بسم الله الرحمن الرحيم

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه
گاوازنگ - زنجان

بررسی حالت مقید الکترون در گرافین تک لایه گاف‌دار

پایان‌نامهٔ کارشناسی ارشد

محسن یارمحمّدی

استاد راهنما:

دکتر مالک زارعیان

دکتر علی قربان‌زاده مقدم

خرداد ۱۳۹۳

تقدیم به

زنده یاد استاد مالک زارعیان

و

خداوندگاران مهر و مهربانی...

پدر و مادر عزیزم

خدایا...

به من زیستنی عطا کن که در لحظه مرگ، بر بی‌ثمری لحظه‌ای که برای زیستن گذشته است، حسرت نخورم و مُردنی عطا کن که بر بیهودگیش، سوگوار نباشم. بگذار تا آن را، خود انتخاب کنم، اما آنچنان که تو دوست می‌داری.

تو می‌دانی و همه می‌دانند که شکنجه دیدن بخاطر تو، زندانی کشیدن بخاطر تو و رنج بردن به پای تو تنها لذت بزرگ زندگی من است، از شادی توست که من در دل می‌خندم، از امید رهایی توست که برق امید در چشمان خسته‌ام می‌درخشد و از خوشبختی توست که هوای پاک سعادت را در ریه‌هایم احساس می‌کنم. نمی‌توانم خوب حرف بزنم. نیروی شگفتی را که در زیر کلمات ساده و جمله‌های ضعیف و افتاده، پنهان کرده‌ام دریاب، دریاب.

تو می‌دانی و همه می‌دانند که زندگی از تحمیل لبخندی بر لبان من، از آوردن برق امیدی در نگاه من، از برانگیختن موج شعفی در دل من، عاجز است.

تو، چگونه زیستن را به من بیاموز، چگونه مردن را خود خواهم آموخت.

به من توفیق تلاش در شکست، صبر در نومیدی، رفتن بی‌همراه، جهاد بی‌سلاح، کار بی‌پاداش، فداکاری در سکوت، دین بی‌دنیا، مذهب بی‌عوام، عظمت بی‌نام، خدمت بی‌نان، ایمان بی‌ریا، خوبی بی‌نمود، گستاخی بی‌خامی، قناعت بی‌غرور، عشق بی‌هوس، تنهایی در انبوه جمعیت، و دوست داشتن بی‌آنکه دوست بداند، روزی کن.

اگر تنهاترین تنهاشوم، باز خدا هست

او جانشین همه نداشتن‌هاست...

سپاس گزاری...

سپاس خداوندگار حکیم را که با لطف بی‌کران خود، آدمی را زیور عقل آراست.

در آغاز وظیفه خود می‌دانم از زحمات بی‌دریغ استاد راهنمای عزیز و مهربان و گرانقدرم، مرحوم پروفسور **مالک زارعیان**، صمیمانه تشکر و قدردانی کنم که قطعاً بدون راهنمایی‌های ارزنده ایشان، این مجموعه به انجام نمی‌رسید. از خداوند متعال برای این عزیز از دست رفته قرین رحمت را می‌طلبم.

از آقای دکتر **علی قربان‌زاده مقدم** که زحمت مطالعه و راهنمایی این رساله را بعد از فوت پروفسور زارعیان تقبل فرمودند و در آماده سازی این رساله، به نحو احسن اینجانب را مورد راهنمایی قرار دادند، کمال امتنان را دارم و همچنین از جناب آقای دکتر **جعفر میرزایی** دایی عزیزم که با راهنمایی‌های ارزنده‌اش راهبرد درست زندگی مطابق با مهارت‌های درست زندگی را به من نشان دادند کمال تشکر و قدردانی را به جا می‌آورم.

از آقایان دکتر **سعید عابدین پور**، دکتر **جهانفر ابویی**، سرکار خانم **لیلا عباس پور** و همچنین از کلیه اساتید گرامی دوران تحصیلم، هم کلاسی‌ها، دوستان و نیز کارکنان محترم دانشکده فیزیک که در مدت تحصیلات اینجانب زحمات فراوانی را متحمل شده‌اند و به وفور مرا راهنمایی کردند، صمیمانه تشکر می‌نمایم.

و در پایان، بوسه می‌زنم بر دستان **خداوندگاران مهر و مهربانی، پدر و مادر عزیزم** و بعد از خدا، ستایش می‌کنم وجود مقدس‌شان را و تشکر می‌کنم از برادران عزیزم به پاس عاطفه سرشار و گرمای امیدبخش وجودشان، که در این سردترین روزگاران، بهترین پشتیبان من بودند.

محسن یارمحمّدی

بهار ۱۳۹۳

چکیده

در گرافین، الکترون‌های رسانش شبیه ذرات نسبیتی بدون جرم دیراک با یک خاصیت کایرال رفتار می‌کنند. به همین دلیل، مقید کردن الکترون‌ها در گرافین به شکل هندسه‌های نقطه کوانتومی ناممکن است. در گرافین بدون گاف، به دلیل طیف الکترونی منحصر به فرد آن، رسانش الکتریکی در نقطهٔ دیراک دارای یک کمینه است. این موضوع استفاده از ماده فوق را در قطعات الکترونیکی دشوار کرده است. یکی از روش‌های غلبه بر این مشکل، ایجاد گاف در طیف انرژی گرافین می‌باشد که با شکست تقارن وارونی (تقارن زیر شبکه‌ها) به وجود می‌آید. فاز بِری الکترون‌ها همزمان با شکست تقارن وارونی تغییر می‌کند و اثرات نابهنجار این تغییر در ترابرد الکترونی این ماده دارای اهمیتی ویژه می‌شود.

هدف این تحقیق بررسی حالت‌های مقید الکترون‌ها می‌باشد. با حل معادله دیراک بدون گاف در ناحیه‌ای محدود و همچنین حل معادلهٔ دیراک گاف‌دار در بیرون از چنین ناحیه‌ای، حالت‌های مقید با انرژی‌های مجاز ممکن مورد بررسی قرار خواهد گرفت. یافته‌ها نشان می‌دهد حالت‌های مقید الکترون‌ها با پتانسیلی خاص به وجود می‌آید و شکل حالت‌های مقید به اندازه و علامت پتانسیل وابسته است. به خاطر وجود گافی متناهی، عدم تقارنی در وادی‌های مختلف دیده می‌شود. لازم به ذکر است که پیدایش حالت‌های مقید الکترون‌ها در گرافین در ساخت نقاط کوانتومی گرافینی دارای اهمیت است.

واژه‌های کلیدی: *گرافین گاف‌دار، حالات مقید، نقاط کوانتومی گرافینی*

فهرست

چکیده . . . . . شش

پیش‌گفتار ۱

۱ آشنایی با گرافین ۵

۱.۱ مروری چند بر روش های ساخت گرافین ۵

۱.۱.۱ روش رویه سابی ۶

۲.۱.۱ تجزیه گرمایی SiC برای تولید گرافین ۷

۳.۱.۱ رشد هم‌بافته گرافین روی فلزات ۸

۴.۱.۱ روش تقلیل اکسید گرافیت ۹

۵.۱.۱ رشد گرافین به وسیلهٔ ذوب ترکیب فلز-کربن ۹

۲.۱ ساختار شبکه‌ای ۱۰

۱.۲.۱ طیف انرژی: روش تنگ-بست ۱۲

۲.۲.۱ برانگیختگی‌های با انرژی کم: معادله دیراک ۱۶

۳.۲.۱ چگالی حالت‌ها ۱۸

۳.۱ خواص یکتای الکترونی در گرافین ۲۰

۱.۳.۱ مفهوم شبه اسپین و دستوارگی در گرافین ۲۰

۱.۳.۲ مفهوم دستوارگی در گرافین ۲۴
۱.۳.۳ شبه اسپین و حذف جریان بازتابی ۲۷
۱.۳.۴ تونل‌زنی و تناقض کلاین ۳۰
۱.۳.۵ عدم جایگزیدگی و کمینه رسانندگی ۳۲
۱.۳.۶ اثر کوانتومی غیر عادی هال ۳۳
۱.۳.۷ مشخصات الکترونی بنیادی ۳۵

۲ آشنایی با گرافین گاف‌دار و نقاط کوانتومی ۳۷

۲.۱ محاسبه هامیلتونی مؤثر گرافین گاف‌دار ۳۸
۲.۲ مروری چند بر روش های ساخت گرافین گاف‌دار ۴۱
۲.۲.۱ شکست تقارن و معادله دیراک ۴۱
۲.۲.۲ زیر لایه ۴۲
۲.۲.۳ میدان الکتریکی ۴۴
۲.۲.۴ تنش ۴۵
۲.۲.۵ نوار گرافینی محدود شده ۴۹
۲.۳ معرفی نقاط کوانتومی ۵۲
۲.۴ روش‌های ساخت نقاط کوانتومی ۵۷
۲.۴.۱ روش های ساخت پایین به بالا ۵۷
۲.۴.۲ روش های ساخت بالا به پایین ۵۷
۲.۵ کاربرد نقاط کوانتومی ۵۸
۲.۶ نقاط کوانتومی گرافینی ۵۹
۲.۶.۱ ساخت نقاط کوانتومی گرافینی ۵۹

۳ بررسی حالت مقید الکترون در گرافین تک لایه گاف‌دار ۶۲

۱.۳ مدل‌های پیشنهاد شده در ساخت نقاط کوانتومی گرافینی ۶۲
۲.۳ مدل ۶۳
۳.۳ معادلهٔ ویژه مقداری-ویژه برداری ۶۵
۴.۳ شرایط مرزی ۶۸
۵.۳ معادلهٔ مشخصه برای حل عددی ۷۲
۶.۳ تحلیل حل عددی ۸۱
۷.۳ تقارن الکترون-حفره ۹۱
۸.۳ نتیجه گیری ۹۸

آ حل معادلهٔ دیراک در گرافین معمولی **۱۰۰**

مراجع ۱۱۳
واژه‌نامه فارسی به انگلیسی ۱۲۴

لیست تصاویر

۱ دگر شکل‌های کربن. بالای سمت راست: گرافیت. بالای سمت چپ: گرافین. پایین سمت راست: فولورن. پایین سمت چپ: نانولوله کربنی [۲۵]. ۲

۱.۱ گرافین. ۱۰

۲.۱ نمایش هیبریدشدگی اتم کربن. سه اوربیتال هیبریدشده sp^2 در صفحه با هم زاویه ۱۲۰° می‌سازند و اوربیتال هیبرید نشده p_z عمود بر صفحه (گرافین) است [۲۴]. ۱۱

۳.۱ چپ) سلول سبز رنگ، یاخته واحد گرافین شامل دو اتم A و B همراه با اولین منطقه بریلوئن در گرافین. راست) بردارهای همسایه پایه‌های اتمی در گرافین [۲۵]. ۱۲

۴.۱ طیف انرژی گرافین همراه با نقاط دیراک K و K' [۲۵]. ۱۴

۵.۱ چگالی حالت‌ها در حالت بر انگیختگی‌های با انرژی کم [۲۹]. ۱۹

۶.۱ ساختار الکترونی گرافین که شامل ۴ مخروط دیراک می‌باشد. در آن‌ها درجهٔ آزادی اسپین و شبه اسپین حامل‌های بار به ترتیب با پیکان‌های آبی و قرمز (پیکان‌های به سمت داخل و خارج) نشان داده شده‌اند. توجه داشته باشید در گرافین به خاطر نسبیتی بودن معادلات، اثر اسپین-مدار ضعیف می‌باشد و اسپین‌های مخالف تقریباً در یک انرژی قرار دارند و به عبارت دیگر برای هر اسپین بالا و پایین می‌توان یک مخروط دیراک در نظر گرفت که روی یکدیگر افتاده‌اند [۳۱]. ۲۶

۷.۱ تغییر سطوح انرژی نوارهای گرافین در حضور سد پتانسیل. شبه اسپین و تکانه ذره در نوار ظرفیت در جهت مخالف هم و در نوار رسانش در جهت موافق هم هستند [۴۱]. ۳۱

۸.۱ اندازه‌گیری رسانندگی بر حسب ولتاژ گیت برای زمان‌های متفاوت [۴۵]. ۳۲

۹.۱ جرم سیکلوترونی حامل‌های بار به صورت تابعی از چگالی حامل‌ها. nهای مثبت و منفی معادل الکترون‌ها و حفره‌ها هستند. دایره‌ها داده‌های تجربی هستند. رابطه رادیکالی، یک رابطه پاشندگی خطی را پیشنهاد می‌کند. $m_\circ$ جرم الکترون آزاد است [۲۵]. ۳۴

۱۰.۱ اثر کوانتومی هال در گرافین به صورت تابعی از چگالی حامل‌های بار، قله مقاومت در $n = \circ$ در میدان‌های مغناطیسی بالا نشان‌دهنده وجود تراز لاندائو می‌باشد [۲۵]. ۳۵

۱.۲ چپ) نوار انرژی گرافین با گاف نواری. راست) نوار انرژی گرافین بدون گاف نواری ۴۲

۲.۲ باز شدن گاف انرژی در نقطه دیراک گرافین تک لایه‌ای که بر روی زیر لایه SiC رشد داده شده است [۵۷]. ۴۳

۳.۲ شکل شماتیک مداری که در آن یک ورقه گرافین دولایه توسط لایه‌های SiO_2 از الکترودهای درگاهی بالا و پایین جدا شده است (شکل چپ). شکل وسط ساختار نواری گرافین دولایه را در نزدیکی نقطه دیراک K و برای اندازه‌های مختلف پتانسیل خارجی $U_{ext} = \circ, \circ/۵, ۱eV$ نشان می‌دهد. شکل سمت راست نیز نشان دهنده رفتار گاف انرژی E_{gap} بر حسب پتانسیل خارجی U_{ext} است [۶۱]. ۴۴

۴.۲ (a) توزیع کشش متقارن (b) توزیع کشش نامتقارن در جهت عمود بر $C-C$ و (c) توزیع کشش نامتقارن در جهت موازی با $C-C$ [۶۹]. ۴۶

۵.۲ (a) گاف انرژی برحسب L_x (طول صفحهٔ گرافینی) برای حالتی که توزیع کشش نامتقارن در جهت عمود بر $C-C$ است (b) گاف انرژی برحسب L_y (عرض صفحهٔ گرافینی) برای حالتی که توزیع کشش نامتقارن در جهت موازی با $C-C$ است. L_x در شکل نصف فاصله بین دو وادی در شبکه وارون است [۶۹]. . . . ۴۷

۶.۲ شکل سمت چپ تطابق داده‌های به دست آمده از روش DFT برای کشش یک درصد (تغییر شکل در جهت x) با رابطه تنگ-بست برای به دست آوردن انرژی‌های جهش را نشان می‌دهد. تطابق حول نقطه K در منطقه اول بریلوئن در راستای $\Gamma-K$ انجام شده است. همانطور که در شکل سمت راست نشان داده شده است سیستم بدون گاف باقی می‌ماند (چگالی حالت‌ها مطابق با داده‌های DFT تحت همان کشش محاسبه شده است). همچنین موقعیت تکینگی‌های وان-هوف (Van $Hove$) در حالت گرافین کشیده نشده با خطچین نشان داده شده است [۷۱]. . . ۴۷

۷.۲ تغییرات پارامترهای جهش، $t_1=t_3$ و t_2 برحسب کشش اعمال شده، که با تطابق معادله تنگ-بست با داده‌های به دست آمده از DFT نوار ظرفیت مشخص شده است. شکل بالا تغییر شکل شبکه در جهت زیگزاگ و شکل پایین کشش در جهت لبه صندلی شکل را نشان می‌دهد. مقدار ماکزیمم کشش ۱۰ درصد است [۷۱]. . ۴۸

۸.۲ (a) تصویر میکروسکوپ نیروی اتمی AFM (*Force Microscopic Image*) از نانو نوارهای گرافینی پوشیده شده بوسیله یک ماسک HSQی (*Hydrogen Silses Quioxane*) محافظ. (b) تصویر SEM (*Scaning Eectron Microscopic Image*) از مجموعه P_1 با نانو نوارهای گرافینی موازی و عرض‌های متفاوت. (c-e) رسانش در نانو نوارهای گرافینی در مجموعه P_1 به صورت تابعی از ولتاژ گیت اندازه‌گیری شده در دماهای متفاوت. (f) انرژی گاف بر حسب عرض نوار گرافینی برای (P_1 و P_4) با عرض‌های متفاوت و جهت‌های موازی و (D_1 و D_2) با عرض یکسان و جهت‌های متفاوت. شکل کوچک شده انرژی گاف را بر حسب زاویه نسبی برای مجموعه D_1 و D_2 نشان می‌دهد [۷۲]. ۴۹

۹.۲ تغییرات گاف انرژی بر حسب عرض نوار گرافینی با لبه‌های صندلی شکل به دست آمده (a) بوسیله محاسبات بستگی قوی با $t = 2/8eV$ و (b) از محاسبات اصول اولیه (First-Principles-Calculations) [۷۶]. ۵۰

۱۰.۲ ساختار نوار گرافینی با لبه‌های زیگزاگ. Δ_z^0 و Δ_z^1 به ترتیب مشخص کننده گاف نواری مستقیم و شکافتگی انرژی در $kd_z = \pi$ هستند. (b) تغییرات Δ_z^0 و Δ_z^1 بر حسب عرض نوار [۷۶]. ۵۱

۱۱.۲ مکانیزم هدایت الکتریکی در یک ترکیب نیمه رسانا [۹۱]. ۵۴

۱۲.۲ دیاگرام نوار انرژی یک نیمه رسانای حجمی (Bulk) با مولکول مشابه آن (برای مثال؛ بالک Si در مقایسه با خوشه‌هایی از تعداد کم اتمهای Si) و یک نقطهٔ کوانتومی. الکترون‌های نیمه رساناها در نوارها هستند و الکترون‌های مولکول‌ها در اوربیتال‌های مولکولی (پیوندها). پیکان عمودی نوار گاف E_g برای نیمه رساناهای بالک و بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده و پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده (HOMO-LUMO) گاف نواری در مولکول را نشان می‌دهد. در مقیاس نانومتری، ساختار الکترونی یک نقطهٔ کوانتومی نیمه رسانا در رژیم حد واسط بین نوارها و پیوندهاست [۸۸]. ۵۵

۱.۳ شماتیکی از مدل در نظر گرفته شده. الف) گرافین به همراه تیپ نقطه‌ای که نوک آن یک دیسک به شعاع $r_\circ$ است و از گاف‌دار شدن ناحیه‌ای به شعاع $r_\circ$ در گرافین جلوگیری می‌کند. ب) ناحیهٔ به شعاع $r_\circ$ که بدون گاف باقی مانده است. ج) ساختار نواری مدل. د) ولتاژهای درگاهی (گیت) اطراف شعاع $r_\circ$. ۶۴

۲.۳ رفتار توابع بسل و نویمن. ۷۴

۳.۳ رفتار توابع بسل تعمیم یافته K و I. ۷۶

۴.۳ نمودار انرژی حالات مقید برحسب شعاع دیسک برای مقادیر مثبت $a(< a < \circ$ ۰/۵) در وادی $\tau = +1$. ۸۳

۵.۳ نمودار انرژی حالات مقید برحسب شعاع دیسک برای مقادیر مثبت $a(< a < \circ/۶$ ۱) در وادی $\tau = +1$. ۸۴

۶.۳ نمودار انرژی حالات مقید برحسب دامنه پتانسیل برای مقادیر مثبت a و $(= \Lambda$ ۲/۵, $\Lambda = ۵, \Lambda = ۷/۵, \Lambda = ۱۰$) در وادی $\tau = +1$. ۸۵

۷.۳ نمودار انرژی حالات مقید برحسب شعاع دیسک برای مقادیر مثبت $a(< a < \circ$ ۰/۵) در وادی $\tau = -1$. ۸۸

۸.۳ نمودار انرژی حالات مقید برحسب شعاع دیسک برای مقادیر مثبت a ($a < ۰/۶$)
۱) در وادی $\tau = -۱$. ۸۹
۹.۳ نمودار انرژی حالات مقید برحسب دامنه پتانسیل برای مقادیر مثبت a و ($\Lambda =$
۲/۵, $\Lambda = ۵$, $\Lambda = ۷/۵$, $\Lambda = ۱۰$) در وادی $\tau = -۱$. ۹۰
۱۰.۳ نمودار انرژی حالات مقید برحسب شعاع دیسک برای مقادیر منفی a ($۰ < a$)
۰/۵) در وادی $\tau = +۱$. ۹۲
۱۱.۳ نمودار انرژی حالات مقید برحسب شعاع دیسک برای مقادیر منفی a ($a < ۰/۶$)
۱) در وادی $\tau = +۱$. ۹۳
۱۲.۳ نمودار انرژی حالات مقید برحسب دامنه پتانسیل برای مقادیر منفی a و ($\Lambda =$
۲/۵, $\Lambda = ۵$, $\Lambda = ۷/۵$, $\Lambda = ۱۰$) در وادی $\tau = +۱$. ۹۴
۱۳.۳ نمودار انرژی حالات مقید برحسب شعاع دیسک برای مقادیر منفی a ($۰ < a$)
۰/۵) در وادی $\tau = -۱$. ۹۵
۱۴.۳ نمودار انرژی حالات مقید برحسب شعاع دیسک برای مقادیر منفی a ($a < ۰/۶$)
۱) در وادی $\tau = -۱$. ۹۶
۱۵.۳ نمودار انرژی حالات مقید برحسب دامنه پتانسیل برای مقادیر منفی a و ($\Lambda =$
۲/۵, $\Lambda = ۵$, $\Lambda = ۷/۵$, $\Lambda = ۱۰$) در وادی $\tau = -۱$. ۹۷

پیش‌گفتار

کربن یکی از اصلی‌ترین عناصر حیات است. این عنصر با عدد اتمی ۶ در گروه ۱۴ جدول تناوبی عناصر قرار دارد و دارای ساختار شیمیایی $1s^2 2s^2 2p^2$ است. این عنصر دارای دگرشکل‌های متفاوتی در طبیعت می‌باشد که می‌توان به الماس که عنصری بسیار سخت و شفاف، گرافیت که یک مادهٔ نسبتاً نرم و کدر با بعد فیزیکی ۳، C_{60} که به صورت یک مولکول با سلول‌های ۵ ضلعی با بعد فیزیکی صفر، نانولوله‌های کربنی با بعد فیزیکی ۱ و گرافین[۱] با بعد فیزیکی ۲ که در دههٔ اخیر با پیشرفت تکنولوژی کشف شده است، اشاره کرد (شکل ۱) [۱]. گرافین، تک لایهٔ گرافیت و دارای ساختاری لانه زنبوری است که در آن هر اتم کربن با هیبریداسیون sp^2 با سه اتم مجاور خود پیوند σ تشکیل می‌دهد که طول هر پیوند A ۱٫۴۲° است و اوربیتال p باقی‌مانده عمود بر صفحهٔ گرافین، پیوند π تشکیل می‌دهد. الکترون موجود در این اوربیتال قابلیت جهش بین همسایه‌ها را دارد و مسئول خواص ترابردی در گرافین است.

در اواخر سال ۲۰۰۴ پژوهشگران دانشگاه منچستر و مرکز میکروالکترونیک چرنوگلوگا [۲] در روسیه روشی برای جداسازی صفحات گرافینی از گرافیت با استفاده از یک نوار چسب [۳] معمولی پیدا کردند. این پژوهشگران توانستند ویژگی‌های الکترونی گرافین را اندازه‌گیری کنند و ویژگی‌های منحصر به فرد آن را به صورت تجربی نشان دهند [۱]. در اوایل سال ۲۰۰۵ نیز محققان دانشگاه منچستر با همکاری یک گروه تحقیقاتی از دانشگاه کلمبیا توانستند وجود فرمیون‌های دیراک در گرافین را که از سال‌ها پیش به صورت نظری اثبات شده بود، به صورت تجربی نشان دهند [۳۴]. در نهایت گرافین در اواخر سال ۲۰۰۴ توسط گروهی[۴] در دانشگاه منچستر- انگلستان با استفاده از روش لایه برداری میکرو

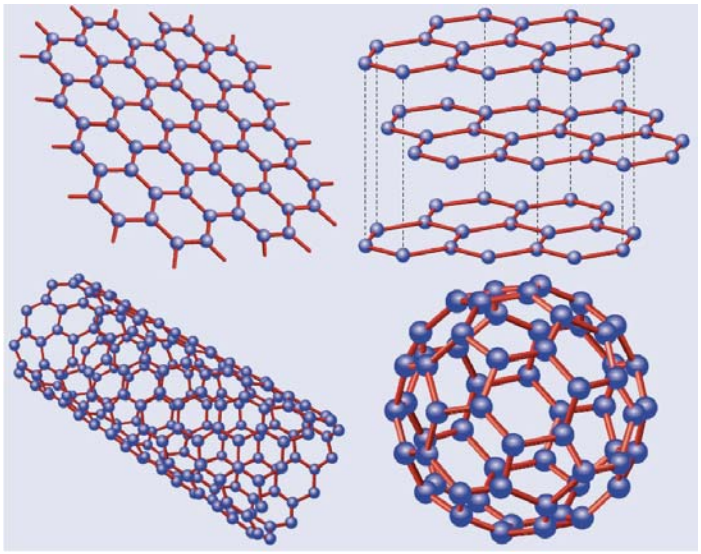
---

۱ Graphene

۲ Chernogolovka

۳ Scotch tape

۴ A. K. Geim, et al



شکل ۱: دگر شکل‌های کربن. بالای سمت راست: گرافیت. بالای سمت چپ: گرافین. پایین سمت راست: فولورن. پایین سمت چپ: نانولوله کربنی [۲۵].

مکانیکی[۱] ساخته شد. گرافین با ساختاری ۲ بعدی، ماده‌ای است که از لحاظ ترمودینامیکی پایدار است[۲] و در شرایط متعارف می‌تواند وجود داشته باشد. در حالیکه حدود چند دهه پیش تصوری غیر از این حاکم بود. لاندائو[۳] و پایرلز[۴] عدم پایداری کریستال‌های دو بعدی را به علت وجود افت و خیز گرمایی که باعث می‌شود جابجایی‌های اتمی در حد فواصل بزرگتر از فاصلهٔ بین اتمی باشد، پیش بینی کرده بودند [۳، ۴]. از طرفی در قضیه مرمین[۵] نبود نظم بلند برد در ساختارهای بلوری دو بعدی وقتی که در حضور پتانسیل‌های اتمی هستند، گزارش شده است. در واقع دمای ذوب غشاهای نازک، با کاهش ضخامت به شدت کاهش می‌یابد.

در فیزیک ماده چگال، عموماً معادله شرودینگر در توصیف خواص الکترونی مواد موفق است ؛ اما

---

۱ micromechanical cleavage

۲ یکی از دلایل پایداری آن به دلیل پیوندهای کوالانسی داخل صفحه است [۲].

۳ L. D. Landau

۴ R. E. Peierls

۵ N. D. Mermin

گرافین یک استثناست. والاس[۱] نشان داد که گرافین ساختار الکترونی متفاوتی نسبت به گاز الکترونی دو بعدی معمول دارد [۲۶]. او دید که حامل‌های بار گرافین از معادلات ذرات نسبیتی بدون جرم دیراک تبعیت می‌کنند، هر چند که الکترون‌های رسانش در گرافین با سرعتی کمتر از سرعت نور حرکت می‌کنند ($v_F = ۱۰^۶ \frac{m}{s}$). به خاطر شبکه لانه زنبوری گرافین که شامل دو زیر شبکه است، شبه ذرات جدیدی (فرمیون‌های بدون جرم دیراک) را که در حد انرژی‌های کم با تقریب خوبی از معادله دیراک پیروی می‌کنند، معرفی می‌شوند. در نتیجه به علت پیروی شبه ذرات گرافین از معادله نسبیتی بدون جرم دیراک، رفتارهای جالبی را می توان از آن انتظار داشت. از ویژگیهای بارز این الکترون‌ها دستوارگی[۲] و تونل‌زنی کلاین[۳] است. در گرافین برانگیختگی‌ها (شبه ذرات) با توابع موج دو مؤلفه‌ای توصیف می‌شوند که هر مؤلفه احتمال یافتن الکترون روی هر زیر شبکه را نشان می‌دهد. این توصیف مشابه اسپینورها در QED[۴] است. شبکه گرافین به دلیل براوه نبودن به دو زیر شبکه A و B تبدیل می‌شود و الکترون‌ها دارای درجه آزادی اضافه‌ای به نام شبه اسپین[۵] می‌شوند که چنین توصیفی تعریف دستوارگی به صورت تصویر شبه اسپین در راستای حرکت شبه ذرات را مجاز می‌دارد ($\hat{c} = \frac{\vec{\sigma}.\vec{p}}{|\vec{p}|}$). بنابراین در گرافین جهت شبه اسپین به تکانه ذرات همبسته است و این بدان معنی است که توابع موج در رأس نقاط دیراک دارای ویژگی دستوارگی هستند. نتیجه‌اش این است که هر بازپراکندگی[۶] (پراکندگی ذرات از بردار موج $\vec{k}$ به $-\vec{k}$) متوقف می‌شود.

ویژگی دستوارگی ذرات گرافین، نقش مهمی در تونل زنی کوانتومی ذرات از سدهای پتانسیل دارد.

---

۱ P. R. Wallace

۲ chirality

۳ Klein tunneling

۴ Quantum Electro Dynamic

۵ pseudospin

۶ backscattering

تونل زنی کوانتومی ناشی از اصول بنیادی مکانیک کوانتومی و اصل عدم قطعیت هایزنبرگ[۱] است. به علت اصل عدم قطعیت، ممنوعیت نفوذ در ناحیه‌های ممنوع کلاسیکی در مکانیک کوانتومی برداشته می‌شود و ذره کوانتومی می‌تواند با انرژی پایین‌تر از سد در آن نفوذ کند. در مورد گرافین، به طور شگفت انگیزی احتمال عبور برای ذراتی که به طور عمود بر سطح فرود می‌آیند، صرفنظر از ارتفاع و پهنای سد همواره برابر ۱ است [۳۴–۳۶]. در حالیکه برای نیمه رساناهای دیگر وقتی سد پتانسیل از گاف بین نواری کوچکتر باشد، از معادله شرودینگر نتیجه می‌شود که احتمال نفوذ با پهنا و ارتفاع سد به طور نمایی کاهش می‌یابد که چنین پدیده‌ای به تناقض کلاین[۲] معروف است.

این پایان‌نامه که ما در آن به بررسی حالات مقید الکترون در گرافین گاف‌دار می‌پردازیم به سه فصل تقسیم شده است. در فصل اول ابتدا به معرفی گرافین خواهیم پرداخت و با استفاده از روش تنگ-بست[۳] هامیلتونی مؤثر یا همان هامیلتونی دیراک در انرژی‌های کم، حاکم بر فرمیون‌های دیراک را به دست می‌آوریم و سپس به معرفی برخی از خواص یکتای گرافین می‌پردازیم. در فصل دوم گرافین گاف‌دار، نقاط کوانتومی و اهمیت آن‌ها را بررسی می‌کنیم و در ادامه مروری بر روش‌های ممکن برای ایجاد گاف را که تاکنون پیشنهاد یا انجام شده است، خواهیم داشت. در فصل سوم با حل معادله دیراک در دستگاه مختصات قطبی با در نظر گرفتن گاف برای گرافین، توابع موج و انرژی را به دست می‌آوریم و سپس با حل این معادله بدون در نظر گرفتن گاف در یک ناحیهٔ محدودی از گرافین، حالت‌های مقید الکترون که مربوط به انرژی های مجاز در گاف می‌باشند را به دست می‌آوریم و در نهایت نتایج به دست آمده در این کار را بیان خواهیم کرد.

---

۱ Heisenberg

۲ Klein paradox

۳ Tight-Binding

فصل اول

آشنایی با گرافین

گرافین به علت دارا بودن ساختار نواری متمایز، ویژگی‌های خاصی از خود نشان می‌دهد و همین امر موجب توجه گسترده دانشمندان و صنایع مختلف شده است و کاربردهای منحصر به فردی برای گرافین در آینده نه چندان دور پیش‌بینی می‌شود. در این فصل مروری بر روش‌های ساخت گرافین و ویژگی‌های الکترونی خاص آن خواهیم داشت.

۱.۱ مروری چند بر روش های ساخت گرافین

با کشف گرافین، اولین ماده دو بعدی جهان، مواد دو بعدی دیگری هم کشف و ساخته شدند از قبیل: بورن نیترایدِ [۱]، میکا [۲] و دیگر مواد اکسیدی پیچیده [۳] که در ابتدا همگی با استفاده از " روش رویه

---

[۱] Boron Nitride

[۲] Mica

[۳] Complex oxides