





دانشگاه لرستان

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

عنوان

**تأثیرات جفت شدگی اسپین مدار روی نانو نوار های گرافینی**

نگارش

ساناز هادی پور

استاد راهنما

دکتر زینب رشیدیان

پایان نامه جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته فیزیک حالت جامد

بهمن ماه ۱۳۹۳

همه امتیازات این پایان نامه به دانشگاه لرستان تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب در مجلات، کنفرانس ها یا سخنرانی ها، باید نام دانشگاه لرستان ( یا استاد یا اساتید راهنمای پایان نامه ) و نام دانشجو با ذکر مأخذ و ضمن کسب مجوز کتبی از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه ثبت شود. در غیر این صورت مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت.

به نام آن که مرحمت کرد «علم الأسماء»

و «لا یحیطون بشی من علمه الا بما شاء»

شکر

اللَّهُمَّ إِنِّي أَعُوذُ بِكَ مِنْ قَلْبٍ لَا يَخْشَعُ وَ مِنْ عِلْمٍ لَا يَنْفَعُ. اللَّهُمَّ مَا بِنَا مِنْ نِعْمَةٍ فَمِنْكَ، أَلْحَمْدُ لِلَّهِ رَبِّ

العالمين

پروردگارا، پناه می‌برم به تو از قلبی که فروتن نمی‌گردد و از علمی که سودی ندارد. پروردگارا، هر نعمتی که داریم از آن توست. حمد و سپاس مخصوص خداوند جهانیان است.

از پدر و مادر گرانقدرم سپاسگذارم... آنان که در کوره راه‌های سخت عبورم از زندگی چون سایه‌ای آرام و صبور همواره در جانم زمزمه استقامت نجوا می‌کنند...

کمال تشکر و سپاسگذاری را از استاد راهنمای دلسوز و صبورم سرکار خانم دکتر رشیدیان می‌نمایم که به حق، همراهی مهربانانه، صبر دانسته و دانش نیکوی ایشان پشتوانه‌ی هر گام من در این راه بود. از اساتید بزرگوادم، جناب آقای دکتر سپه‌وند و جناب آقای دکتر باهر که زحمت داوری این پایان‌نامه را متقبل شدند نیز بسیار تشکر می‌نمایم.

از تمامی دوستان، هم‌کلاسی‌های مهربانم که همواره مهر و محبتشان را نثار من کرده‌اند، تشکر می‌کنم. و در نهایت سپاسگذارم از خواهر خوبم و برادر عزیزم که وجودشان مایه دل‌گرمی من بوده است. باشد که خداوند بر عزت و سرافرازشان بیفزاید.

## چکیده

نام خانوادگی: هادی پور      نام: ساناز
عنوان پایان نامه: تاثیرات جفت شدگی اسپین مدار روی نانو نوارهای گرافینی
استاد راهنما: دکتر زینب رشیدیان استاد مشاور: -
درجه تحصیلی: کارشناسی ارشد      رشته: فیزیک      گرایش: جامد محل تحصیل: دانشگاه لرستان      دانشکده: علوم پایه تاریخ فارغ التحصیلی: ۲۵ بهمن ماه ۱۳۹۳      تعداد صفحه: ۹۰
کلید واژه ها: گرافین، رسانش، جفت شدگی اسپین مدار
<p>چکیده: در این رساله با استفاده از فرمول بندی پراکندگی لاندائو-بتیکر به بررسی رسانش در گرافین تک لایه می پردازیم. گرافین تک لایه یک نیم رسانای بدون گاف است که اخیراً توجه زیادی را به خود جلب کرده است. ما نشان خواهیم داد با حضور جفت شدگی اسپین مدار می توان در این ماده دو بعدی گاف ایجاد نمود. نتایج نشان می دهند جفت شدگی اسپین مدار راشبا علاوه بر ایجاد گاف در نوار، می تواند روی ترابرد اسپین حامل های بار تاثیر داشته باشد و باعث قطبیدگی اسپین و اسپین فیلترینگ شود. همچنین نتایج بدست آمده را با رسانش در گرافین دولایه مقایسه می کنیم. نتیجه بدست آمده حاکی از این است که رسانش تک لایه در حضور پتانسیل راشبا همان رسانش در گرافین دو لایه با حضور اختلاف پتانسیل بین دو لایه خواهد بود.</p>



# فهرست مطالب

۶	۱	گرافین تک لایه
۷	۱.۱	ظهور گرافین
۹	۲.۱	ساختار نواری
۱۷	۳.۱	روش بستگی قوی در معادله دیراک
۲۰	۴.۱	خاصیت کایرالیته
۲۲	۲	بررسی خواص تراپردی گرافین تک لایه
۲۳	۱.۲	جفت شدگی اسپین مدار
۲۵	۲.۲	حضور جفت شدگی اسپین مدار راشبا
۴۰	۳.۲	حضور پتانسیل کنه-مله
۵۲	۳	خواص تراپردی گرافین دو لایه
۵۳	۱.۳	گرافین دو لایه





۲.۳ دولایه در حضور میدان تبادل و اختلاف پتانسیل ..... ۵۶

۴ نتیجه گیری ۷۰

# فهرست تصاویر

- ۱۰ ..... آلتروپ های کربن  ۱۰
- ۱.۱ ساختار الکترونیکی کربن به ترتیب از بالا به پایین در حالت پایه، حالت  ۱۰.۱
- ۸ ..... برانگیخته و پس از هیبرید شدن را نشان می دهد. .... ۸
- ۸ ..... هیبرید  $sp^2$  از اتم های کربن  ۲.۱
- ۳.۱ شبکه لانه زنبوری در فضای مستقیم به صورت دو زیر شبکه مثلثی  $A$  و  $B$   ۳.۱
- در نظر گرفته می شود. بردار های  $a_1$  و  $a_2$  سلول واحد و  $\delta_i$  بردار همسایه را تعریف
- ۱۰ ..... می کنند. .... ۱۰
- ۱۰ ..... سلول واحد شبکه غیر برآوه گرافین و بردارهای شبکه  ۴.۱
- ۱۱ ..... بردار همسایه نزدیک در فضای حقیقی  ۵.۱
- ۶.۱ منطقه اول بریلوئن در فضای معکوس یک شش ضلعی است. نقاط  $k_i$  و  $k'_i$  گوشه های منطقه بریلوئن هستند. همچنین در دستگاه شش گوشه، یاخته بسیط
- ۱۲ ..... منشور قائمی است که قاعده اش یک لوزی با زاویه  $120^\circ$  درجه است. .... ۱۲

۱۵	خطی بودن طیف انرژی گرافین		۷.۱
	ساختار نواری گرافین که در سه بعد رسم شده است. همان طوری که از شکل دیده می شود نوار های رسانش و ظرفیت در شش نقطه همدیگر را قطع کرده اند. به این شش نقطه، نقاط دیراک اطلاق می شود چرا که رابطه انرژی در نزدیکی این نقاط خطی است.		۸.۱
۲۰	کایرالیته برای فرمیون های دیراک در نوار رسانش.		۹.۱
۲۱	کایرالیته برای فرمیون های دیراک در نوار ظرفیت.		۱۰.۱
۲۷	اتصالات گرافین تک لایه که در صفحه $xy$ قرار گرفته است		۱.۲
	رسانش گرافین تک لایه بر حسب قدرت جفت شدگی اسپین مدار که به		۲.۲
۳۸	انرژی فرمی بهنجار شده است.		
	ضریب عبور برای قطبش اسپینی در گرافین تک لایه بر حسب قدرت جفت		۳.۲
۳۹	شدگی اسپین مدار راشبا.		
۴۹	رسانش گرافین تک لایه در حضور جفت شدگی اسپین مدار راشبا و کنه مله.		۴.۲
۵۰	قطبش اسپینی در حضور قدرت راشبای ثابت و زاویه فرود.		۵.۲
۵۰	قطبش اسپینی بر حسب پتانسیل کنه مله و قدرت راشبا و زاویه صفر.		۶.۲
۵۱	ضریب عبور برای اسپین بالا بر حسب طول موج فرمی.		۷.۲
۵۱	ضریب عبور برای اسپین پایین بر حسب طول موج فرمی.		۸.۲

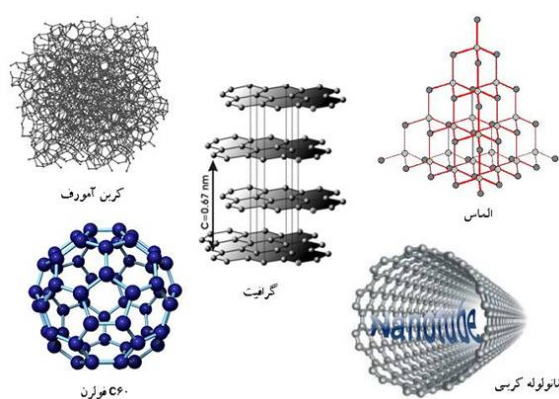
- ۱.۳ ساختار شبکه گرافین دو لایه . . . . . ۵۴
- ۲.۳ موقعیت نسبی اتم ها به همراه منطقه اول بریلوئن  . . . . . ۵۴
- ۳.۳ دو سیستم مختلف مورد بررسی که یکی شامل اتصالات گرافین تک لایه با حضور جفت شدگی راشبا در ناحیه میانی و دیگری شامل اتصالات گرافین دولایه در ناحیه میانی می باشند که در یک شکل آورده شده اند. . . . . ۵۶
- ۴.۳ رسانش در گرافین دو لایه بر حسب اختلاف پتانسیل بین دو لایه به ازای  . . . . . ۶۸
- میدان تبدلی  $h = 10.5t$  . . . . . ۶۸

## مقدمه

کربن ماده اولیه برای زندگی و اساس شیمی آلی می باشد. به دلیل انعطاف پذیری<sup>۱</sup> اتم های کربن در تشکیل آلوتروپ های مختلف و پیوند با اتم های کربن دیگر در شبکه، تعداد نامحدودی از سیستم های با پایه کربنی با ساختار های مختلف تشکیل و دارای خاصیت های فیزیکی<sup>۲</sup> متنوعی هستند. در بین سیستم هایی که تنها شامل اتم کربن هستند گرافین<sup>۳</sup> دو بعدی نقش مهمی در آلوتروپ های کربن دارد زیرا مبنای بررسی دیگر آلوتروپ های کربن محسوب می شود.

دیگر آلوتروپ های کربن عبارتند از شکل (۱.۰):

۱- فولرین<sup>۴</sup> (صفر بعدی) ۲- نانولوله های کربن<sup>۵</sup> (یک بعدی) ۳- الماس و گرافیت<sup>۶</sup> (سه بعدی)



شکل ۱.۰: آلوتروپ های کربن

<sup>۱</sup>Flexibility  
<sup>۲</sup>Physical properties  
<sup>۳</sup>Graphene  
<sup>۴</sup>Fullerenes

<sup>۵</sup>Carbon nanotubes  
<sup>۶</sup>Graphite

گرافین ساختار مادر برای دیگر آلوتروپ های کربن به جز الماس (ساختار ونوع پیوند شیمیایی متفاوتی دارد) است. فولرین از مجاله شدن ورقه محدود گرافین، نانو لوله های کربن از لوله شدن یک ورقه گرافین و اتصال لبه ها (برخلاف فولرین، نانو لوله های کربنی ساختار شش ضلعی گرافین را حفظ می کنند)، الماس و گرافیت از روی هم قرار گرفتن صفحات گرافین ایجاد می شوند.

این ماده دو بعدی به عنوان یک ستاره به سرعت در حال افزایش، در افق علم مواد و فیزیک ماده چگال، با وجود تاریخ کوتاهش، خواص الکترونیکی استثنایی در فیزیک جدید و برنامه های کاربردی بالقوه از خود نشان می دهد. در فیزیک انرژی بالا برخی از پدیده های نسبیتی کوانتومی غیر قابل مشاهده اند اما گرافین با وجود طیف الکترونی غیر معمول خود نمونه جدیدی از نسبیت فیزیک ماده چگال را به نمایش می گذارد. به طور کلی، گرافین علاوه بر ایجاد مفهومی جدید از مواد، تاخت و تاز های جدیدی از فیزیک بعد های پایین برای ما آشکار می کند. ماهیت غیر عادی اثر کوانتومی هال و طیف انرژی شبه نسبیتی فرمیونهای دیراک در گرافین نیز قابل توجه است. گرافین که یک تک لایه از اتم های کربن محسوب می شود دارای شبکه ای شش گوش و دو زیر ساختار مختلف است، که در فصل اول این پایان نامه به بررسی ساختار آن خواهیم پرداخت. این ماده با توجه به ساختار کریستالی اش ویژگی های منحصر به فردی را دارد. ضمن اینکه کاملاً شفاف و تنها ۳/۲ درصد از نور را در محدوده اپتیکی به خود جذب می کند، بنابراین گرافین معلق، هیچ رنگی ندارد.

در میان خواص فیزیکی گرافین تک لایه، ویژگی اسپین وابسته توجه فوق العاده ای را به خود جلب نموده است. چرا که گرافین دارای حامل های بار کم انرژی مثل فرمیون های دیراک بدون جرم اند که

با خاصیت کایرال رفتار می کنند. حاملان بار در گرافین خاصیت کایرالیته دارند به این معنی که اسپین حاملان بار همیشه یا در راستای تکانه یا در خلاف جهت تکانه هستند البته می دانیم اسپین یک موجود فضایی است و توان تشخیص جهت آن را نداریم اما گرافین این خاصیت را دارد که حاملان بارش به اصطلاح کایرال<sup>۷</sup> هستند یعنی جهت اسپین شان با جهت حرکتشان جفت شده است.

طیف الکترونی گرافین در انرژی پایین و حول نقاط دیراک جایی که نوار رسانش و نوار ظرفیت به هم می رسند خطی است. خطی بودن طیف مشخصه موادی است که الکترونهای آنها با سرعت نزدیک به نور حرکت می کنند نیمه رسانا های معمول شناخته شده تاکنون دارای رابطه پاشندگی سهمی هستند. از دیگر ویژگی حاملان بار در گرافین این است که به پتانسیل الکترواستاتیکی حساسیت نشان نمی دهند؛ به عبارتی دیگر حاملان بار با احتمال یک از ناحیه ممنوعه کلاسیکی عبور می کند. در گرافین این پتانسیل الکترواستاتیکی از ناخالصی ها ایجاد می شود.

با تفاسیر گفته شده گرافین تک لایه، نامزد مناسبی برای نانوالکترونیک مدرن بشمار می آید. برای به کار گیری گرافین در صنعت الکترونیک نیاز به ایجاد گاف<sup>۸</sup> انرژی در نوارهای انرژی آن داریم. چرا که گرافین در حالت ذاتی بدون گاف می باشد. برای ایجاد گاف در گرافین ساده ترین روش کاهش اندازه گرافین به مقیاس نانوست. یکی دیگر از روش های ایجاد گاف انرژی در گرافین جفت شدگی اسپین-مدار<sup>۹</sup> است. گاف انرژی معیاری از ولتاژ آستانه و نرخ خاموش-روشن شدن در ترانزیستورها است. در غیاب گاف انرژی، ماده رساناست به این صورت که نوار رسانش نوار ظرفیت را قطع کرده و حاملان بار به راحتی از نوار رسانش به نوار ظرفیت رفته و جریان برقرار خواهد بود، اما با حضور گاف انرژی بین نوار

<sup>۷</sup>Chiral

<sup>۸</sup>Gap

<sup>۹</sup>Spin Orbit Coupling

رسانش و نوار ظرفیت فاصله می افتد و دیگر ماده رسانا نیست و جریان نخواهیم داشت. این مسئله در ترانزیستورها باعث کنترل جریان می شود. بنابراین برای کاربردی کردن گرافین، ملزم به گاف دار آن خواهیم بود.

جفت شدگی اسپین مدار از پاسخ درجه آزادی اسپین به محیط مداری ناشی می شود. دارای دو نوع ذاتی و خارجی می باشد. جفت شدگی اسپین مدار کنه مله میدانی داخلی ست و می تواند مانند یک سد عمل کند که با افزایش قدرت سد، ترابرد حاملان بار کم می شود و رسانش سیستم کاهش می یابد. ضمن این که بر خلاف جفت شدگی اسپین مدار راشبای ناشی از میدان الکتریکی عرضی، تاثیری بر رسانش اسپینی ندارد. به هر حال جفت شدگی اسپین مدار اثر بسیار عمیقی روی نوار انرژی می گذارد. در نیمه رساناهایی چون گالیم آرسنیک تاثیر جفت شدگی روی نوارهای انرژی [۱۰] و در نیمه رساناهای مغناطیسی رسانش سیستم در حضور جفت شدگی اسپین مدار [۱۴] بررسی شده است.

در این پایان نامه می خواهیم با استفاده از فرمول بندی لاندائو-بتیکر<sup>۱۰</sup> به بررسی رسانش در اتصالات گرافین تک لایه<sup>۱۱</sup> با حضور جفت شدگی اسپین مدار که تنها در ناحیه میانی اعمال شده است پردازیم. در ابتدا، با استفاده از هامیلتونین دیراک گونه برای گرافین تک لایه ضریب عبور<sup>۱۲</sup> را محاسبه نموده و سپس توسط فرمول بندی لاندائو-بتیکر [۱، ۲] رسانش سیستم را بدست می آوریم. نتایج نشان می دهند در حضور جفت شدگی اسپین مدار راشبا می توانیم در گرافین تک لایه گاف قابل کنترل ایجاد کنیم و این امر به نوبه خود موفقیتی بس بزرگ در علم اسپینترونیک است. علاوه بر آن رسانش گرافین تک لایه در حضور پتانسیل کنه-مله<sup>۱۳</sup> و گرافین دولایه<sup>۱۴</sup> در حضور میدان تبادلی محاسبه شده است. و در

<sup>۱۰</sup>Landauer-Buttiker

<sup>۱۱</sup>Monolayer Graphene Junction

<sup>۱۲</sup>Transmission Probability

<sup>۱۳</sup>Kane-Mele

<sup>۱۴</sup>Bilayer Graphene



پایان به مقایسه رسانش گرافین تک لایه با حضور راشبا<sup>۱۵</sup> و گرافین دولایه با اعمال پتانسیل بین لایه ای می پردازیم و مشاهده می شود گرافین دولایه با اختلاف پتانسیل بین دولایه اش ویژگی های تراپردی مشابه ای با گرافین تک لایه در حضور جفت شدگی اسپین مدار راشبا دارد.

# فصل ۱

## گرافین تک لایه

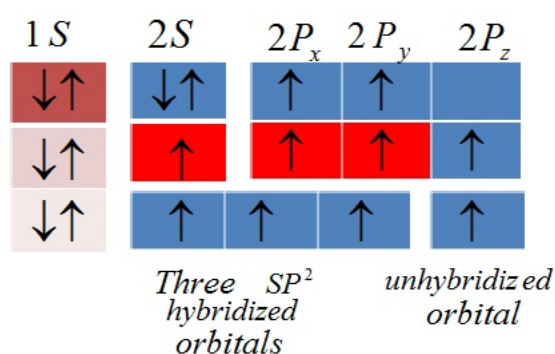
## ۱.۱ ظهور گرافین

نزدیک به هفتاد سال پیش دو فیزیکدان معروف به نام های لاندائو<sup>۱</sup> و پایرلز<sup>۲</sup> استدلال کردند که شبکه دو بعدی به لحاظ ترمودینامیکی ناپایدار است و نمی تواند در حالت آزاد وجود داشته باشد [۳]. این بحث بعداً توسط مرمن توسعه داده شد. مرمن اثبات کرد نظم بلند برد در سیستم های دوبعدی وجود ندارد و این امر با مشاهدات تجربی دیگران تایید گردید. بدین صورت تایید عدم وجود سیستم های دو بعدی از لحاظ نظری و عدم امکان مشاهده تجربی آن در سالیان سال، تاییدی بر عدم وجود سیستم های دو بعدی بود تا اینکه در سال ۲۰۰۴ میلادی دو فیزیکدان روسی در دانشگاه منچستر موفق به سنتز ماده ای دو بعدی شدند [۴]. این لایه دو بعدی پیوسته، دارای بلوری با کیفیت بالا، تحرک پذیری بالای حاملان بار و شدیداً پایدار است. این ماده دو بعدی که گرافین نام گرفت توسط آندره گایم و کوستیا نوسلو به کمک شیوه ای کاملاً متفاوت و طبیعی از گرافیت استخراج شد. کشف گرافین به خاطر خواص الکترونی بسیار عجیب و نسبیتی حاملان بارش در سالهای اخیر توجه زیادی را به خود جلب نموده است. علاوه بر این پلی بین فیزیک ماده چگال و الکترو دینامیک کوانتومی بر قرار می کند و چشم انداز جدیدی از الکترونیک بر پایه کربن به روی ما می گشاید. گرافین که تا حد ده لایه دو بعدی محسوب می شود و تنها ده سال از عمر آن می گذرد بسته به تک لایه یا چند لایه بودن آن خواص منحصر به فرد خود را داراست. شکل (۱.۱) مراحل هیبریداسیون کربن را نشان می دهد. همانطور که می دانیم اتم کربن دارای چهار الکترون ظرفیت، سه الکترون در سه اربیتال  $p$  و یک الکترون در اربیتال  $s$ ، دو اربیتال  $p$  با اربیتال  $s$  ترکیب شده و تشکیل  $sp^2$  می دهند و در صفحه با اتم های همسایه پیوند قوی سیگما تشکیل داده

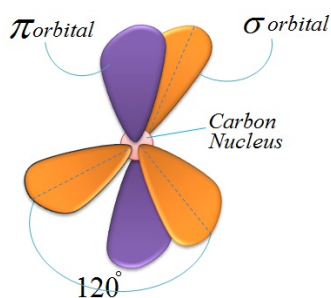
<sup>۱</sup>Landau

<sup>۲</sup>Peierls

اند. شکل لانه زنبوری گرافین ناشی از سه اربیتال هیبرید شده واقع در صفحه  $xy$  در شکل (۲.۱) با زاویه ۱۲۰ نشان داده شده است. این اربیتال ها در ترابرد(انتقال) الکترونی شرکت نمی کنند. اربیتال  $p$  باقی مانده که در هیبریداسیون شرکت نکرده و عمود بر صفحه است ، باعث رسانش<sup>۳</sup> سیستم گرافینی می شود.



شکل ۱.۱: ساختار الکترونیکی کربن به ترتیب از بالا به پایین در حالت پایه، حالت برانگیخته و پس از هیبرید شدن را نشان می دهد.



شکل ۲.۱: هیبرید $sp^2$  از اتم های کربن