gap band

اشاره شد و طیف انرژی خطی گرافن که بیان‌کننده‌ی این موضوع است در رابطه‌ی (۱-۳۱) بدست آمد).

از آنجاییکه که الکترون‌های گرافن در نوار رسانش قرار دارند هیچ انرژی اضافی برای انتقال الکترون‌ها مورد نیاز نیست و الکترون‌ها مانند ذرات کم‌جرم رفتار بالیستیک<sup>۱</sup> دارند، مانند این که شما یک تپله (سنگ مرمر) را به جای آسفالت بر روی سطح یخی بغلتانید. تپله‌ای که روی یخ می‌غلتد، با مقاومت کمتری مواجه می‌شود و بنابراین سریعتر جلو می‌رود. ولی همچنانکه تپله روی آسفالت می‌رود (رسانایی مانند مس)، به اطراف پراکنده می‌شود و مقداری انرژی به این خاطر از دست می‌دهد و بنابراین مسافت کمتری را در زمان بیشتر طی می‌کند. مقاومت گرافن در دمای اتاق بی‌نظیر است و حتی از نقره نیز کمتر است. گرافن به دلیل خصوصیات منحصر بفرد و جالبی که دارد (که برخی از آنها در اینجا ذکر شد) در سالهای اخیر به موضوع اول پژوهش‌ها در جهان مبدل شده است. علاوه بر ویژگی‌های بیان شده یکی دیگر از جنبه‌های جالب توجه گرافن، که موضوع این پایان‌نامه نیز در این راستا می‌باشد و در ادامه به آن خواهیم پرداخت مسئله‌ی تونل‌زنی یا پارادوکس کلین<sup>۲</sup> است [۴].



شکل (۱-۸) امکان ترمیم خودبخودی در گرافن

### ۱-۱۰) یافته‌ای جدید در مورد گرافن: امکان ترمیم خود به خودی در گرافن

در بیست سال گذشته اخبار بسیاری در مورد گرافن منتشر شده است. اما اخیراً خبر جدیدی منتشر شد که دانشمندان را امیدوار نمود تا بتوانند به تولید انبوه این مواد دست پیدا کنند.

<sup>1</sup> Ballistically

<sup>2</sup> Klein Paradox

کشف جدید توسط یک گروه تحقیقاتی در دانشگاه منچستر گزارش شده است. آنها دریافتند که اگر حفره‌ای در ورقه گرافن ایجاد شود، اتم‌های کربن نزدیک آن، حفره را ترمیم نموده و ورقه را به ویژگی اولیه آن برمی‌گردانند. کاربردهای گسترده گرافن در زمینه‌های مختلف از الکترونیک و کامپیوتر گرفته تا پزشکی محققان را شگفت‌زده کرده است. اما چیزی که کاربرد گسترده آن را تحت الشعاع قرار می‌دهد مشکل تولید انبوه آن است؛ زیرا یک لایه به ضخامت یک اتم به آسانی شکسته و به صورت یک کره درمی‌آید. بسیاری از محققان در تلاش برای به دست آوردن روشی برای رفع این مشکل هستند. محققان دانشگاه منچستر نیز هنگامی که در حال تحقیق در این زمینه بودند کشف کردند که گرافن قادر است تحت شرایط مطلوب خود را ترمیم نماید آنها از ترکیب یک پرتو الکترونی و فلزاتی از قبیل پالادیم یا نیکل برای ایجاد حفره‌های کوچک پایدار در یک ورقه گرافن که به تازگی ایجاد شده بود استفاده کردند. در این بین آنها دریافتند که افزایش مقدار بیشتری فلز منجر به ایجاد حفرات پایدار بزرگتر می‌شود که این خود یک کشف قابل توجه بود. سپس وقتی کربن را به این مخلوط اضافه کردند مشاهده نمودند که اتم‌های کربن جانشین فلزات می‌شوند. این فرآیند باعث می‌شود که حفرات بسته و ترمیم شوند و ورقه به شرایط اولیه خود بازگردد. آنها همچنین دریافتند که اگر از یک ترکیب هیدروکربنی استفاده کنند باز هم حفرات ترمیم می‌شوند اما اثرات ناهمواری روی آن باقی می‌ماند. این نتایج بسیار جالب توجه بودند زیرا به نظر می‌رسد با به کارگیری این خصوصیت جدید مثلاً استفاده از آن در فرآیند تولید گرافن امکان رسیدن به روشی برای تولید انبوه این ماده میسر شود.

### ۱-۱) پارادوکس کلین در گرافن

در فیزیک انرژی بالا به سبب نیاز به شتاب‌دهنده‌های پیشرفته امکان انجام برخی آزمایش‌ها فراهم نیست. یکی از مسئله‌هایی که امکان آزمایش آن به همین دلیل وجود ندارد مسئله‌ای با عنوان پارادوکس کلین است که بیان می‌دارد ذرات نسبیتی قادر هستند از یک سد الکترواستاتیکی با ارتفاع بی‌نهایت، عبور نمایند.

یک ذره‌ی کلاسیک نمی‌تواند به ناحیه‌ای که انرژی پتانسیلش بیش از انرژی ذره است وارد شود. (شکل (۷-۱) را ببینید). با این حال به خاطر اصل عدم قطعیت دانستن محل دقیق و سرعت