

دانشگاه کردستان

بررسی خواص گرافن تحت تأثیر میدان‌های  
مغناطیسی خارجی

پایان‌نامه کارشناسی ارشد  
فریبا شهبازی

استاد راهنما: دکتر محمد رضا ستاره

آبان ۸۹

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

تقدیم به پدر و مادر عزیزم

و خواهران مهربانم الهه و فائزه و زهرا

# تشکر و قدر دانی

سپاس و ستایش خداوند یکتا را که عنایت فرمود تا بار دیگر مقطعی از تحصیلاتم را با موفقیت به پایان برسانم.

در آغاز بر خود واجب می دانم از تلاش های مستمر و دلسوزانه استاد ارجمندم جناب آقای دکتر محمد رضا ستاره، الگوی برجسته علم و اخلاق که با راهنمایی هایشان در انجام این پایان نامه مرا یاری نمودند، سپاسگزاری نمایم.

از استاد گرامی جناب آقای دکتر شاهپور مرادی که به عنوان داور خارجی قبول زحمت نمودند، کمال تشکر و قدر دانی را دارم.

از استاد گرانقدر جناب آقای دکتر خالد سعیدی که زحمت داور داخلی این رساله را متقبل شدند، نهایت سپاس را دارم.

از کلیه دوستان عزیزم که مرا در انجام این پایان نامه کمک کردند تشکر و قدر دانی می کنم.

## چکیده

در این پایان نامه، بعد از معرفی انواع پیوندهای کربنی، هیبریداسیون  $sp^2$  را در گرافن مورد توجه قرار داده‌ایم. سپس به بررسی ساختار الکترونی گرافن پرداخته، تقریب بستگی قوی را در آن بررسی نموده‌ایم و با بیان تحلیلی، این تقریب را تا سومین همسایگی مرور کرده، در نزدیکی نقاط دیراک؛ هامیلتونی دیراک را به دست آورده‌ایم. در ادامه با استفاده از معادله‌ی دیراک به مطالعه‌ی دینامیک شبه‌ذرات درون گرافن در حضور میدان مغناطیسی عمودی پرداخته‌ایم. سپس تقریب نیمه‌کلاسیکی را برای گرافن در حضور میدان مغناطیسی عمودی در نظر گرفته، فاز نیمه‌کلاسیکی را در گرافن تک‌لایه و دولایه محاسبه نموده‌ایم. سرانجام انتقال الکترون‌ها را از سد مغناطیسی در نانو نوار گرافن آرمچیر بررسی کرده‌ایم.

کلمات کلیدی: گرافن، نقاط دیراک، هامیلتونی، میدان مغناطیسی.

# فهرست

۱ مقدمه

## ۲ ساختار الکترونی گرافن

۵	.....	۱-۲ معرفی ساختارهای کربنی
۵	.....	۱-۱-۲ هیبرید $sp$
۶	.....	۲-۱-۲ گرافیت و هیبرید $sp^2$
۷	.....	۳-۱-۲ الماس و هیبرید $sp^3$
۸	.....	۲-۲ تولید گرافن
۹	.....	۳-۲ ساختار شبکه‌ای گرافن
۱۲	.....	۴-۲ رابطه‌ی پاشندگی در گرافن
		۱-۴-۲ رابطه پاشندگی در گرافن به هنگام پویش الکترون به همسایه‌های اول ..... ۱۷

- ۲-۴-۲ رابطه پاشندگی در گرافن به هنگام پویش الکترون به  
همسایه‌های دوم ..... ۲۵
- ۲-۴-۳ رابطه پاشندگی در گرافن به هنگام پویش الکترون به  
همسایه‌های سوم ..... ۲۷
- ۳-۲ گرافن دولایه ..... ۳۱

## ۳ دینامیک شبه‌ذرات درون گرافن در حضور میدان

### مغناطیسی

- ۱-۳ دینامیک شبه‌ذرات درون گرافن در حضور میدان مغناطیسی عمودی ..... ۳۷
- ۲-۳ حل جبری گرافن تک‌لایه در میدان‌های الکتریکی عرضی و  
مغناطیسی عمودی ..... ۴۶
- ۱-۲-۳ هامیلتونی ..... ۴۷
- ۲-۲-۳ روش قطری کردن ..... ۵۲
- ۳-۲-۳ حالت میدان الکتریکی صفر ..... ۵۴
- ۴-۲-۳ میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی محدود ..... ۵۷
- ۵-۲-۳ محاسبه جرم سیکلوترونی در گرافن ..... ۶۷
- ۶-۲-۳ مقایسه دینامیک شبه‌ذرات درون گرافن با گاز الکترونی  
دوبعدی ..... ۷۲
- ۳-۳ گرافن دولایه، تحت تأثیر میدان‌های الکتریکی عرضی و مغناطیسی  
عمودی ..... ۷۹
- ۴-۳ مدل کروی هال‌دن برای ذرات پرچرم ..... ۸۰
- ۱-۴-۳ مدل کروی برای گرافن ..... ۸۴

## ۴ تقریب نیمه کلاسیکی برای گرافن تک لایه و دولایه در

### حضور میدان مغناطیسی عمودی

- ۸۸ ..... تابع موج نیمه کلاسیکی ( $\Psi_{sc}$ )
- ۹۲ ..... تقریب نیمه کلاسیکی برای گرافن در حضور میدان مغناطیسی عمودی

## ۵ انتقال الکترون های بدون جرم از سد مغناطیسی در نانو

### نوار گرافن آرمچیر

- ۱۰۷ ..... لبه های گرافن
- ۱-۱-۵ شرایط مرزی برای نانو نوار گرافن با لبه زیگزاگ، در راستای محور  $y$  .....  $110^\circ$
- ۲-۱-۵ شرایط مرزی برای نانو نوار گرافن با لبه آرمچیری، در راستای محور  $x$  .....  $111^\circ$
- ۲-۵ بررسی نانو نوار گرافن با لبه آرمچیر موازی محور  $x$ ، در حضور میدان مغناطیسی .....  $112^\circ$
- ۱۱۴ ..... بررسی ناحیه های ۱ و ۳ در شکل (۵.۲.۴)
- ۱۱۸ ..... بررسی ناحیه ۲ در شکل (۵.۲.۴)
- ۳-۲-۵ بررسی شرایط مرزی در راستای محور  $x$ ، برای شکل (۵.۲.۴) .....  $120^\circ$
- ۱۲۳ ..... پیوست
- ۱۲۵ ..... مراجع



# فصل اول

## مقدمه

نزدیک به هفتاد سال پیش لاندائو<sup>۱</sup> و پیپرلس<sup>۲</sup> اعلام کردند که شبکه‌های دوبعدی از لحاظ ترمودینامیکی غیرپایدار هستند و نمی‌توانند وجود داشته باشند. که بعدها این نظریه توسط مرمین<sup>۳</sup> توسعه داده شد و با مشاهدات تجربی تأیید گردید. به این صورت که دمای ذوب یک فیلم نازک با کاهش ضخامت آن شدیداً کاهش می‌یابد و ناپایدار می‌شود [۱]. تا این که در سال ۲۰۰۴ یک گروه فیزیکدان از دانشگاه منچستر انگلستان، برای اولین بار صفحه‌ی پایدار گرافن<sup>۴</sup> را با ضخامت یک اتم کربن تولید کردند [۲،۳]. چنین لایه دوبعدی، یک بلور با کیفیت بالا است. به طوری که، حامل‌های بار می‌توانند بدون پراکندگی مسافت حدود هزار برابر فاصله بین اتمی را بپیمایند. بنابراین، هدایت الکتریکی این ماده هزار برابر بهتر از بهترین فلزات است. چنین ساختار بلوری دوبعدی شدیداً پایدار است. به این ترتیب، در سال‌های

---

<sup>۱</sup> Landau

<sup>۲</sup> Peierls

<sup>۳</sup> Mermin

<sup>۴</sup> صفحه‌ی گرافن یک شبکه‌ی براوه کامل نیست و همچنین در سطح این صفحه یک افت و خیزهای تصادفی با اندازه‌های گوناگون وجود دارد. این دو مسئله باعث می‌شود که گرافن یک شبکه‌ای دوبعدی با تقارن صد در صد نباشد و همین نکته، صفحه‌ی گرافن را از شبکه‌های دوبعدی دیگر متمایز می‌سازد.

اخیر به علت رفتار شگفت آور و غیر معمول این سیستم دوی بعدی، تحقیقات گسترده‌ای بر روی این ماده جدید صورت گرفته است. اکنون، به بررسی این تحقیقات می‌پردازیم. اما در فیزیک حالت جامد، معادله شرودینگر خواص الکترونی مواد را توضیح می‌دهد. اما حامل‌های بار در گرافن با معادله دیراک توصیف می‌شوند. دلایل بسیار مهمی وجود دارد که ما کار با معادله شرودینگر را کنار می‌گذاریم. اکنون به طور اجمالی به بررسی این دلایل می‌پردازیم:

در گرافن به جای حرف از الکترون‌ها از مفهوم شبه‌ذره (برانگیختگی کم انرژی) استفاده می‌کنیم. به این معنی که مجموع ساختار و پتانسیل دوره‌ای شبکه، به گونه‌ای حرکت (بعضی از) الکترون‌های گرافن<sup>۵</sup> را تحت تأثیر قرار می‌دهد، که گویی آن الکترون جرمی ندارد<sup>۶</sup>. در واقع، با بهره‌گیری از مدل بستگی قوی که اساس آن معادله شرودینگر است، ابتدا، رفتار همه الکترون‌های ظرفیت (در نگاه اول غیرنسبیتی) گرافن را در نظر می‌گیریم و رابطه پاشندگی را به دست می‌آوریم. با توجه این که همه الکترون‌ها نمی‌توانند به نوار رسانش برانگیخته شوند و فقط آن الکترون‌هایی که تکانه‌شان نزدیک تکانه دیراک (نقاط دیراک<sup>۷</sup>) است (به سبب نابود شدن گاف انرژی در این نقاط) می‌توانند به نوار رسانش بروند، تکانه‌ای که نزدیک تکانه دیراک است را در رابطه پاشندگی در نظر می‌گیریم. سپس، با محاسبات ریاضی یعنی با بسط رابطه پاشندگی حول نقاط دیراک ثابت می‌شود که رابطه پاشندگی انرژی برای الکترون‌ها به طور خطی با تکانه تغییر می‌کند، درست مانند فوتون‌ها (رابطه انرژی با تکانه‌شان خطی است). با این تفاوت که در گرافن سرعت فرمی جایگزین سرعت نور شده است. پس می‌توان گفت، الکترونی که تکانه نزدیک (حول) نقاط دیراک دارد، مانند ذره نسبیتی بدون جرم (مثل

---

<sup>۵</sup> graphene

<sup>۶</sup> این موضوع غیرممکن نیست چرا که برای مثال جسمی که روی سطح بدون اصطکاک حرکت می‌کند گویی آزاد است هر چند می‌دانیم که دو نیروی گرانش و نیروی برابر و مخالف یعنی نیروی عمودی سطح به آن وارد می‌شود اما چون برآیند این نیروها صفر است لذا جسم همان حرکتی را خواهد داشت که در فضای آزاد به دور از هر نیرویی دارد.

<sup>۷</sup> Dirac point

فوتون) رفتار می کند. بنابراین، اگر تنها الکترون‌هایی که تکانه آنها حول نقاط دیراک است را عامل انتقال بار الکتریکی بدانیم، نتیجه می‌گیریم که حامل‌های بار در گرافن الکترون‌هایی هستند که جرم آنها صفر می‌باشد، لذا فرانسبیتی رفتار می‌کنند. بنابراین، الکترون‌هایی که تکانه آنها خیلی دور از تکانه دیراک است، شمارشان اندک می‌باشد. لذا در رسانایی سهمی ندارند، چرا که برانگیخته شدن آنها نیاز به انرژی زیادی دارد. بنابراین، تنها برانگیختگی‌های کم انرژی<sup>۸</sup> (شبه‌ذرات) موثر هستند و به این دلیل، کار با معادله شرودینگر توجیهی ندارد و از معادله دیراک استفاده می‌شود. مطالب گفته شده در فصل دوم این پایان‌نامه مورد بررسی قرار می‌گیرد.

در فصل سوم این پایان‌نامه، با استفاده از معادله دیراک، ویژه مقادیر و ویژه بردارها را برای گرافن در حضور میدان مغناطیسی عمودی به دست می‌آوریم و به این نتیجه می‌رسیم که ویژه مقادیر انرژی متناسب با  $\sqrt{n}$  است. سپس، به مقایسه دینامیک شبه‌ذرات درون گرافن با گاز الکترونی دوبعدی، در حضور میدان مغناطیسی عمودی می‌پردازیم و در ادامه، گرافن دولایه را تحت تأثیر میدان‌های مغناطیسی عمودی و الکتریکی عرضی بررسی می‌نماییم و در قسمت آخر این فصل، مدل کروی را برای گرافن مورد بررسی قرار می‌دهیم.

در فصل چهارم، فاز نیمه‌کلاسیکی را در گرافن تک‌لایه و دولایه، در حضور میدان مغناطیسی عمودی محاسبه می‌نماییم.

در فصل پنجم، انتقال الکترون‌های بدون جرم را از سد مغناطیسی در نانو نوار گرافن آرمچیر بررسی می‌کنیم و به این نتیجه می‌رسیم که در مورد گرافن همواره احتمال عبور ذراتی که به طور عمود بر سد تابیده می‌شوند، فارغ از اندازه و طول سد، یک است. که رفتاری بسیار شگفت‌انگیز است.

---

<sup>۸</sup> سرعت الکترون‌های کم انرژی در گرافن از مقدار انرژی آن مستقل است. در نتیجه، گرافن یک نیمه فلزی بدون گاف انرژی است.

## فصل دوم

# ساختار الکترونی گرافن

در این فصل قصد داریم به معرفی کربن و ساختارهای کربنی بپردازیم و در ادامه، گرافن که یکی از ساختارهای کربنی است را معرفی می‌کنیم. سپس، به بررسی ساختار شبکه‌ای آن می‌پردازیم.

همان‌طور که در شکل (۲.۳.۷) پیداست، الکترون‌های یک زیر شبکه در گرافن می‌توانند به نزدیکترین همسایه‌های اول و دوم و همچنین به نزدیکترین همسایه‌های سوم پوشش داشته باشند. که با توجه به پوشش الکترون‌ها، تقریب بستگی قوی را برای پاشندگی نوارهای الکترونی در گرافن بررسی می‌نماییم و با بیان تحلیلی، این تقریب را تا سومین همسایگی مرور می‌کنیم. سپس، طیف انرژی را به دست می‌آوریم. همچنین در قسمت آخر این فصل، گرافن دولایه را معرفی می‌نماییم و در ادامه، طیف انرژی را برای آن محاسبه می‌کنیم.

## ۱-۲ معرفی ساختارهای کربنی

کربن یکی از پرمیاهوترین عنصر در جدول تناوبی است که ساختارهای هندسی مختلفی را به خود می‌گیرد. برخی از این ساختارها مانند الماس و گرافیت از زمان های قبل شناخته شده‌اند و اکنون از آنها به عنوان ساختارهای کربنی نام می‌برند. بنابراین، اساس همه‌ی ساختارهای کربنی<sup>۱</sup> عنصر کربن می‌باشد.

لازم به ذکر است که، اتم کربن آرایش الکترونی پایه‌ای به صورت  $1s^2 2s^2 2p^2$  را دارد. اما، در زمان ترکیب با اتم‌های دیگر به حالت برانگیخته  $1s^2 2s^1 2p^3$  در می‌آید. که می‌تواند با ۲، ۳، ۴ اتم پیوند برقرار کند. بنابراین، هیبریدهای متفاوتی را می‌تواند داشته باشد. که در ادامه، انواع هیبریداسیون<sup>۲</sup> را توضیح خواهیم داد.

### ۱-۱-۲ هیبرید $sp$

اوربیتال  $2s$ ، با یکی از اوربیتال‌های  $2p$ ، پیوند  $sp$  را انجام می‌دهد و برهم‌نش حالت  $|2s\rangle$  و  $|2p_x\rangle$  به دو حالت متقارن ( $|sp_+\rangle$ ) و پادمقارن ( $|sp_-\rangle$ ) می‌انجامد (شکل (۲.۱.۱)). آشکار است که ابرالکترونی اوربیتال‌های هیبریدی که دمبلی شکل می‌باشند، برای حالت  $|sp_+\rangle$ ، از سمت  $+x$  و برای حالت  $|sp_-\rangle$ ، از سمت  $-x$  گسترده‌تر می‌باشد.

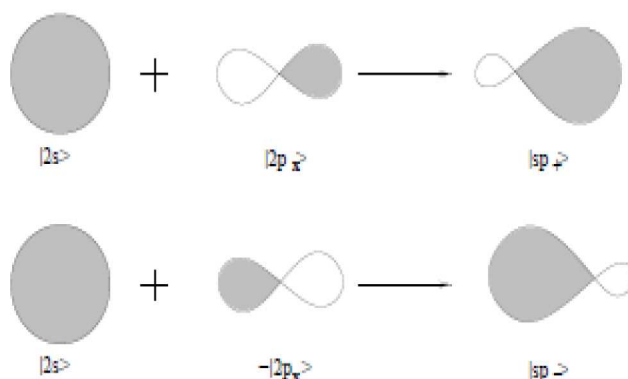
$$|sp_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle + |2p_x\rangle) \quad , \quad |sp_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle - |2p_x\rangle)$$

در واقع این نوع از هیبریداسیون به تشکیل مولکول‌های نظیر  $H-C \equiv C-H$ ، می‌انجامد. بنابراین، در هیبریداسیون  $sp$  تنها اوربیتال  $2s$  و  $2p_x$  مشارکت دارد و دو اوربیتال  $2p_y$  و  $2p_z$  دست نخورده باقی می‌مانند. که مسئول تشکیل پیوندهای  $\pi$  می‌باشند و بسیار سست‌تر از پیوندهای  $\sigma$  هستند [۴].

---

<sup>۱</sup> carbon allotrop

<sup>۲</sup> hybridization



شکل ۲.۱.۱ نمایش شماتیک هیبرید  $sp$ . در سمت چپ چگالی ابر الکترونی اوربیتال‌های  $2s$  (کروی شکل) و  $2p$  (دمبلی شکل) نشان داده شده است و در سمت راست چگالی ابر الکترونی مربوط به پیوندهای هیبریدی مشخص است [۴].

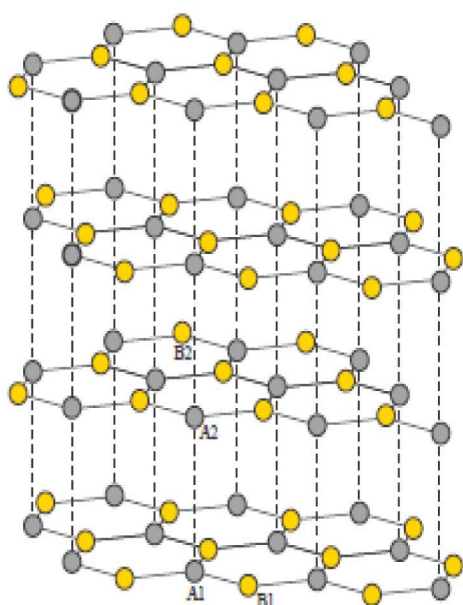
## ۲-۱-۲ گرافیت و هیبرید $sp^2$

گرافیت، دارای هیبرید  $sp^2$  است. در هیبرید  $sp^2$ ، پیوندهای کوالانسی از نوع پیوندهایی می‌باشند که با یکدیگر زاویه  $120^\circ$  درجه می‌سازند. این نوع پیوندهای هیبریدی از برهم‌نهی اوربیتال  $2s$  و اوربیتال‌های  $2p_x$  و  $2p_y$  تشکیل شده است، که این نوع اوربیتال‌ها در صفحه‌ی  $xy$  واقع می‌باشند.

اوربیتال باقی‌مانده  $2p_z$  عمود بر صفحه  $xy$  است. که به سبب، همپوشانی سر به سر با اوربیتال  $p_z$  اتم‌های مجاور که توسط پیوندهای کوالانسی به هم متصل هستند، پیوند ضعیف  $\pi$  را می‌سازند.

همان‌طور که در شکل (۲.۱.۲) می‌بینیم، گرافیت از شمار بسیار زیادی لایه‌های مختلف که در شبکه لانه زنبوری آرایش یافته‌اند، تشکیل شده است. به طوری که، این لایه‌ها به سبب وجود

پیوندهای سست مابین آنها به آسانی از هم جدا می‌شوند، مانند نوشتن با مداد روی یک برگ کاغذ معمولی [۴].

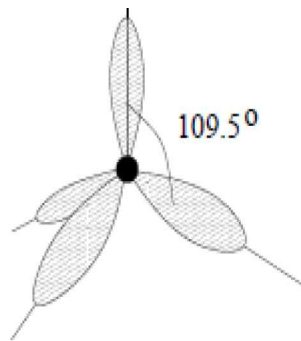


شکل ۲.۱.۲ شماتیک گرافیت [۵].

### ۳-۱-۲ الماس و هیبرید $sp^3$

در الماس هیبریداسیون به صورت  $sp^3$  است. که اوربیتال  $2s$  با سه اوربیتال  $2p$  ( $2p_z, 2p_y, 2p_x$ ) همپوشانی انجام می‌دهد و همان‌طور که در شکل (۲.۱.۳) می‌بینیم، این اوربیتال‌های هیبریدی با زاویه  $109.5^\circ$  درجه نسبت به هم قرار گرفته‌اند. بنابراین، الماس به سبب وجود پیوندهای قوی کوالانسی یکی از سخت‌ترین مواد موجود در طبیعت می‌باشد و این به دلیل

مشارکت تمامی ۴ الکترون اتم کربن در تشکیل پیوند  $\sigma$  است [۴].



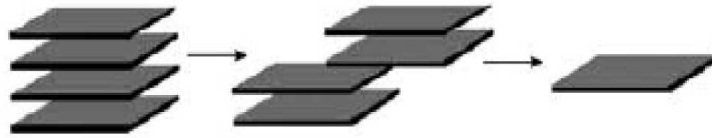
شکل ۲.۱.۳ شماتیک هیبرید  $sp^3$  در الماس. اوربیتال‌های هیبریدی با زاویه  $109.5^\circ$  درجه نسبت به هم قرار گرفته‌اند [۴].

## ۲-۲ تولید گرافن

در سال ۲۰۰۴، یک گروه فیزیکدان از دانشگاه منچستر انگلستان، به کمک شیوه‌های کاملاً طبیعی گرافن را ساختند و تحولی در بررسی‌های مربوط به کربن به وجود آوردند. آنها از گرافیت سه‌بعدی شروع کردند و ورقه‌ای تک‌لایه (یک لایه اتمی) را با روشی که شکافت میکرومکانیکی<sup>۳</sup> نامیده می‌شود، استخراج کردند [۲، ۳]. به این صورت که با استفاده از نوار چسب‌های معمولی، ابتدا توده‌های مختلف گرافیت را از هم جدا کردند. سپس، با تکرار این فرآیند جداسازی، توده‌ی بسیار نازکی از گرافیت را به دست آوردند (شکل (۲.۲.۴)) و در ادامه کار، توده‌ی گرافیت را روی یک زیرلایه سیلیکن اکسید شده قرار دادند. سپس، طیف آن را با استفاده از میکروسکوپ‌های نوری ملاحظه کردند و با توجه به طیف نوری زیرلایه، به جستجوی گرافن پرداختند. به این ترتیب، برای اولین بار گرافن که نازکترین ماده ساخته شده در عالم است را تولید کردند و در سال‌های بعد، خواص آن در زمینه‌های مختلف فیزیک

<sup>۳</sup> micromechanical cleavage technique

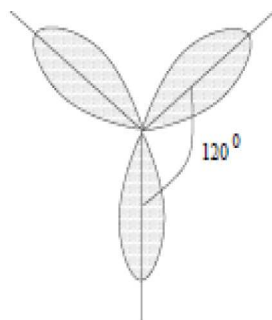




شکل ۲.۲.۴ نمایش شماتیک جداسازی یک تک لایه (گرافن) از گرافیت.

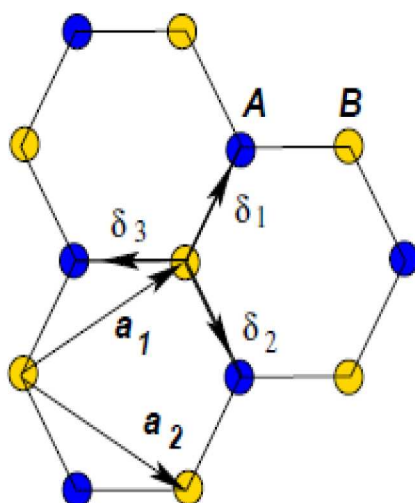
## ۲-۳ ساختار شبکه‌ای گرافن

در گرافن، اوربیتال  $2s$  و  $2p_x$  و  $2p_y$  هر اتم با هم، اوربیتال‌های هیبریدی  $sp^2$  را می‌سازند. که زاویه  $120^\circ$  درجه نسبت به هم دارند (شکل (۲.۳.۵)). بعد، اوربیتال‌های  $sp^2$  هر اتم با اوربیتال‌های  $sp^2$  اتم مجاور، پیوند  $\sigma$  تشکیل می‌دهند. بنابراین، در اثر همپوشانی اوربیتال‌های اتم‌های مجاور، پیوندهای بسیار قوی در ساختار لانه زنبوری گرافن بوجود می‌آید. از این رو، ساختار بلوری گرافن به سبب وجود پیوندهای قوی کوالانسی، بسیار پایدار است و این ماده، اولین ساختار دوبعدی یافت شده در طبیعت است که پایداری بسیار بالایی دارد.



شکل ۲.۳.۵ نمایش شماتیک هیبرید  $sp^2$  [۴].

اما در مورد اوربیتال  $2p_z$ ، هر اتم یک اوربیتال  $2p_z$  دارد که عمود بر صفحه گرافن است و با اوربیتال‌های  $2p_z$  اتم مجاور پیوند ضعیف  $\pi$  را می‌سازد [۴]. اکنون، یک شبکه لانه زنبوری گرافن، که به ازای هر نقطه یک الکترون دارد را در نظر می‌گیریم:



شکل ۲.۳.۶ ساختار شبکه‌ای گرافن.  $a_1$  و  $a_2$  بردارهای شبکه گرافن می‌باشند.  $\delta_i$  ( $i = 1, 2, 3$ )، بردارهایی هستند که نزدیکترین همسایه‌های اول را به هم متصل می‌کنند [۶].

می‌دانیم که شبکه لانه زنبوری گرافن خود یک ساختار براوه نیست، زیرا نقاط مختلف شبکه گرافن که متناظر با اتم‌های کربن می‌باشند را نمی‌توان با ترکیب خطی از بردارهای شبکه به هم متصل کرد و همان‌طور که از شکل (۲.۳.۶) پیداست، اگر یک اتم متعلق به زیر شبکه  $A$  باشد، سه اتم دیگر که نزدیکترین همسایه‌های اول آن محسوب می‌شود، متعلق به زیر شبکه  $B$  می‌باشند. بنابراین، شبکه گرافن از دو زیر شبکه مثلثی شکل براوه  $A$  و  $B$  تشکیل شده است، که با استفاده از بردارهای شبکه می‌توان تمام نقاط شبکه را، که متناظر با اتم‌های کربن هستند را به دست آورد [۶،۷].

در رابطه‌ی زیر،  $a$ ، اندازه‌ی بردارهای شبکه و  $a_0$ ، ثابت شبکه می‌باشد ( $a_0 = 1.42 \text{ \AA}$ ).

$$a = |a_1| = |a_2| = \sqrt{3}a_0 \quad (2.1)$$

با توجه به شکل (۲.۳.۶)، زاویه‌ای که بردار  $a_1$  ( $a_2$ ) با راستای محور  $x$  می‌سازد  $30^\circ$  درجه است. بنابراین، بردارهای شبکه  $a_1$  و  $a_2$  به صورت زیر است:

$$a_1 = \frac{a_0}{2}(3, \sqrt{3}), \quad (2.2)$$

$$a_2 = \frac{a_0}{2}(3, -\sqrt{3})$$

در شکل (۲.۳.۶)، اتم متعلق به زیر شبکه  $B$  را در نظر می‌گیریم. بنابراین، نزدیکترین همسایه‌های اول آن متعلق به زیر شبکه  $A$  هستند و در شکل (۲.۳.۷)، اتم متعلق به زیر شبکه  $A$  را در نظر می‌گیریم [۶، ۸]. بنابراین، نزدیکترین همسایه‌های اول آن متعلق به زیر شبکه  $B$  می‌باشند. که سه بردار زیر نزدیکترین همسایه‌های اول را در گرافن، به هم مرتبط می‌کنند:

$$\delta_1 = \left(\frac{a}{2\sqrt{3}}, \frac{a}{2}\right), \quad (2.3)$$

$$\delta_2 = \left(\frac{a}{2\sqrt{3}}, -\frac{a}{2}\right),$$

$$\delta_3 = \left(-\frac{a}{\sqrt{3}}, 0\right)$$

همچنان که در شکل (۲.۳.۷) نشان داده شده است، الکترون‌ها می‌توانند به نزدیکترین همسایه‌های دوم پویس داشته باشند. که ۶ بردار زیر نزدیکترین همسایه‌های دوم را در گرافن، به هم مرتبط می‌کنند:

$$\delta'_1 = \pm(0, a) = \pm(a_1 - a_2), \quad (2.4)$$

$$\delta'_2 = \pm\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{a}{2}\right) = \pm(a_1),$$

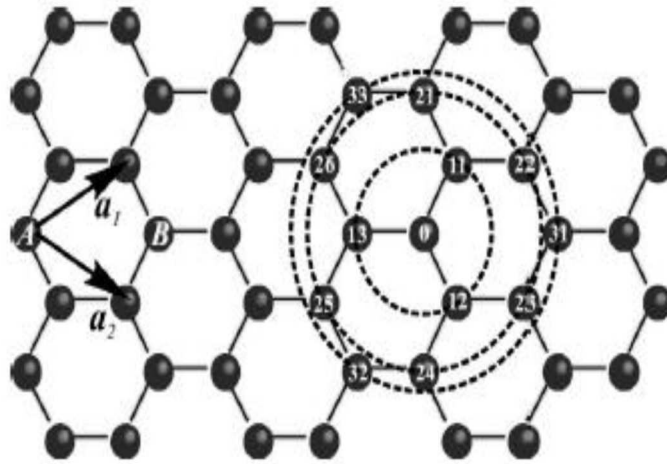
$$\delta'_3 = \pm\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}, -\frac{a}{2}\right) = \pm(a_2)$$

با توجه به شکل زیر، الکترون‌ها می‌توانند به نزدیکترین همسایه‌های سوم پویس داشته باشند. بنابراین، سه بردار زیر نزدیکترین همسایه‌های سوم را در گرافن، به هم مرتبط می‌کنند:

$$\delta''_1 = \left(\frac{2a}{\sqrt{3}}, 0\right), \quad (2.5)$$

$$\delta''_2 = \left(-\frac{a}{\sqrt{3}}, -a\right),$$

$$\delta''_3 = \left(-\frac{a}{\sqrt{3}}, a\right)$$



شکل ۲.۳.۷ ساختار شبکه‌ای گرافن.  $a_1$  و  $a_2$  بردارهای شبکه گرافن می‌باشند. اتم  $A_0$  که متعلق به زیر شبکه  $A$  می‌باشد را به عنوان اتم مرکزی در نظر می‌گیریم. ۳ اتم  $B_{1i}$  ( $i = 1, 2, 3$ ) نزدیکترین همسایه‌های اول و ۶ اتم  $A_{2i}$  ( $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ ) نزدیکترین همسایه‌های دوم و ۳ اتم  $B_{3i}$  ( $i = 1, 2, 3$ ) نزدیکترین همسایه‌های سوم  $A_0$  می‌باشند [۸].

## ۲-۴ رابطه‌ی پاشندگی در گرافن

حالت‌های ویژه ( $\Psi$ ) هامیلتونی یک الکترونی  $H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(r)$  را که در آن برای همه‌ی بردارهای  $R$  در شبکه برآوه داریم  $U(r+R) = U(r)$ ، می‌توان به گونه‌ای برگزید که به شکل حاصل ضرب یک موج تخت در تابعی با دوره شبکه برآوه باشد [۹]:

$$\Psi_k(r) = e^{ik \cdot r} u_k(r) \quad (2.6)$$

$\Psi$ ، تابع موج بلاخ است.

برای همه‌ی بردارهای  $R$ ، در شبکه برآوه داریم:

$$u_k(r+R) = u_k(r)$$