فهرست مطالب

مقدمه.....
.....
.....۱

فصل اول: آشنایی کلی با گرافین

۱-۱ گرافین.....
.....
.....۴

۱-۲ ساختار
گرافین.....
.....
.....۸

۱-۳ رابطه پاشندگی
.....
.....
.....۱۰

۱-۴ چرا حاملهای بار در گرافین با معادله
دیراک توصیف می شوند نه
شرودینگر؟.....
.....
.....۱۸

فصل دوم: پلاسمونها

۲-۱
پلاسمون.....
.....
.....۲۰

۲-۲ پراکندگی پلاسمونهای سطحی روی نانو ذرات فلز..... ۲۳

۲-۳ پلاریتون پلاسمون سطحی..... ۲۸

۲-۴ پلاسمونهای سطحی جایگزیده..... ۳۲

فصل سوم :خواص سیستم های بس ذره ای

۳-۱ مقدمه..... ۳۴

۳-۲ توصیف حالت زمینه سیستم..... ۳۵

۳-۳ فرمول بندی تابع گرین..... ۳۶

۳-۳-۱ تعریف تابع گرین تک ذره ای..... ۳۶

۳-۳-۲ تصویر بر هم کنش.....

.....
۳۷.....

۳-۴ تعریف فاز
اتفاقی(RPA).....
.....
۴۳.....

۳-۵ تابع گرین سیستم بدون بر هم
کنش.....
.....۴۷

۳-۶ روش نموداری
فایمن.....
.....
۴۹.....

۳-۷ تابع دی الکتریک
.....
.....
۵۲.....

۳-۸ تابع دی الکتریک گاز الکترونی آزاد
.....
.....۵۵

۳-۹ پراکندگی گاز الکترون آزاد و حجم
پلاسما.....
.....۶۰

۳-۱۰تابع دی الکتریک وپلاسمونها در لایه دوبعدی
گرافین.....
۶۳.

۳-۱۱ پلاریزیشن گرافین.....
.....
۶۴.....

۳-۱۲ معرفی پارامتر برخورد.....
.....
۶۷.....

۳-۱۳ پلاسمون در RPA
.....
.....
۶۹.

فصل چهارم :بررسی رسانندگی گرمایی پلاسمونی در لایه گرافین

۴-۱ انتقال گرما
.....
.....
۷۲.....

۴-۲ نیروی کاسمایر
.....
.....
.۸۰ .....

فصل پنجم :نتیجه گیری و محاسبات

۵-۱ نتیجه گیری
.....
.....
۸۴.....

۵-۲ چشم انـدازی بـه آیـنـده.....
.....
۹۲.....

مـراجع
.....
.....
۹۳.....

فهرست شکلها

شکل(۱-۱) ساختار شش وجهی گرافین ۹

شکل (۱-۲) فضای معکوس ساختار گرافین ۱۰

شکل (۱-۳) نمایش زاویه φ در فضای تکانه..... ۱۵

شکل (۱-۴) نمایش گاف انرژی صفر در نقاط K ۱۶

شکل (۲-۱) طیف برانگیختگی آرایش نانو ذرات فلز با اشکال مختلف..... ۲۴

شکل (۲-۲)وضعیت پلاسمون سطحی رونده-طیف برانگیختگی..... ۲۸

شکل (۲-۳) نمایش ساختار حمایتی پلاسمونها در سطح میانی..... ۳۰

شکل (۳-۱)بسط بر هم کنش موثر..... ۴۲

شکل (۳-۲) نمایش معادله دایسون توسط نمودارهای فایمن ۵۰

شکل (۳-۳) قطبش تقلیل نا پذیر که توسط جمع زدن نمودارهای فایمن بدست آمده
.....
.....
.....
۵۱ .

شکل (۳-۴) یک نمونه از نمودارهای قطبش پذیری کاهش نا پذیر..... ۵۱

شکل(۳-۵) نمونه ای از نمودارهای قطبش پذیری کاهش پذیر.....۵۲

شکل (۳-۶) تابع دی الکتریک گاز الکترون آزاد منطبق با مقادیر داده های دی الکتریک طلا.....
.....
..... ۵۹

شکل (۳-۷) ضریب شکست مختلط تابع دی الکتریک گاز الکترونی آزاد.....۵۹

شکل (۳-۸) نوسانهای گروهی طولی الکترونهای رسانش فلز..... ۶۱

شکل(۵-۱) نمایش قسمت حقیقی پلاریزیشن گرافین بر حسب x ۸۴

شکل (۵-۲) نمایش قسمت موهومی پلاریزیشن گرافین بر حسبx.....۸۵

شکل (۵-۳) نمایش پلاسمونهای گرافین
.....
.....۸۶

شکل (۵-۴) نمایش پلاسمونها با تغییر زیر لایه.....
.....۸۷

شکل (۵-۵) نمایش پلاسمونها با تغییر چگالی.....
.....۸۸

شکل (۵-۶) نمودار تغییرات رسانندگی گرمایی گرافین با فاصله در دماهای ثابت.....۸۹

شکل (۵-۷) نمودار تغییرات رسانندگی گرمایی گرافین با دما $(\mathbf{1362 = t_f})$.....۹۰

شکل (۵-۸) نمودار تغیرات رسانندگی گرمایی پلاسمونی گرافین با فاصله.....۹۱

شکل (۵-۹)) نمودار تغیرات رسانندگی گرمایی پلاسمونی گرافین با دما.....۹۲

مقدمه

گرافین به عنوان یک ماده کربنی دو بعدی با ساختار شش وجهی وجزئیات الکتریکی غیر عادی و رسانندگی گرمایی خوب ،توجه زیادی را به خود جلب کرده است.

این ماده اولین بار بوسیله یک گروه در دانشگاه منچستر در سال ۲۰۰٤کشف شد.قبل از این کشف (گرافین خالص)از نظر تئوری عقیدهای به وجود آن در طبیعت نداشتند.پیش بینی می‌شد که کریستالهای دو بعدی بطور ترمودینامیکی ناپایا هستند و خودبه خوداز هم پاشیده می‌شوند و یا به ساختار سه بعدی تبدیل می‌شوند.

با بررسی گرافین به نتایج جالبی رسیدند که یکی از آنها طیف پاشندگی انرژی خطی در گوشه های منطقه بریلوئن به جای پاشندگی انرژی سهموی در نیم رساناهای متقارن بود که الکترونها در مجاورت این نقاط دارای خاصیت نسبیتی بودند و از معادله دیراک بی جرم تبعیت می‌کردند.

تابع دی الکتریک لیندهارد برای تقریب فاز اتفاقی ،RPA روشی است که به بررسی پاسخ خطی دینامیکی الکترون در سیستم های الکترونی می پردازد.در این روش فرض می‌شود که الکترونها تنها به یک پتانسیل الکتریکی پاسخ می‌دهند که این پتانسیل جمع پتانسیل برایند است.این روش برای سیستم هایی که $1 > r_s$ دارند مناسب است و ازآنجایی که در گرافین $0.87 = r_s$ است نشان می‌دهد که گرافین یک سیستم با برهم کنش ضعیف است و این روش مناسبی برای مطالعه آن می‌باشد.

از طرفی پلاسمونها ، چگونگی ارتباط و محدود بودن میدان الکترومغناطیسی به ابعادی از مرتبه طول موج را بررسی می‌کنند که اساس

آن برهم کنش بین تابش الکترومغناطیس و الکترونهای رسانش موجود در فصل مشترک دو جسم می‌باشد، به دو دسته پلاسمون پلاریتون سطحی و پلاسمون جایگزیده تقسیم بندی می شوند.پلاسمون سطحی برای فلزاتی مثل طلا ونقره در ناحیه مرئی طیف الکترومغناطیسی و برای گرافین ،در ناحیه تراهرتز هستند .

فرکانس های نوسانات طولی از صفرهای تابع دی الکتریک تعیین می-شوند.زیرا طبق رابطه $D = \varepsilon E$ در صورتی که با وجود میدان ،D صفر شود به این معنی است که ε(تابع دی الکتریک)باید صفر باشد وحاصل این $\varepsilon = 0$ ، بسامدهای پلاسمونها است.یعنی با این کار ما بسامدی که الکترونها به طور دسته جمعی حرکت می کنند را پیدا می‌کنیم. در مواد محلی معمولی پلاسمونها فرکانس های ثابتی دارند ولی در گرافین که یک ماده غیر محلی است فرکانس پلاسمونها با بردار موج تغییر میکند.در نتیجه ما با حل $\varepsilon(q, \omega) = 0$ بردار موجی وبسامد پلاسمون را می‌یابیم.

بررسی انتقال گرمایی پلاسمونی در فواصل کم ،نشان می‌دهد که فقط امواج ناپایدار در آن موثرند و این زمانی رخ می‌دهد که حتما جسم دومی در فاصله کم از جسم اول وجود داشته باشد که این امواج را در یافت کند و بتواند در گسیل گرما بین دو جسم سهیم باشد .در غیر این صورت امواج ناپایدار به جسم اول برگشته و در انتقال گرما شرکت نمی‌کنند.

ما در این مجموعه در فصل اول به آشنایی با گرافین و محاسبه طیف پاشندگی آن در گوشه های منطقه بریلوئن می‌پردازیم .در فصل دوم به معرفی تابع پلاریزیشن و ارتباط آن با تابع دی الکتریک ، در فصل سوم به آشنایی با پلاسمون ها و بررسی رسانندگی گرمایی پلاسمونی در گرافین می‌پردازیم . در این پروژه رسانندگی گرمایی پلاسمونی دو جسم دی اکسید

سیلیسیوم که در فاصله در حد انگستروم از هم قرار دارند ودر یک سو با لایه ای از گرافین پوشیده شده است مورد بررسی قرار گرفته است.

در این تحقیق به بررسی اثرتغیر چگالی ذرات و تغیر زیر لایه بر روی نمودارپلاسمون پرداختیم.

فصل اول:

آشنایی کلی با گرافین

۱-۱ گرافین[1]

گرافین ساختار شش وجهی دو بعدی از کربن است که نه تنها نازکترین بلکه محکمترین ساختاری است که به عنوان رسانای گرما عملکرد خوبی دارد.تا حدود ۹۸٪ شفافیت دارد ولی آن چنان چگال است که حتی هلیم نمی تواند از آن عبور کند.

ویژگی گرافین:گرافین ترکیب تقریبا کامل است و نظم عاری از خطا دارد که همزمان با این خاصیت تا ۲۰٪اندازه اولیه قابلیت کشیدگی دارد.

رفتار الکترونهای آن مثل فوتونهای بی جرم است.گرافین شفاف و هادی الکتریسیته است پس برای ساخت وسایل صفحات نمایش لمسی کاربرد دارد.با افزودن ۱٪ آن به پلاستیک آن را هادی الکتریسیته می کند.مقاومت گرمایی تا ۳۰درجه افزایش می‌یابد وباعث بالا رفتن مقاومت مکانیکی می‌شود که برای ساخت هواپیما وماهواره کاربرد دارد.

این ماده رسانندگی گرمایی و تحرک پذیری الکترونی بالایی دارد.رسانندگی گرمایی یک ماده با واحد وات بر متر درجه کلوین اندازه گیری می شود.رسانندگی گرمایی می‌گوید که ماده داده شده چقدر می‌تواند گرما را هدایت کند.به عنوان مثال رسانا یی گرمایی سیلیکون-که مهمترین ماده الکترونیکی

[1].graphene

است.-در دمای اتاق $145\ \frac{W}{mk}$ است. نانو لوله های کربنی دارای رسانایی گرمایی در محدوده $300-350\ \frac{W}{mk}$هستند.گرافین تک لایه ای که بوسیله این محققان مورد مطالعه قرار گرفته است،دارای یک رسانایی گرمایی به بزرگی $5300\ \frac{W}{mk}$ در دمای اتاق است.گرافین به ویژه به عنوان یک ماده مدیریت با گرما یی بسیار، پر آتیه است.زیرا رسانایی گرمایی بالای آن به وسیله هندسه تخت و مجتمع سازی خوب آن با سیلیکون تکمیل می‌شود.

روش های معمول در اندازه گیری رسانا یی گر مایی-که مبتنی بر تماس هستند.-برای گرافین مناسب نیستند زیرا گرافین دارای ضخامت یک اتمی است.به جای این کار آنها از یک رهیافت غیر تماسی استفاده کردند:آنها یک ورقه گرافینی را روی یک زیر لایه ای که شیاری روی آن تعبیه شده بود قرار دادند به گونه ای که قسمتی از ورقه کربنی روی شیار معلق بود سپس نور لیزر را به قسمت معلق این ورقه تابانیدند و با استفاده از روش طیف بینی رامان پاسخ ارتعاشی گرافین را اندازه گیری کردند.این گروه با تحلیل دقیق طیف رامان گرافین و پاسخ منحصر به فرد شبه نور لیزری و نیز وابستگی طیف مذکور به توان لیزر داده های رسانا یی گر ما یی را استخراج کند.

از راه های بدست آوردن گرافین از گرافیت:۱-وارد کردن مواد شیمیایی بین لایه های اتمی به منظور تضعیف پیوندها و سپس جدا کردن لایه.

۲-روش خراشیدن لایه ها

۳-روش تبخیر سیلسیم از بلور سیلسیم در دمای بسیار زیاد.(روئیت شده در سایت توسعه فناوری نانو ۲۰۱۱/۹/۲۵)

گرافین یک شبکه شش وجهی دو بعدی از اتمهای کربن است.شبیه گرافیت و نانو تیوپها ساختار اصلی آ ن کربن است.(گرافیت توده لایه هی گرافین محدود شده به وسیله نیروی والانس نانو تیوپها به وسیله غلتش یک لایه گرافن شکل گرفته است.)گرافین اولین بار بوسیله یک گروه در دانشگاه منچستر در سال ۲۰۰٤ کشف شد.

یکی از جالبترین نتایج اینکه طیف پاشندگی انرژی به صورت خطی است در گوشه های منطقه بریلوئن که نشان می دهد که الکترون در مجاورت این نقاط دارای خاصیت نسبیتی هستند که از معادله دیراک بی جرم تبعیت می کند.باند استراکچر گرافین که مخصوص پاشندگی خطی در گوشه های منطقه بریلوئن بوداولین بار بوسیله والاس مورد توجه قرار گرفت.

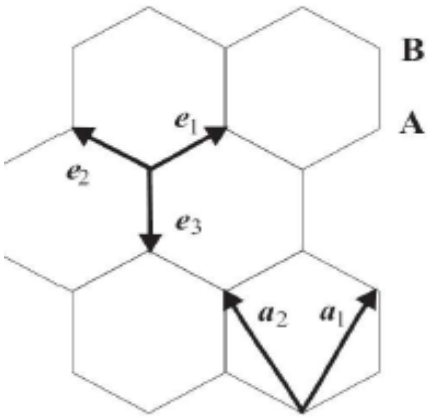
عدم وجود گاف انرژی بین نوار ظرفیت و رسانش سبب ایجاد ویژگیهای الکترونیکی و نوری ومکانیکی منحصر به فردی در این ماده می شود, که امکان کنترل هدایت الکتریکی به وسیله اعمال ولتاژ کیت خارجی وجود دارد.ولی به علت عدم وجود گاف انرژی امکان قطع هدایت وجود ندارد.راه حل این مشکل

ایجاد گاف انرژی در نوارهای انرژی گرافین است که یکی از آنها , ایجاد نقص خنثی در بلور گرافین است .نقص خنثی ; فضاهای خالی هستند که در اثر حذف برخی از اتمهای کربن از شبکه گرافین به وجود می آیند.که با الگو سازی مناسب این نقص ها در ساختار گرافین تک لایه می توان گاف انرژی ایجاد شده در نقاط دیراک را کنترل کرد.که نتایج این کارها در ساخت دیود و ترانزیستورهایی از گرافین به کار می رود.

۱-۲ساختار گرافین

شش وجهی گرافین شامل دو زیر شبکه سه گوش A و B در هم نفوذ کرده است. این ساختار فضایی به وسیله یک شبکه شش وجهی توصیف می شود.ناحیه اول بریلوئن یک شش وجهی علامت زده شده به وسیله سایه در گوشه ها در تقارن نقاط k و k' .نقاط k و k' شیارهایی اند که سطح فرمی در آنها جایگزیده اند.وخاصیت آنها اینکه انرژی الکترونها را منتقل می‌کنند.درجه آزادی شیارها را به عنوان شبه اسپین می‌شناسیم.

اسپین الکترونی این ترکیب حاصل ناهمگنی الکترونی با فاکتور۲*۲ است(یک ۲ ناشی از اسپین بالا و پایین الکترون و ۲ دیگر ناشی از نقاط k و k' .



$$a_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2}(1,\sqrt{3}),$$

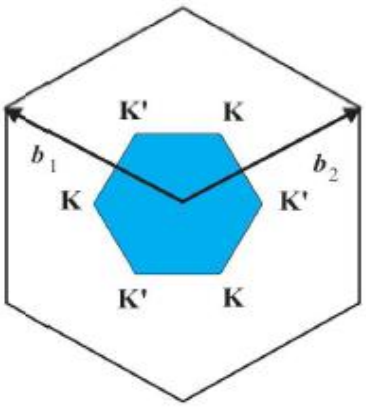
$$a_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2}(-1,\sqrt{3}),$$

$$e_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3},1),$$

$$e_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3},1),$$

$$e_3 = a(0,-1).$$

شکل۱-۱ ساختار شش وجهی گرافین.یک سلول واحد شکل گرفته به وسیله ارتباط مراکز ٤ همسایه شبکه ٦ جهی وشامل دو اتم برچسب دار بر حسب A و B. a_1وa_2 بردارهای پایه شبکه.e_i بردارهای پایه در سه جهت ممکن ٦ وجهی.[10]



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

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

شکل۱-۲فضای معکوس ساختارگرافین است. که تقریبا شبکه کندویی دارد.منطقه بریلوئن بوسیله ٦ وجهی سایه دار علامت گذاری شده است با گوشه هایی در نقاط k و k' و b_1و b_2 بردارهای شبکه وارون.[10]

۱-۳رابطه پاشندگی انرژی

در این مسیر ما رسیدیم به اثر هامیلتونی در همسایگی نقاط k برای مدل ساختار مقید تنگ بست.بردارهای شبکه را تعریف

$$a_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}a(1, \sqrt{3}) \qquad (1-1)$$

$$a_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}a(-1, \sqrt{3})$$

می‌کنیم.که $a = 1/42\ A^0$ فاصله میان اتمهای کربن نزدیک هم وبردارهای شبکه معکوس عبارتند از :

$$b_1 = \frac{2\pi}{3a}(\sqrt{3},1),$$
$$b_2 = \frac{2\pi}{3a}(-\sqrt{3},1),$$
(۲-۱)

$$b_1 = 2\pi\frac{a_2\times a_3}{a_1.(a_2\times a_3)} = 2\pi\frac{\begin{vmatrix} i & j & k \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} & \frac{3a}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1/42 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \frac{a\sqrt{3}}{2} & \frac{3a}{2} & 0 \\ -\frac{a\sqrt{3}}{2} & \frac{3a}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1/42 \end{vmatrix}} = 2\pi\left[\frac{1}{\sqrt{3}},\frac{1}{3}\right] = \frac{2\pi}{3a}\left[\frac{3}{\sqrt{3}},1\right] = \frac{2\pi}{3a}[\sqrt{3},1]$$ (۳-۱)

و به همین ترتیب برای b_2 به دست رابطه را به دست می آوریم.

ساختار هامیلتونی تنگ بست در دومین را شکل تدریجی برای الکترونها اربیتال P در محاسبات نزدیکترین همسایه الکترون عبوری در نزدیکی نقطه k جذب می کند.(کربن با عدد اتمی ٦ با یک اربیتال S و۲ اربیتال P دارد که اربیتال P دیگر به صورت عمود بر صفحه اینهاست.)

$$a_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i}a_{k\sigma},$$
$$b_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i}b_{k\sigma},$$

$$H_{\mathrm{TB}} = \sum_{k\sigma}\left[\alpha(k)a^\dagger_{k\sigma}b_{k\sigma} + \alpha^*(k)b^\dagger_{k\sigma}a_{k\sigma}\right]$$
$$= \sum_{k\sigma}\begin{bmatrix} a^\dagger_{k\sigma} & b^\dagger_{k\sigma} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & \alpha(k) \\ \alpha^*(k) & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_{k\sigma} \\ b_{k\sigma} \end{bmatrix}.$$

$$\alpha(k) = -t(1 + e^{-ik\cdot a_1} + e^{-ik\cdot a_2}).$$

(۱-٤)

$b_{i\delta}$و$a_{j\delta}$اپراتورهای نابودی برای زیر شبکه A وB. iو j بر چسبهای مکان شبکه اند.متناظر با R_i, R_j بردارهای مربوط به iو j در نزدیکترین همسایگی.δ بر چسب اسپین است$t = 2/7\text{ev}$ انرژی الکترون عبوری در همسایگی نزدیک.

انرژی پاشندگی بوسیله هامیلتونی قطری در معادله (۱-٤) داریم:

$$\varepsilon_{\pm} = \pm|\alpha(\mathrm{k})|$$

$$\begin{bmatrix} 0-\varepsilon & \alpha(\mathrm{k}) \\ \alpha(\mathrm{k})^* & 0-\varepsilon \end{bmatrix} = 0 \rightarrow \varepsilon^2 - \alpha(\mathrm{k})\alpha(\mathrm{k})^* = 0$$

بااستفاده از مقدار $\alpha(\mathrm{k})$ وروابط مثلثاتی به رابطه

$$\varepsilon = \pm \mathrm{t}\sqrt{3 + 2\cos(\sqrt{3}\,\mathrm{a}k_{\mathrm{x}}) + 4\cos(\tfrac{\sqrt{3}}{2}\mathrm{a}k_{\mathrm{x}})\cos(\tfrac{3}{2}ak_{\mathrm{y}})} \qquad (۱-۵)$$

بردار موج k در نقاط k و k' :

$$k = (b_1 - b_2)/3$$

$$\mathrm{K} = \frac{2\pi}{3a}(\sqrt{3}\,,1) - \frac{2\pi}{3a}(-\sqrt{3}\,,1)/3 = \frac{4\pi}{3a\sqrt{3}}(1\,,0)$$