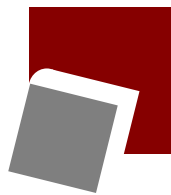


وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه
گوازنک - زنجان



ترابرد الکترونی در نانوساختارهای گرافین دولایه

پایان نامه کارشناسی ارشد
پروین بیاتی

اساتید راهنما:

دکتر مالک زارعیان
دکتر علی قربانزاده مقدم

شهریور ماه ۱۳۸۹

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

تقدیم به

پدر و مادرم که زندگیشان را به ایثار
نشسته‌اند.

قدردانی و تشکر

حمد و سپاس بی‌قیاس به درگاه معبودی که آدمی را به فضیلت نطق و مزیت عقل از دیگر مخلوقات جهان ممتاز گردانید. و سپاس که توفیق داد تا سرشارترین لحظه‌های زندگی‌م را در راه دانش سپری کنم، راهی که در آن وامدار بزرگانی چون اساتید و معلمان دلسوز و دوستان یار و همراه هستم.

اکنون که به لطف حق موفق به انجام پژوهش و نگارش این رساله شده‌ام بر خود لازم می‌دانم از زحمات اساتید ارجمند آقای دکتر زارعیان و آقای دکتر قربانزاده تشکر نمایم. به ویژه از آقای دکتر قربانزاده که با آرامش، گشاده‌رویی و علاقه‌مندی فراوان از علم و دانش خود مرا بهره‌مند ساخته و در کلیه مراحل پژوهش یاری‌گر من بودند صمیمانه تشکر می‌نمایم.

پدر و مادر مهرورزم را به پاس محبت‌های بی‌دریغشان و خواهان و برادران مهربانم را که در تمامی مراحل تحصیلی دلسوزانه در کنارم بوده و از هیچ کمکی دریغ نورزیدند سپاسگزارم. به امید آنکه بتوانم ذره‌ای از محبت‌های بی‌پایانشان را جبران کنم.

در نهایت از جناب آقای پروفیسور ثبوتی، به خاطر فراهم نمودن محیط علمی برای پژوهش و ارتقای دانش تشکر و قدردانی ویژه‌ای دارم.

چکیده

گرافین دولایه سیستمی متشکل از دو ورقه گرافین است که روی هم قرار گرفته‌اند. در میان همه مواد پایه کربنی که اخیراً مورد توجه قرار گرفته‌اند گرافین دولایه یکی از مهم‌ترین آنها است. زیرا تنها ماده‌ی دوبعدی است که گاف بین نوارهای رسانش و ظرفیت آن را می‌توان با به کار بردن میدان الکتریکی خارجی عمود بر لایه‌ها یا با افزودن یک ماده شیمیایی خاص به یکی از لایه‌ها کنترل کرد. این ویژگی آن را نماینده‌ی مناسبی برای کاربردهای آینده در نانو الکترونیک می‌سازد. چون ساختار نواری یکی از راه‌های درک خواص مواد به ویژه خواص الکترونیکی آنها است، تلاش‌های بسیاری برای مطالعه ساختار نواری گرافین دولایه به کار برده شده است. در این خصوص مهم‌ترین موضوع این بود که بفهمند پاشندگی خطی نزدیک نقاط موسوم به نقاط دیراک در گرافین تک‌لایه با وجود جهش‌های بین لایه‌ای در گرافین دولایه چگونه تغییر می‌کند. اکنون ثابت شده است که حتی کمترین جهش بین لایه‌ای پاشندگی خطی گرافین تک‌لایه را از بین می‌برد و آن را به پاشندگی سهموی برای گرافین دولایه تبدیل می‌کند. این رابطه پاشندگی سهموی سبب می‌شود که گرافین دولایه رفتار متفاوتی نسبت به تک‌لایه در اثر کوانتومی هال، تونل زنی و ... داشته باشد.

در این رساله ترابرد کوانتومی در نانو ساختارهای گرافینی دولایه را بررسی می‌کنیم. ابتدا به ویژگی‌های گرافین دولایه به خصوص امکان ایجاد گاف، که آن را از گرافین تک‌لایه و سایر سیستم‌های دوبعدی ممتاز می‌کند، خواهیم پرداخت. سپس رفتار کمینه‌ی رسانندگی در گرافین دولایه بدون گاف و نیز در حضور گاف بررسی می‌شود. خواهیم دید که در دولایه هم مانند تک‌لایه، با وجود تفاوت در رابطه‌ی پاشندگی آنها، در نقطه‌ی دیراک که چگالی حالتها به صفر می‌رسد ترابرد الکترونی وجود دارد و رسانندگی به جای صفر شدن به کمینه‌ای می‌رسد که این کمینه‌ی رسانندگی در دولایه، در حد طول‌های کم، دو برابر تک‌لایه است. با به دست آوردن عامل فانو که معیاری از همبستگی‌ها در ترابرد است، نشان می‌دهیم که ترابرد در نزدیکی نقطه‌ی دیراک رفتاری همانند گرافین تک‌لایه و سیستم‌های بی‌نظم دارد. اما در حضور گاف این مقدار کمینه برای رسانندگی کاهش یافته و با افزایش گاف انرژی رسانندگی به صفر می‌رسد و ترابرد الکترونی در این حالت تونلی است.

در ادامه به بررسی رسانش در اتصالات های $n - n$ و $p - n$ نانونوارهای گرافینی دولایه به روش تابع گرین غیر تعادلی که در فصل دوم شرح داده می شود، می پردازیم. در اتصالات های $n - n$ رسانش کوانتیده و بسته به نوع نانونوار، زیگزاگی یا صندلی شکل، متفاوت است. ولی در اتصالات های $p - n$ رسانش به طور قابل توجهی نسبت به اتصال $n - n$ کمتر بوده و همچنین کوانتیده هم نیست.

همچنین خواهیم دید که گرافین عدد کوانتومی به نام شبه اسپین دارد که از تقسیم شبکه ی لانه زنبوری غیربراهوی آن به دوزیر شبکه ی مثلثی براوه ناشی می شود. در گرافین دولایه بر خلاف تک لایه این درجه آزادی را می توان به طور مستقل از تکانه کنترل کرد. به طوریکه با اعمال میدان الکتریکی خارجی عمود بر لایه ها، که سبب ایجاد گاف نواری می شود، برای شبه اسپین مؤلفه ای عمود بر لایه ها وابسته به میدان الکتریکی ایجاد می شود که با تغییر قطبش و اندازه ی میدان، قطبش و اندازه ی این مؤلفه از شبه اسپین هم تغییر می کند. بنابراین با کنترل آن می توان درجه ی شبه اسپینی، در مقایسه با درجه ی اسپینی در ساختارهای نیم رسانای معمولی، ایجاد کرد که در بخش پایانی این رساله به این موضوع خواهیم پرداخت.

فهرست

چکیده	پنج
مقدمه	نه

۱ گرافین دو لایه

۱.۱	ساختار شبکه و طیف انرژی	۱
۲.۱	حد انرژی های پایین و دستوارگی حالتها	۷
۳.۱	تونل زنی	۹
۴.۱	اثر کوانتومی هال	۱۱
۵.۱	گاف انرژی	۱۴
۶.۱	اعوجاج مثلثی	۱۵
۷.۱	پایداری گرافین دولایه‌ی بدون گاف در برابر نظم فروالکتریکی	۱۶

۲ محاسبه‌ی ترابرد با استفاده از روش تابع گرین غیر تعادلی

۲۲	تابع گرین و ویژگی های آن	۱.۲
۲۳	توابع گرین تأخیری و تقدّمی	۱.۱.۲
۲۷	تابع طیفی و تابع پهن‌شدگی	۲.۱.۲
۳۰	سیستمی متصل به دو منبع	۲.۲
۳۳	معادله‌ی جریان و ضریب عبور	۱.۲.۲
۳۴	محاسبه‌ی خودانرژی	۲.۲.۲

۳ رسانندگی در گرافین دولایه

۴۳	کمینه‌ی رسانندگی در حضور گاف (حالت کپه‌ای)	۱.۳
۴۴	عامل فانو	۱.۱.۳
۴۵	تأثیر حضور گاف	۲.۱.۳
۴۸	رسانندگی در راز نقطه‌ی صفر انرژی	۲.۳
۵۱	نانونوارهای گرافینی دولایه	۳.۳
۵۵	اتصال‌های $p-n$ در نانو نوارهای گرافین دولایه	۴.۳
۵۷	دریچه‌ی شبه‌اسپین	۵.۳
۶۰	دریچه‌ی شبه‌اسپین در نانونوارها	۱.۵.۳
۶۱	نتیجه‌گیری	۶.۳
۶۳	پیوست	
۶۶	مراجع	

مقدمه

کربن نقش منحصر به فردی در طبیعت بازی می کند. در حقیقت تشکیل کربن در ستاره‌ها نتیجه‌ای از ترکیب سه ذره α است که وجود عناصر شیمیایی نسبتاً سنگین را در جهان ممکن می‌کند. کربن می‌تواند تعداد ساختارهای بسیار متفاوتی تشکیل دهد. از جمله‌ی این ترکیبات آلوتروپ‌ها هستند. آلوتروپ نوعی از ماده است که فقط شامل یک نوع اتم باشد. آلوتروپ‌های سه‌بعدی کربن گرافیت و الماس هستند که از دوران باستان شناخته شده بودند. شکل یک‌بعدی آنها نانولوله‌های کربنی و شکل صفربعدی آنها فولرین‌ها^۱ هستند که طی ده تا بیست سال اخیر کشف شده‌اند. آلوتروپ دوبعدی کربن که گرافین نامیده می‌شود صفحه‌ای دوبعدی از اتم‌های کربن به ضخامت یک اتم است که در شبکه کریستالی لانه‌زنبوری قرار گرفته‌اند. طول پیوند کربن-کربن در گرافین 0.142 nm است. این ساختار در آلوتروپ‌های دیگر کربن هم تکرار می‌شود، گرافیت شامل چندین صفحه گرافین است که توسط پیوندهای ضعیف وان دروالس روی هم قرار گرفته‌اند.

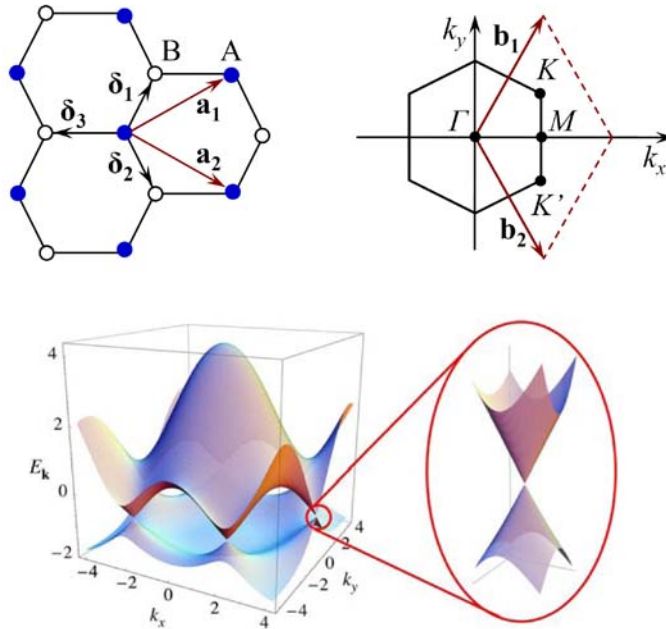
از اینرو گرافین مبنایی برای بررسی دیگر آلوتروپ‌های کربن است اما با این وجود تلاش‌های جدی برای مشاهده آن در آزمایشگاه با شکست مواجه می‌شد و تنها در سال 2004 برای نخستین بار در آزمایشگاه به صورت آزاد و منزوی از گرافیت جدا و شناسایی شد [۱]. دلیل این همه تاخیر در سنتز تجربی گرافین به دو مسئله برمی‌گشت. نخست آنکه از دید مطالعات مکانیک آماری و نظریه گذارهای فاز وجود گرافین به صورت آزادانه و پایدار از نظر ترمودینامیکی بسیار بعید به نظر می‌رسید [۲]. دوم آنکه در صورت وجود گرافین ابزار تجربی مناسبی برای شناسایی و آشکار کردن آن که غشایی تک‌اتمی است در میان آثار به جامانده از لایه‌های گرافیت وجود نداشت. با این حال در نهایت وجود گرافین با استفاده از این اثر اپتیکی که وقتی روی زیرلایه‌ی SiO_2 قرار بگیرد امکان مشاهده‌ی آن با میکروسکوپ نوری به وجود می‌آید، با دقت بالا آشکار سازی شد [۳]. یکی از دلایل پایداری این ساختار دوبعدی رشد دادن آن روی زیرلایه است به طوری که گرافین به زیرلایه چسبیده و آزاد نیست. دلیل دیگر آن این است که سطح آن کاملاً هموار نیست بلکه به خاطر افت‌وخیزهای گرمایی ناهمواری‌هایی دارد.

همانطور که اشاره شد گرافین شبکه‌ای لانه‌زنبوری از اتم‌های کربن است. این شبکه براوه نیست ولی می‌توان آنرا به صورت دوزیر شبکه مثلثی A و B که هر کدام یک شبکه براوه تشکیل می‌دهند در نظر گرفت. بردارهای

^۱ fullerenes

پایه را می‌توان به صورت $a_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3})$ و $a_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3})$ نوشت که $a \approx 1.42 \text{ \AA}$ فاصله بین دو اتم کربن است. بردارهای شبکه وارون متناظر هم با $b_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3})$ و $b_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3})$ داده می‌شوند. بنابراین شبکه‌ی وارون نیز به صورت مثلثی و ناحیه‌ی بریلوئن به صورت شش ضلعی خواهد بود.

محاسبات ساختار نواری گرافین با استفاده از مدل تنگابست نزدیکترین همسایه‌ها نشان می‌دهد که گرافین یک نیم‌رسانای بدون گاف است. رابطه‌ی انرژی و بردار موج برای انرژی‌های کم نزدیک رئوس ناحیه‌ی بریلوئن خطی است که به جرم موثر صفر برای الکترون‌ها و حفره‌ها منجر می‌شود. به دلیل این رابطه پاشندگی خطی در انرژی‌های کم، الکترون‌ها و حفره‌ها نزدیک این شش نقطه (که فقط دو تای آنها از هم متفاوتند) مانند ذرات نسبیاتی، که با معادله‌ی دیراک برای ذرات با اسپین $1/2$ توصیف می‌شوند، رفتار می‌کنند. چون این الکترون‌ها و حفره‌ها به فرمیون‌های دیراک موسومند این شش نقطه‌ی ناحیه‌ی بریلوئن نقاط دیراک نامیده می‌شوند. رابطه‌ی $E - \vec{k}$ به صورت $E \approx \hbar v_F |\vec{k}|$ است که $v_F \approx 10^6 \text{ m/s}$ سرعت فرمی است که به جای سرعت نور در معادله‌ی فرمیون‌های دیراک نشسته است. شکل (۱.۰) ساختار شبکه به همراه ناحیه‌ی اول بریلوئن و طیف انرژی آن را نشان می‌دهد.



شکل ۱.۰: (بالا چپ) ساختار شبکه گرافین تک لایه که a_1 و a_2 بردارهای شبکه و δ_i بردارهای همسایه‌های نزدیک هستند. (بالا راست) ناحیه‌ی اول بریلوئن و نقاط پرتقارن (پایین) طیف انرژی

اگر چه طیف خطی مهم است اما تنها ویژگی گرافین نیست. در نظر گرفتن گرافین به صورت دو زیر شبکه‌ی A و B منجر به توصیف دو مولفه‌ای برای آن شبیه به مورد توابع موج اسپینوری در الکترو دینامیک کوانتومی (QED) می‌شود. اما در اینجا واژه اسپین به زیر شبکه‌ها برمی‌گردد نه به الکترون‌ها و معمولاً به شبه اسپین^۱ موسوم است. بنابراین مانند فرمیون‌های دیراک دستاوردی^۲ خواهد داشت به طوری که اسپین یا در جهت حرکت ذرات (برای الکترون‌ها) و یا در خلاف جهت حرکت آنها (برای حفره‌ها) است.

به دلیل این ساختار نواری انتظار می‌رود ویژگی‌های شبه نسبتی در رفتار الکترونیکی گرافین ظهور یابد که سبب رفتارهای غیر عادی در گرافین می‌شود مانند اثر کوانتومی هال نیمه صحیح، تونل زنی کلاین، وجود کمینه‌ی غیر صفر برای رسانندگی با وجود صفر شدن حامل‌های بار در نقاط دیراک [۷ و ۱۴ و ۱۸].

از ویژگی‌های بارز دیگر گرافین تحرک پذیری^۳ بسیار بالای آن است که حتی در دمای اتاق به حدود $10^5 \text{ cm}^2/V.s$ می‌رسد [۱۹] در حالی که بالاترین تحرک پذیری برای الکترون‌ها در مواد دیگر برای مسافت^۴ $Si - SiO_2(100)$ در حدود $25 \times 10^3 \text{ cm}^2/V.s$ در دمای اتاق گزارش شده است [۲۰]. از طرفی قابلیت کنترل نوع و حامل‌های بار توسط ولتاژ گیت یا آلایش شیمیایی [۲۱] و همچنین توانایی ایجاد گاف در آن به وسیله‌ی شکست تقارن زیر شبکه‌ها (رشد دادن آن روی زیر لایه‌ی SiC [۲۲]، نیتريد کربن [۲۳]) یا محدود کردن اندازه‌ی آن، گرافین را جایگزین مناسبی برای سیلیکون در ساختارهای نیم رسانا ساخته است. علاوه بر تحرک پذیری، رسانندگی گرمایی گرافین هم بسیار بالا است به طوری که رسانندگی گرمایی آن در حدود $5.3 \times 10^3 \text{ W/mK}$ در دمای اتاق است که از مقدار آن برای نانولوله‌های کربنی هم بیشتر است [۲۴].

ویژگی مهم دیگر گرافین در نانونوارهای گرافینی بروز پیدا می‌کند. نانونوارها در واقع نوارهایی با عرض و پهنای محدود از گرافین هستند که شکل لبه‌ی آنها می‌تواند به دو شکل متفاوت زیگزاگی و صندلی شکل باشد (شکل (۲.۰)). خواص الکترونیکی آنها به شدت به نوع لبه بستگی دارد. نانونوار با لبه‌ی زیگزاگ دارای خاصیت صافی‌گری نسبت به وادی‌ها^۵ است به این معنی که به ازای تکانه‌ی عرضی مشخص موج مربوط به هر وادی تنها در یک جهت عبور داده می‌شود به این ترتیب می‌توان درجه‌ی آزادی وادی را کنترل کرد که امکان طراحی ترانزیستورهایی بر مبنای آن را ممکن می‌کند.

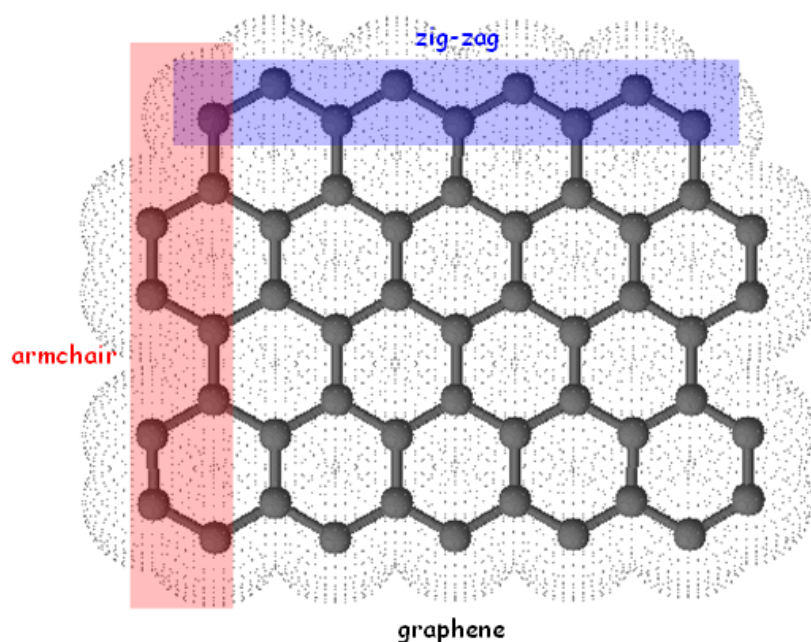
^۱ pseudospin

^۲ chirality

^۳ mobility

^۴ Metal Oxide Semiconductor Field-Effect Transistor (MOSFET)

^۵ valley



شکل ۲۰۰: نوار گرافینی با لبه‌های زیگزاگی و صندلی شکل

علاوه بر این در این نوع از نانونوارها تکانه‌ی عرضی می‌تواند موهومی شود که به حالت‌های لبه‌ای جایگزیده نزدیک انرژی صفر منجر می‌شود. این حالت‌ها وقتی که اثرات برهمکنش الکترونی را در نظر بگیریم سبب ایجاد گاف الکترونیکی می‌شوند.

نانونوارهای صندلی شکل بسته به اندازه‌ی عرضشان می‌توانند فلزی یا نیم‌رسانا باشند که گافی متناسب با عکس اندازه‌ی عرض نوار دارند. برخلاف حالت زیگزاگی، نوارهای صندلی شکل خاصیت صافی‌گری و حالت‌های لبه‌ای ندارند اما در این مورد تبهگنی وادی از بین می‌رود و به همین دلیل می‌توان از آن در ایجاد نقاط کوانتومی^۱ استفاده کرد [۱۴].

در فصل اول از این رساله به معرفی گرافین دولایه و ویژگی‌های خاص آن خواهیم پرداخت. گرافین دولایه متشکل از دو لایه‌ی گرافین است که توسط نیروهای ضعیف واندروالسی به هم جفت شده‌اند. بسته به نحوه‌ی قرار گرفتن دولایه بر روی هم، برهمکنش بین لایه‌ها متفاوت خواهد بود. با در نظر گرفتن ساختار برنال^۲ و با

^۱ quantum dots

^۲ Bernal

استفاده از هامیلتونی تنگابست طیف انرژی آن را به دست می آوریم که همانند تک لایه طیف شبه نسبیتی دارد و بر خلاف آن طیفی سهموی است. از اینرو فرمیون های دیراک در گرافین دولایه خاصیت دستوارگی داشته و جرم دارند. دولایه هم مانند تک لایه نیم رسانای بدون گاف است اما خواهیم دید که با اعمال میدان الکتریکی خارجی عمود بر لایه ها می توان گافی قابل کنترل در طیف ایجاد کرد. این ویژگی منحصر به فردی است که آن را از تک لایه و سایر سیستم های دوبعدی ممتاز می کند.

برای بررسی خواص تراپردی و به دست آوردن رسانش در گرافین دولایه از فرمول لاندائور – بوتیکر^۱ $G = \frac{2e^2}{h} Tr(tt^\dagger)$ لازم است که ماتریس پراکندگی S ، که پاسخ در یکی از منابع ناشی از برانگیختگی در منبعی دیگر را مشخص می کند، و از آنجا احتمال عبور tt^\dagger را به دست آوریم. اما محاسبه ی ماتریس پراکندگی در هر سیستمی با شکل دلخواه کار ساده ای نیست و به جای آن استفاده از مفهوم تابع گرین که بر خلاف ماتریس S پاسخ هر نقطه از سیستم (داخل یا خارج رسانا) ناشی از برانگیختگی در هر نقطه ی دیگر را می دهد و به دست آوردن هامیلتونی مورد نیاز برای مسئله به روش تنگابست روش ساده و مفیدتری است. در فصل دوم این روش موسوم به روش تابع گرین غیر تعادلی معرفی می شود. این روش فوق العاده سریع بوده و پس از ۱۲ تا ۱۴ بار تکرار همگرا می شود.

فصل سوم مربوط به رسانندگی در گرافین دولایه است. کمینه ی رسانندگی در گرافین دولایه ی بدون گاف در حد طول های کم دو برابر مقدار تک لایه است به گونه ای که دولایه مستقل از هم بوده و بر همکنش بین لایه ای تأثیری در این کمینه ندارد. اما با ایجاد و افزایش گاف این کمینه به صفر میل می کند.

در ادامه ویژگی های نانونوارهای گرافینی دولایه را بررسی می کنیم. نانونوارهای زیگزاگی شکل علاوه بر دو حالت لبه ای موجود در تک لایه، دو حالت لبه ای پاشنده دیگر هم دارند که به ناحیه ی گاف نفوذ کرده اند. در حالی که نوارهای صندلی شکل هم حالت های لبه ای و هم تبهگنی وادی ندارند. به دلیل وجود این تفاوت، رسانش در دو نوار، به خصوص در ناحیه ی گاف، متفاوت خواهد بود.

ادامه ی فصل سوم به ترابرد در اتصال های $n - n$ و $p - n$ نانونوارهای گرافینی دولایه اختصاص می یابد. خواهیم دید که در اتصال های $n - n$ به دلیل محدود بودن اندازه و کوانتیده شدن انرژی، رسانش تقریباً کوانتیده است و سکوهایی با فاصله ی یکسان از هم دیده می شوند. در نوار زیگزاگ به دلیل وجود تبهگنی وادی رسانش به

^۱ Landauer-Büttiker

صورت $G = 2(n + 1)G_0$ بوده و سکوها به اندازه‌ی $2G_0$ از هم فاصله دارند. ولی در نوار صندلی شکل به دلیل نبود تبهگنی وادی رسانش به صورت $G = nG_0$ بوده و سکوها به اندازه‌ی G_0 از هم فاصله دارند. در حالی که در اتصال‌های $p - n$ هیچ سکویی در رسانش وجود ندارد و رسانش همواره کمتر از مقدار متناظر آن در اتصال $n - n$ است.

بخش بعدی فصل سوم به پدیده‌ی دریچه‌ی شبه‌اسپینی^۱ PSV در گرافین دولایه می‌پردازد. این پدیده از این ویژگی گرافین دولایه ناشی می‌شود که برخلاف تک‌لایه که درجه‌ی آزادی شبه‌اسپین فرمیون‌های دیراک به‌طور قطعی به جهت تکانه‌ی آنها پیوند خورده و بنابراین مقید است که در صفحه‌ی دوبعدی گرافین بماند، با به کار بردن میدان الکتریکی عمود بر لایه‌ها مؤلفه‌ای عمود بر صفحه‌ی گرافین برای شبه‌اسپین ایجاد می‌شود که می‌توان آنرا با تغییر اندازه و جهت میدان و مستقل از تکانه کنترل کرد. خواهیم دید که این دریچه‌ی شبه‌اسپینی در نانونوارها باز هم از نوع نوار متأثر می‌شود و بسته به نوع نوار در محدوده‌ی انرژی‌های متفاوتی رخ می‌دهد.

^۱ Pseudospin valve

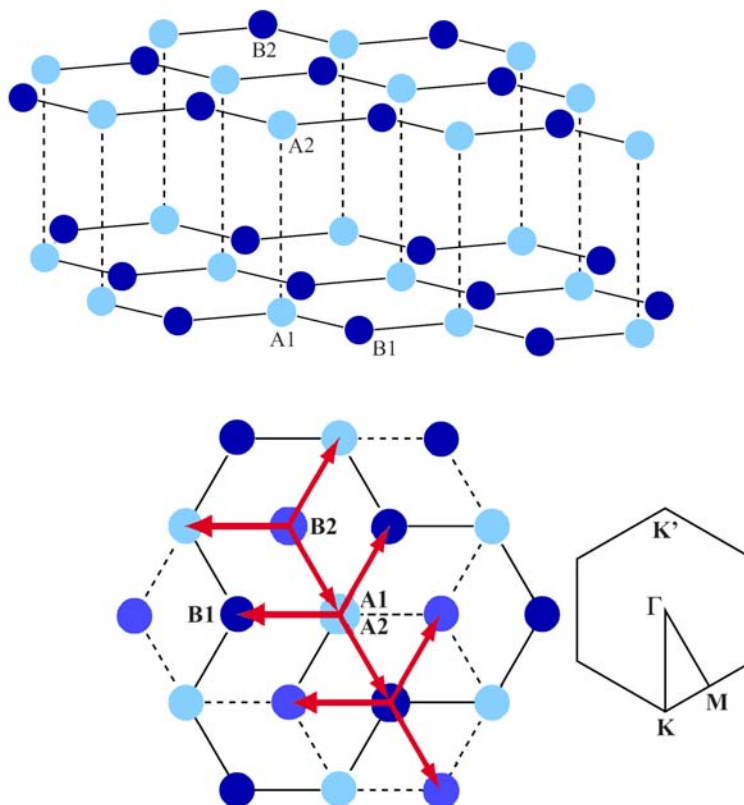
فصل اول

گرافین دو لایه

۱.۱ ساختار شبکه و طیف انرژی

گرافین دولایه متشکل از دو لایه گرافین است که توسط نیروهای ضعیف واندروالسی به هم جفت شده‌اند. برای مطالعه ساختار الکترونیکی آن از مدل تنگابست استفاده می‌شود. در این روش نه تنها برهمکنش بین نزدیکترین همسایه‌ها در داخل صفحه بلکه برهمکنش بین همسایه‌ها در لایه‌های مختلف را هم باید وارد کرد. برهمکنش بین لایه‌ها شدیداً به نحوه‌ی قرار گرفتن لایه‌ها نسبت به هم بستگی دارد. ما ساختار برنال، که نحوه‌ی قرار گرفتن لایه‌ها بر روی هم در گرافیت را توصیف می‌کند، را در نظر می‌گیریم. در این روش اتم‌های A_1 و A_2 از دولایه دقیقاً بر روی هم قرار گرفته‌اند و سپس یکی از لایه‌ها حول محوری گذرنده از این دو اتم به اندازه‌ی $\pi/3$ نسبت به دیگری چرخیده است به طوری که اتم‌های زیرشبکه‌ی B ی هر لایه وسط شش ضلعی لایه‌ی دیگر قرار می‌گیرند. فاصله‌ی بین دو اتم در یک لایه $a \simeq 1.42 \text{ \AA}$ و فاصله‌ی جدایی دولایه $d \simeq 3.35 \text{ \AA}$ است. چون در راستای \hat{z} هیچ تناوبی ندارد ناحیه‌ی بریلوئن آن همانند تک لایه است. سلول واحد گرافین دولایه از چهار اتم A_1 ، A_2 ، B_1 و B_2 تشکیل یافته است. ساختار شبکه و اولین ناحیه‌ی بریلوئن آن در شکل (۱.۱) نشان داده

شده‌اند.



شکل ۱.۱: ساختار شبکه‌ای گرافین دولایه از دید سه‌بعدی و دید از بالا به همراه ناحیه‌ی اول بریلوئن متناظر آن.

بدین ترتیب محاسبات مدل تنگابستی برای گرافین دولایه جملات برهمکنشی زیر را در بر می‌گیرد:

جهش میان اتم‌های مجاور از زیر شبکه‌های مختلف در داخل هر لایه $A_1 - B_1$ و $A_2 - B_2$ را با t نشان می‌دهیم که مشابه گرافین تک لایه است و به هامیلتونی دیراک با سرعت داخل صفحه‌ای $v_F = \frac{3}{2}at$ منجر می‌شود. بزرگی آن با توجه به همین رابطه برابر $3.1eV$ به دست می‌آید و اندازه گیری‌های پراکندگی رامان^۱ نیز همین مقدار را برای گرافین دولایه تایید می‌کند [۴ و ۵].

جهش بین $A_1 - A_2$ که جهشی بین لایه‌ای بوده و با t_{\perp} داده می‌شود و به علت عمود بر صفحه بودن در فضای تکانه از تکانه‌ی دو بعدی (k_x, k_y) مستقل است. مقدار آن به کمک طیف سنجی تابش فوتونی زاویه‌ای^۲

^۱ Raman

^۲ Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy (ARPES)

ARPES و رامان $t_{\perp} = 0.43eV$ و $t_{\perp} = 0.3eV$ به دست می‌آید [۶ و ۴ و ۵].

جهش بین لایه‌ای دیگر t_3 است که جفت‌شدگی همسایه‌های دوم از دولایه $B_1 - B_2$ را توصیف می‌کند. برخلاف t_{\perp} ، t_3 به تکانه وابسته است که شکل وابستگی آن مثل جهش داخل صفحه بوده و در حد انرژی‌های کم به وابستگی خطی دیراک‌گونه نسبت به تکانه با سرعت مؤثر $v_3 = \frac{3}{2}at_3$ منجر می‌شود. مقدار این پارامتر هم با استفاده از اندازه‌گیری‌های طیف رامان برابر $t_3 = 0.315eV$ برای گرافیت و برای خود گرافین دولایه $t_3 = 0.1eV$ به دست می‌آید [۸ و ۴].

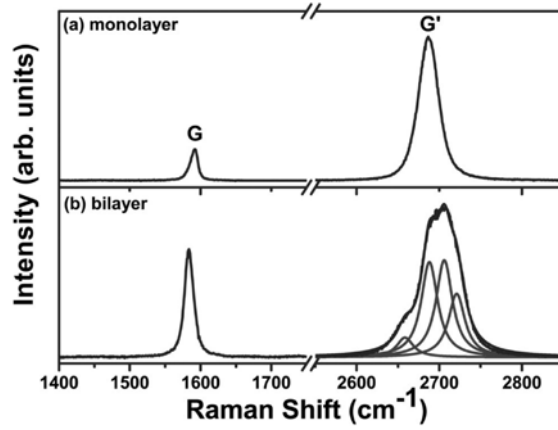
علاوه بر این‌ها جهش‌های دیگری بین اتم‌های $A_1 - B_2$ و $B_1 - A_2$ وجود دارد که انرژی جهش آنها برابر $t_4 = 0.044eV$ است. همچنین به دلیل تفاوت ساختاری زیرشبکه‌های A و B ، انرژی‌های آنها به اندازه‌ی $\Delta \sim 8meV$ [۴] متفاوت خواهد بود. ولی مقادیر این دو پارامتر در مقایسه با پارامترهای دیگر کوچک بوده و تأثیر آنها روی طیف انرژی تنها شکست تقارن الکترون و حفره است از اینرو معمولاً از آنها صرف نظر می‌شود.

همانطور که گفته شد معمولاً برای تعیین این مقادیر به طور تجربی از اندازه‌گیری‌های طیف رامان استفاده می‌شود. طیف‌سنجی رامان یک تکنیک طیف‌سنجی ارتعاشی است که می‌تواند برای آشکارسازی گونه‌های معدنی و آلی و اندازه‌گیری بلوریت جامدات به کار رود. هنگامی که نور از سطح یک نمونه پراکنده می‌شود، نور پراکنده‌شده نه تنها عمدتاً شامل طول‌موج‌هایی است که به روی نمونه برخورد کرده بودند، بلکه طول‌موج‌های متفاوتی را در شدت‌های خیلی پایین، که برهمکنش نور برخوردی با ماده را نشان می‌دهند، دربر می‌گیرد. برهمکنش نور برخوردی با فونون‌های نوری پراکندگی رامان نامیده می‌شود که در آن جابه‌جایی انرژی بسیار کوچک است. برای مثال، انرژی فونون نوری در سیلیکون حدود $0.064 eV$ است در حالیکه انرژی فوتون تابیده‌شده چند eV است (نور لیزر آرگون با $\lambda = 488 nm$ انرژی برابر $h\nu = 2.54 eV$ دارد). از آنجاییکه شدت نور پراکنده‌شده‌ی رامان خیلی ضعیف است، طیف‌سنجی رامان فقط زمانی کارا است که یک منبع نور شدید همانند لیزر در این روش استفاده شود. طیف‌سنجی رامان براساس اثر رامان که اولین بار در سال ۱۹۲۸

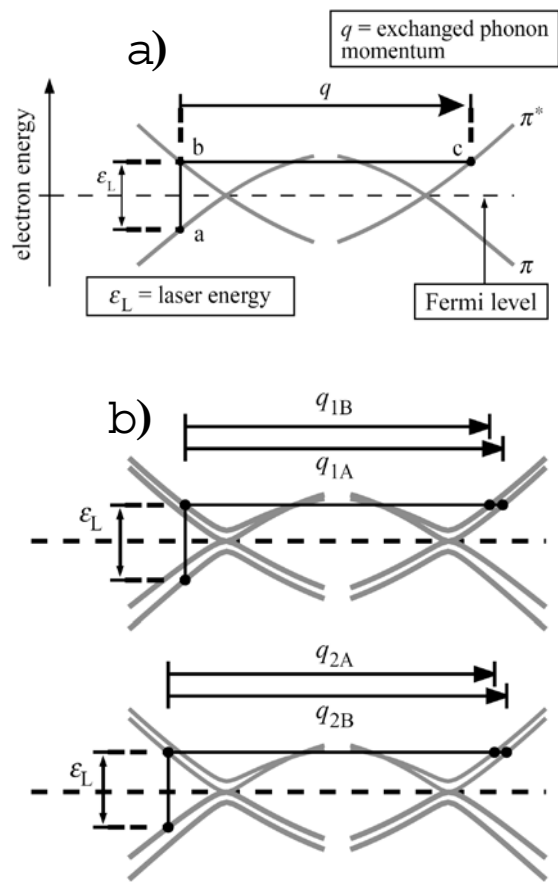
توسط رامان گزارش شد استوار است. اگر فوتون برخوردی انرژی خود را به شبکه‌ی کریستالی به شکل یک فونون بدهد (تابش فونون)، به یک فوتون کم انرژی تبدیل می‌شود. طول موج‌های نور پراکنده شده تحلیل شده و با طول موج‌های شناخته شده برای تعیین ماهیت نمونه مقایسه می‌شود. با این روش می‌توان خواص متنوعی از نمونه، ساختار کریستالی، نقص‌های موجود در ساختار و ... را مشخص نمود.

در طیف رامان گرافین تک لایه و دولایه دو پیک شدید دیده می‌شود. اولین پیک که در مرتبه‌ی اول پراکندگی رامان رخ می‌دهد نوار G نامیده می‌شود و با مد مرئی ارتعاش دو اتم کربن همسایه در یک لایه‌ی گرافین متناظر است که در گرافیت در 1582 cm^{-1} رخ می‌دهد اما در گرافین تک لایه تقریباً به اندازه‌ی 5 cm^{-1} به سمت بردار موج‌های کمتر (ω های کم) جابه‌جا می‌شود. جابه‌جایی به سمت ω های کم از وابستگی ω_G به تعداد لایه‌ها n به صورت $1/n$ بدون تغییر عمده‌ای در شدت پراکندگی رامان ناشی می‌شود. این وابستگی به تعداد لایه‌ها می‌تواند برای مشخص کردن تعداد لایه‌های گرافین به کار رود.

پیک دیگر که نوار G' نامیده می‌شود و تقریباً در تمام مواد کربنی sp^2 وجود دارد، ω ی آن به شدت لیزر به کار برده شده بستگی دارد و برای تک لایه در شدت لیزر $2/41 \text{ eV}$ در 2700 cm^{-1} رخ می‌دهد. این پیک از مرتبه‌ی دوم پراکندگی رامان و از یک فرآیند تشدید دوگانه که از دو فونون با بردار موج‌های مخالف هم تشکیل شده ناشی می‌شود. در این فرآیند یک الکترون در نقطه‌ی دیراک K به نقطه‌ی دیراک همسایه K' و سپس دوباره به نقطه‌ی K پراکنده می‌شود. بنابراین دو فونون با بردار موج مخالف هم خلق می‌شوند. برای تک لایه فقط یک پیک در G' دیده می‌شود ولی برای دولایه چهار امکان برای فرآیند تشدید دوگانه وجود دارد (شکل (۳.۱)) بنابراین چهار نوار مختلف G' در طیف رامان دولایه قابل مشاهده است. طیف رامان برای تک لایه و دولایه در شکل (۲.۱) نشان داده شده است. با برازش این نتایج تجربی با تابع لورنتسی با چهار پارامتر قابل کنترل مقدار t ، t_{\perp} ، t_3 و t_4 به دست می‌آیند.



شکل ۲.۱: طیف رامان برای گرافین (a) تک لایه (b) دولایه با شدت لیزر $2/41\text{ eV}$ [۵].



شکل ۳.۱: فرآیند تشدید دوگانه برای نوار G' (a) تک لایه (b) دولایه [۴].

بنابراین هامیلتونی مدل تنگابست برای گرافین دولایه به صورت زیر خواهد بود:

$$H = \begin{pmatrix} \mu_1 & v_F p_- & t_\perp & t_4 \\ v_F p_+ & \mu_1 & t_4 & v_3 p_- \\ t_\perp & t_4 & \mu_2 & v_F p_+ \\ t_4 & v_3 p_+ & v_F p_- & \mu_2 \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

که $p_\pm = p_x \pm ip_y$ تکانه‌های مختلط هستند و هامیلتونی برپایه‌ی حالت‌هایی به شکل $\psi = (\psi_{A_1}, \psi_{B_1}, \psi_{A_2}, \psi_{B_2})^T$ نوشته شده است. μ_1 و μ_2 انرژی پتانسیل الکتروشمیایی اتم‌های دولایه است که می‌توان با اعمال میدان الکتریکی عمود بر لایه‌ها مقادیر متفاوتی به آنها داد. با چشم‌پوشی از t_4 معادله‌ی ویژه‌ی مقداری زیر برای هامیلتونی بالا دست می‌آید،

$$\begin{aligned} & [(\mu_1 - \varepsilon)^2 - v_F^2 |\mathbf{p}|^2][(\mu_2 - \varepsilon)^2 - v_F^2 |\mathbf{p}|^2] - (\mu_1 - \varepsilon)(\mu_2 - \varepsilon)(v_3^2 |\mathbf{p}|^2 + t_\perp^2) \\ & + v_3^2 |\mathbf{p}|^2 t_\perp^2 = 2v_F^2 v_3 |\mathbf{p}|^3 t_\perp \cos(3\varphi) \end{aligned} \quad (2.1)$$

اگر $\mu_1 = V/2$ و $\mu_2 = -V/2$ یعنی اختلاف پتانسیل بین دولایه را V در نظر بگیریم، به رابطه‌ی زیر برای انرژی‌ها می‌رسیم،

$$\varepsilon_\eta^2 = \frac{t_\perp^2}{2} + \frac{V^2}{4} + (v_F^2 + \frac{v_3^2}{2}) |\mathbf{p}|^2 + (-1)^\eta \sqrt{\Gamma} \quad \eta = 1, 2 \quad (3.1)$$

$$\Gamma = \frac{1}{4} (t_\perp^2 - v_3^2 |\mathbf{p}|^2)^2 + v_F^2 |\mathbf{p}|^2 (t_\perp^2 + V^2 + v_3^2 |\mathbf{p}|^2) + 2t_\perp v_3 v_F^2 |\mathbf{p}|^3 \cos(3\varphi)$$

پس چهارنوار انرژی به صورت $\pm \varepsilon_{1,2}$ خواهیم داشت. نوارهای پرانرژی $\pm \varepsilon_2$ از جهش بین لایه‌ای t_\perp ناشی می‌شوند و در نقطه‌ی $|\mathbf{p}| = 0$ به ازای $V = 0$ به اندازه‌ی $2t_\perp$ از هم فاصله دارند. اما نوارهای کم‌انرژی $\pm \varepsilon_1$ در غیاب پتانسیل بین لایه‌ای در نقطه‌ی دیراک به هم می‌رسند. از اینرو گرافین دولایه یک نیم‌رسانای بدون گاف است. شکل (۴.۱) طیف انرژی را به ازای $V = 0$ نشان می‌دهد.