



وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه شهید مدنی آذربایجان
دانشکده علوم پایه
گروه فیزیک

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته فیزیک
گرایش حالت جامد

عنوان

پذیرفتاری اسپینی گرافین تک لایه تحت برهمکنش اسپین-مدار راشبا

استاد راهنما:
دکتر آرش فیروزنیا

استاد مشاور:
دکتر حکیمه محمدپور

پژوهشگر:
فاطمه دلخوش خمیرانی

مهر ۱۳۹۲

تبریز، ایران

تقدیم بہ

شہیدان اسلام

خدایا... ..

پرواز را به ما بیاموز تا مرغ دست آموز شویم و از نور خویش، آتش در دل ما بیفزود، تا در سرمای بی خبری مانیم. خون شهیدان را در تن ما جاری گردان تا به مانند خونکنیم و دست آن شهیدان بر پیکرمان آویز تا مشت خونیشان را بر افراشته داریم، خدایا چشمی عطا کن تا برای تو بگرییم، دستی عطا کن تا دلمانی جز تو نکسیرم، پایی عطا کن که جز راه تو نرود و جانی عطا کن که برای تو برود.

به من زیستنی عطا کن که در محطه‌ی مرگ، بر بی‌شمی محطه‌ای که برای زیستن گذشته است، حسرت نخورم و به من توفیق تلاش در سنگت، صبر در نومیدی، رفتن بی‌بمراه، جهاد بی‌سلاح، کار بی‌پاداش، خداکاری در سکوت، دین بی‌دنیا، مذهب بی‌عوام، عظمت بی‌نام، خدمت بی‌نان، ایمان بی‌ریا، خوبی بی‌نمود، کسالت بی‌خامی، قناعت بی‌غرور، عشق بی‌هوس، تنهایی در انبوه جمعیت و دوست داشتن بی‌آنکه دوست بداند، روزی کن. پس مراجزو کسانی قرار ده که جان خود را به تو می‌فروشند... خدایا پس عاقبت و نهایت کار مرا شهادت در راه خود قرار ده و مرا در این راه به پایان ببر و با کشته شدنم در راه تو رضایت خود را شامل حالم کن و گناهانم را بخش و مراجزو کسانی قرار ده که در راه تو و در زیر پرچم هدایت تو و برای نصرت دین توبه دست بدترین بندگان نافرمانت کشته می‌شوند و مراجزو کسانی قرار ده که نزد تو زنده اند و نزد تو روزی می‌نورند.

پاس کزاری... .

پاس خداوند منان، که علم را به انسان آموخت و در قرآن کریم به قلم سوگند یاد کرد، پاس خداوندی را که به بنده می
حقیر این توانایی و هوش و استعداد را عطا نمود که بتوانم در مقطع آموزش عالی تحصیل نمایم.
از استاد راهنمای محترم، جناب آقای دکتر فیروز نیا که در پیشرفت و پیشبرد پروژه‌ی تحصیلی ام، بارها بنیادی و مساعدت
عالمانه خود را به کوشش این پژوهش‌کننده و بنده را در شرایط‌های مختلف درک نموده اند، نهایت پاس و تشکر را دارم و
از خداوند متعال برای ایشان ارتقای مدارج بالاتر و پیشرفت روزافزون را خواستارم.

همچنین از استاد مشاور، سرکار خانم حکیمه محمدپور که مشاوره‌ی بنده را قبول کردند، پاس کزاری می‌کنم.

از پدر و مادر عزیزم، دو کوهگر انقدر زندگیم که در به ثمر رسیدن دوران تحصیل نهایت مدد، یاری، لطف و عنایت را به
بنده داشتند، بی نهایت ممنونم و بردستان پر عطف و این دو عزیز بوسه‌ی عشق می‌نهم.

فاطمه دینخوش خمیرانی

فهرست مطالب

| | |
|----|--|
| ث | فهرست مطالب |
| ح | چکیده |
| خ | مقدمه |
| د | پیشگفتار |
| ۱ | ۱ کلیات گرافین |
| ۱ | ۱.۱ پیشینه‌ی گرافین تا کنون |
| ۲ | ۲.۱ ساختارهای پیوندی در گرافین |
| ۱۳ | ۱.۲.۱ شبکه‌ی مستقیم گرافین |
| ۱۴ | ۲.۲.۱ شبکه‌ی وارون گرافین |
| ۱۵ | ۳.۱ مدل تنگ‌بست |
| ۱۷ | ۴.۱ مدل تنگ‌بست در گرافین تک‌لایه |
| ۱۸ | ۱.۴.۱ عناصر قطری ماتریس |
| ۲۰ | ۲.۴.۱ عناصر غیرقطری ماتریس |
| ۲۲ | ۳.۴.۱ انرژی پایین باند الکترونیکی گرافین تک‌لایه |
| ۲۵ | ۵.۱ شبه ذرات بدون جرم کایرال |

| | | |
|----|-------|---|
| ۲۵ | ۱.۵.۱ | هامیلتونی دیراک گونه |
| ۲۷ | ۲.۵.۱ | شبه اسپین و کایرالیته در گرافین |
| ۲۹ | ۲ | اثر راشبا در گرافین |
| ۲۹ | ۱.۲ | اسپینترونیک |
| ۳۲ | ۲.۲ | جفت شدگی اسپین-مدار |
| ۳۴ | ۳.۲ | برهمکنش اسپین-مدار راشبا |
| ۳۶ | ۴.۲ | تأثیر برهمکنش اسپین-مدار راشبا در گرافین |
| ۳۹ | ۵.۲ | محاسبه ماتریس هامیلتونی در پایه های اسپین الکترون و شبه اسپین گرافین |
| ۳۹ | ۱.۵.۲ | محاسبه ماتریس هامیلتونی در نقطه ی دیراک K |
| ۴۳ | ۲.۵.۲ | محاسبه ویژه مقدار و ویژه بردار در نقطه ی دیراک K |
| ۴۷ | ۳.۵.۲ | محاسبه ماتریس های $\sigma_x, \sigma_y, s_x, s_y$ در پایه های $ \nu\mu\rangle$ |
| ۴۹ | ۴.۵.۲ | محاسبه ماتریس هامیلتونی در نقطه ی دیراک K' |
| ۴۹ | ۵.۵.۲ | محاسبه ویژه مقدار و ویژه بردار در نقطه ی دیراک K' |
| | ۶.۵.۲ | محاسبه ماتریس های s_x, s_y در پایه های $ \nu\mu\rangle$ در نقطه ی دیراک |
| ۵۱ | | K' : |
| ۵۲ | ۳ | روش کوبو و تابع پاسخ |
| ۵۲ | ۱.۳ | معرفی روش کوبو |
| ۵۷ | ۲.۳ | روش کوبو برای رسانندگی الکتریکی |
| ۶۱ | ۱.۲.۳ | میدان های عرضی، دمای صفر |
| ۶۵ | ۳.۳ | روش کوبو برای پذیرفتاری مغناطیسی |
| ۶۸ | ۴ | پاسخ اسپینی در حضور جمله ی برهمکنش اسپین-مدار راشبا |
| ۶۸ | ۱.۴ | مقدمه |

| | | |
|----|---|-------|
| ۶۸ | پذیرفتاری اسپینی در حضور جمله‌ی برهمکنش راشبا | ۲.۴ |
| ۶۹ | محاسبه‌ی جابه‌جاگر $\langle [s_i(t), s_j(0)] \rangle$: | ۱.۲.۴ |
| | محاسبه‌ی جابه‌جاگرهای $\langle [s_x(t), s_x(0)] \rangle$ ، $\langle [s_y(t), s_y(0)] \rangle$ ، | ۲.۲.۴ |
| ۷۲ | $\langle [s_x(t), s_y(0)] \rangle$ و $\langle [s_y(t), s_x(0)] \rangle$ در نقطه‌ی K : | |
| ۷۴ | محاسبه‌ی متوسط جابه‌جاگر $\langle [s_x(t), s_x(0)] \rangle$ در نقطه‌ی K : | ۳.۲.۴ |
| ۷۵ | محاسبه‌ی پذیرفتاری اسپینی χ_{xx} در نقطه‌ی K : | ۴.۲.۴ |
| ۸۷ | محاسبه‌ی متوسط جابه‌جاگر $\langle [s_y(t), s_y(0)] \rangle$ در نقطه‌ی K : | ۵.۲.۴ |
| ۸۸ | محاسبه‌ی پذیرفتاری اسپینی χ_{yy} در نقطه‌ی K : | ۶.۲.۴ |
| | محاسبه‌ی متوسط جابه‌جاگرهای $\langle [s_y(t), s_x(0)] \rangle$ و $\langle [s_x(t), s_y(0)] \rangle$ | ۷.۲.۴ |
| ۹۰ | در نقطه‌ی K : | |
| ۹۰ | محاسبه‌ی پذیرفتاری اسپینی χ_{xy} و χ_{yx} در نقطه‌ی K : | ۸.۲.۴ |
| ۹۱ | محاسبه‌ی پذیرفتاری در نقطه‌ی K' : | ۳.۴ |
| ۹۱ | نمودارها و تحلیل آن‌ها | ۴.۴ |
| ۹۷ | لیست تصاویر | |
| ۹۹ | مراجع | |

چکیده

از آنجایی که گرافین به تنهایی قابل ساخت و سنتز نیست و حتما بر روی زیرلایه‌ای باید قرار گیرد و با توجه به برهمکنش این لایه با الکترون‌های رسانش جمله‌ی اسپین-مدار راشبا ایجاد می‌گردد، با یافتن ویژه مقادیر و ویژه بردارهای هامیلتونی مؤثر سیستم و به کارگیری روش کوبو برای محاسبه‌ی کمیته‌ها در رژیم خطی اثر برهمکنش زیرلایه بر روی پذیرفتاری اسپینی گرافین که خود ماده‌ای غیرمغناطیسی است محاسبه خواهد شد. در این پایان‌نامه پذیرفتاری اسپینی برای گرافین تک‌لایه محاسبه خواهد شد که تاکنون فقط برای الکترون آزاد محاسبه شده است.

کلمات کلیدی: گرافین-اثر راشبا-پذیرفتاری اسپینی-روش کوبو

مقدمه

ساختارهای گرافین تک لایه از جمله ساختارهایی می باشند که عرضی در حد یک اتم دارا هستند و در این ضخامت و حتی در ضخامت‌هایی بالاتر از این حد بردار موج الکترونی در این راستا کاملاً کوانتیزه بوده و بررسی دقیق این گونه از سیستم‌ها فقط در چارچوب مکانیک کوانتومی امکان‌پذیر می‌باشد. علاوه بر کوانتش بردار موج که مشخصه‌ی سیستم‌های نانومتری و مزوسکوپیک است. نوار انرژی گرافین نیز مشخصه‌ی بسیار مهمی از این سیستم است. شکل این نوار به گونه‌ای است که تحرک‌پذیری بسیار بالایی به حامل‌های این سیستم می‌بخشد که این ویژگی به محدودیت دو بعدی سیستم گرافین کاملاً وابسته است. بنابراین با توجه به ابعاد و مدل‌های قابل استفاده در گرافین، این ماده رامی توان جزء نانوساختارها دانست. در میان خواص مشاهده شده در نانوساختارها، خواص مغناطیسی حامل‌های جریان اهمیت ویژه‌ای دارند کنترل این جریان وابسته به اسپین اهمیت به سزایی در علم اسپینترونیک دارد با توجه به تحرک‌پذیری بسیار بالای الکترون‌ها در گرافین، در صورتی که بتوان اسپین آنها را با برهمکنشی مانند راشبا کنترل نمود، گام مهمی در راستای علم اسپینترونیک و استفاده درجه آزادی اسپینی برای انتقال اطلاعات برداشته شده است. پایان‌نامه‌ی حاضر در راستای این هدف و امکان‌سنجی آن گام برمی‌دارد.

پیشگفتار

در این پایان‌نامه با استفاده از ویژه حالت‌های گرافین در چار چوب روش کوبو و در رژیم خطی که مشخصه‌ی این رژیم است، پذیرفتاری اسپینی برای گرافین تک لایه محاسبه خواهد شد. فصل اول این پایان‌نامه به تعاریف و کلیات گرافین می‌پردازد. که شامل پایه‌های نظری و پیشینه گرافین تاکنون مورد بحث قرار می‌گیرد. در فصل دوم اثر راشبا در گرافین را نشان می‌دهیم، که به وسیله‌ی آن ویژه مقادیر و ویژه بردارهای هامیلتونی مؤثر سیستم را به دست می‌آوریم. در فصل سوم به معرفی روش کوبو و تابع پاسخ می‌پردازیم. در فصل چهارم با به کار گیری روش کوبو برای محاسبه کمیتها در رژیم خطی اثر بر همکنش زیر لایه بر روی پذیرفتاری اسپینی گرافین که خود ماده‌ای غیر مغناطیسی است محاسبه خواهد شد.

فصل ۱

کلیات گرافین

۱.۱ پیشینه‌ی گرافین تا کنون

نخستین بار در سال ۱۹۴۷، فلیپ والاس^۱ درباره‌ی گرافین نوشت و پس از آن زمان، تلاش‌های زیادی برای ساخت آن صورت گرفته بود، اما قضیه‌ی ای به نام مرمین-واگنر^۲ در مکانیک آماری و نظریه میدان‌های کوانتومی ساخت یک ماده‌ی دو بعدی را غیر ممکن و ناپایدار می‌دانست. بیش از هفتاد سال پیش لاندائو^۳ و پیرلس^۴ ادعا کردند که کریستال دو بعدی کامل از نظر ترمودینامیکی ناپایدار است و عملاً نمی‌تواند وجود داشته باشد. نظریه‌ی آن‌ها بیان می‌کرد که یک سهم مشتق تغییرات نوسانی گرمایی قابل مقایسه با نیروی بین اتمی در دماهای پایین می‌بایست منجر به چنین جابجایی در اتم در کلیه دماهای پایین شود. در واقع ادعای آن‌ها بر این حقیقت بود که با کاهش ضخامت لایه، دمای ذوب آن ماده کاهش پیدا می‌کند و این موضوع باعث ناپایدار شدن یک سیستم بلوری و جزیره‌ای شدن و نهایتاً از هم پاشیده شدن سیستم دو بعدی می‌شود. به همین دلیل در طول این زمان سیستم تک‌لایه‌ی اتمی عملاً بخشی از ساختار سه بعدی در نظر گرفته می‌شده که با

^۱Philip Wallace

^۲Mermin-Wagner

^۳Landau

^۴Peierls

روی هم قرار گرفتن این لایه‌ها ساخته می‌شوند. تا سال ۲۰۰۴ مواد بدون پایه‌ی سه بعدی در نظر گرفته نمی‌شدند و اعتقادی به ماده‌ی دو بعدی وجود نداشت، اما ناگهان با کشف گرافین توسط فیزیکدانان روسی به نام اندره گایم^۵ و همکارش کنستانتین نوسلوو^۶، سیستم‌های دو بعدی پایدار دیگر مانند تک‌لایه‌ی نیترا بور زمینه‌ی بکری به روی محققان علوم و تکنولوژی گشوده شد. این کریستال می‌تواند بر روی زیرلایه‌های غیرکریستالی و مایع و همچنین بصورت غشا تشکیل شود. در یک توضیح تکمیلی می‌توان اظهار داشت که پایداری ذاتی کریستال دو بعدی استخراج شده با ضربه‌گیری بعد سوم جانبی که در ابعاد ۱۰ نانومتر است امکان‌پذیر می‌شود. این تاب برداشتن سه بعدی مشاهده شده در تجربه باعث به وجود آمدن یک انرژی الاستیک در سیستم می‌شود که می‌تواند نوسانات گرمایی را سرکوب کند. این انرژی بالاتر از دمایی است که می‌تواند انرژی آزاد را کمینه کند.

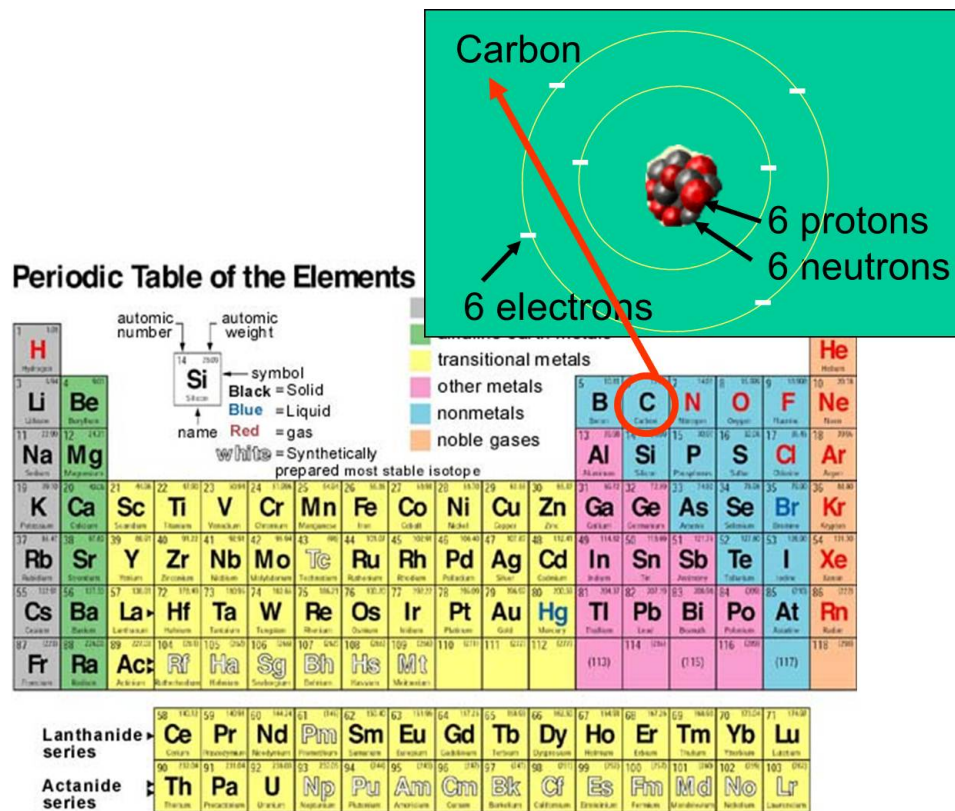
با وجود دسته‌ی وسیعی از مواد دو بعدی، تمامی تلاش‌های تجربی و نظری بر روی گرافین متمرکز شده است. این اتفاق در حدی است که محققان مابقی مواد دو بعدی را فراموش کرده‌اند. این جانبداری دلیل موجه و واضحی دارد. در حقیقت کریستال گرافین ایزوله شده، ویژگی‌های متمایز الکترونیکی خارق العاده‌ای نسبت به دیگر مواد دو بعدی دارد. مردم به تجربه می‌دانند که نمونه‌های با کیفیت بالا همیشه نتایج فیزیکی جدیدی را از خود نشان می‌دهد و این قضیه برای گرافین نیز کاملاً مصداق دارد [۱].

۲.۱ ساختارهای پیوندی در گرافین

برای کمک به درک ساختار و خواص گرافین ابتدا در این بخش فیزیک و شیمی کربن را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

^۵Andre Geim

^۶Konstantin Novoselov



شکل ۱.۱: کربن در جدول تناوبی

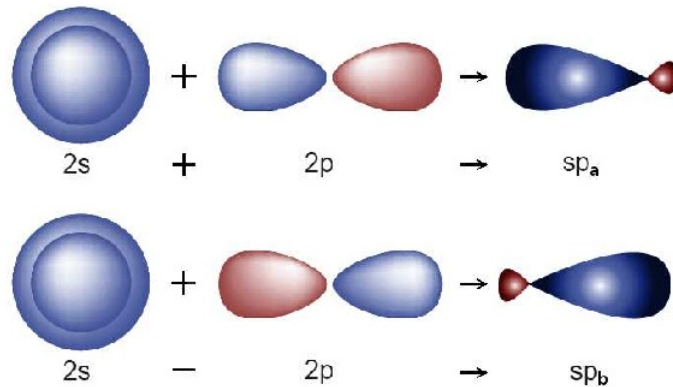
کربن یک عنصر در گروه چهارم است که در تولید بسیاری از ترکیبات مولکولی و جامدات کریستالی نقش فعالی را بازی می‌کند و پایه و اساس فناوری‌های مختلفی هستند. کربن، عنصر شیمیایی از تمام اشکال زندگی بر روی زمین است. به عنوان مثال دومین عنصر از نظر فراوانی در بدن انسان (در حدود ۱۸.۵ درصد)، پانزدهمین عنصر فراوان در پوسته زمین و چهارمین عنصر فراوان در جهان است. کربن دارای ۶ الکترون می‌باشد، عدد اتمی آن ۶ است و عضو گروه چهارده در جدول تناوبی می‌باشد (شکل ۱.۱). این اتم‌ها علاوه بر ترکیب شدن با عناصر دیگر، می‌توانند با اتم‌های کربن نیز پیوند دهند. به همین دلیل خواص شیمیایی و فیزیکی متفاوتی

از خود نشان می‌دهند. کربن دارای سه ایزوتوپ^۷ طبیعی است که ^{12}C و ^{13}C پایدار هستند و ^{14}C رادیو اکتیو است. اتم‌های کربن از نظر ترتیب پر شدن اوربیتال‌ها، دارای ساختار الکترونی $1s^2 2s^2 2p^2$ هستند [۲]. بنابراین چهار الکترون آزاد دارند که امکان تشکیل چهار پیوند را برای این اتم‌ها مهیا می‌سازد. اتم‌های کربن به دلیل اوربیتال اتمی هیبرید شده^۸ توانایی پیوندهای پایدار اشکال مختلف را دارا می‌باشد و دارای ترکیبات وسیع و بی‌شماری است. به همین دلیل منحصر به فرد است. اوربیتال‌های $1s$ انرژی در حدود $E = -285eV$ دارد و الکترون‌های $1s$ به الکترون‌های هسته مشهورند و این الکترون‌ها به هسته مقیدند و در پیوند اتمی شرکت نمی‌کنند. بنابراین تأثیر کوچکی بر خواص فیزیکی مبتنی بر مواد کربنی دارند و عمدتاً به عنوان حفاظ الکترون‌های پوسته بیرونی عمل می‌کنند.

پوسته‌ی دوم منعطف‌تر است و اختلاف انرژی بین اوربیتال‌های $2s$ و $2p$ کمتر از انرژی به دست آمده از طریق انرژی بستگی^۹ در $C-C$ است. به همین دلیل، هنگامی که اتم‌های کربن با یکدیگر اتصال پیدا می‌کنند، اوربیتال‌های $2s$ و $2p$ آن‌ها با یکدیگر در اوربیتال‌های هیبریدی sp^n ($n = 1, 2, 3$) مخلوط می‌شوند. اوربیتال‌های اتمی هیبریدی کربن، به وسیله‌ی اختلاط تابع موج^{۱۰} اوربیتال‌های الکترونیکی خود، با حداقل رساندن انرژی اتصال اتم کربن با اتم‌های همسایه‌اش شکل می‌گیرد. برای کربن سه احتمال ممکن برای تقارن مداری اوربیتال $2s$ و سه زیر اوربیتال $2p_x$ ، $2p_y$ و $2p_z$ وجود دارد.

احتمال اول آن است که اختلاط $2s$ با یک زیر اوربیتال $2p$ ، برای مثال $2p_x$ که دو زیر اوربیتال sp را تولید می‌کند (شکل ۲.۱). مانند استیلن $CH \equiv CH$ ^{۱۱} [۳، ۲] که بر همکنش اوربیتال $2s$

^۷isotope^۸hybridized^۹binding energy^{۱۰}wavefunctions^{۱۱}acetylene



شکل ۲.۱: اختلاط اوربیتال ۲s با یک زیر اوربیتال ۲p [۳]

با $2p_x$ به دو حالت متقارن و نامتقارن تبدیل می‌شوند که به ترتیب $|sp_a\rangle$ و $|sp_b\rangle$ مشخص می‌شوند. (شکل ۳.۱)

$$|sp_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle + |2p_x\rangle) \quad (1.1)$$

$$|sp_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle - |2p_x\rangle) \quad (2.1)$$

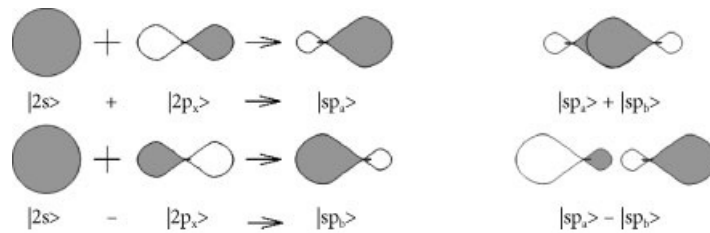
که $|sp_a\rangle$ و $|sp_b\rangle$ به ترتیب در جهت $+x$ و $-x$ قرار دارند و آن‌ها ترکیبات مولکولی متقارن ^{۱۲} و پادمتقارن ^{۱۳} $|sp_a\rangle \pm |sp_b\rangle$ را تشکیل می‌دهند و زمانی که ترکیب مولکولی متقارن است سطح انرژی، وقتی اتم‌های کربن به یکدیگر نزدیک می‌شوند پایین تر از حالتی است که از هم جدا هستند به همین دلیل حالت پیوندی ^{۱۴} نامیده می‌شوند. در حالی که ترکیب مولکولی پادمتقارن، سطح انرژی برای زمانی که اتم‌های کربن فاصله ی زیادی از هم دارند افزایش می‌یابد، که این حالت، حالت پادپیوندی ^{۱۵} نامیده می‌شود. $|sp_a\rangle \pm |sp_b\rangle$ معمولاً حالت‌های σ و σ^* نامیده

^{۱۲}symmetric

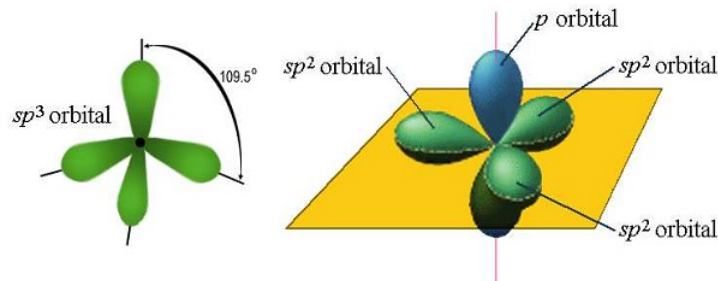
^{۱۳}antisymmetric

^{۱۴}bonding

^{۱۵}antibonding



شکل ۳.۱: تابع موج $|sp_a\rangle = |2s\rangle + |2p_x\rangle$ پیوند در جهت $+x$ و $|sp_b\rangle = |2s\rangle - |2p_x\rangle$ پیوند در جهت $-x$ را نشان می‌دهد. حالت‌های متقارن $|sp_a\rangle + |sp_b\rangle$ و حالت‌های پادمقارن $|sp_a\rangle - |sp_b\rangle$ به ترتیب شامل ترکیبات پیوندی و پادپیوندی σ هستند. [۴]

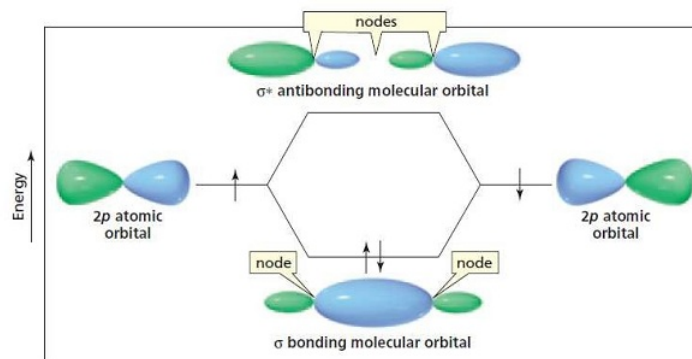


شکل ۴.۱: اوربیتال هیبریدی sp^3 و sp^2 [۳]

می‌شوند. حالت σ مسئول پیوند کووالانسی قوی بین دو اتم کربن و حالت σ^* برای حالت اشغال نشده است. از آنجایی که در هیبریداسیون sp اوربیتال‌های $2p_y$ و $2p_z$ دست نخورده باقی می‌مانند مسئول پیوندهای π هستند که پیوندهایی ضعیف‌تر از پیوندهای σ هستند.

احتمال دوم اختلاط $2s$ با دو زیراوربیتال از $2p$ است. به عنوان مثال $2p_x$ و $2p_y$ ، برای تولید سه زیراوربیتال از sp^2 که در یک سطح با زاویه‌ی 120° درجه قرار می‌گیرند. در اینجا هر اتم کربن با سه همسایه‌ی نزدیک تشکیل یک شش ضلعی مسطح را می‌دهد (شکل ۴.۱).

در اوربیتال‌های هیبریداسیون sp^2 سه پیوند σ و سه پادپیوند σ^* تشکیل می‌شود. اوربیتال $2p_z$ باقی‌مانده، پیوند و پاد پیوند π و π^* تشکیل می‌دهد. در مورد کربن sp^2 اوربیتال‌های π و π^* به ترتیب مسئول بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده و پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده



شکل ۵.۱: پیوند σ (σ^*) مابین دو اوربیتال هیبریدی sp^2 [۲]

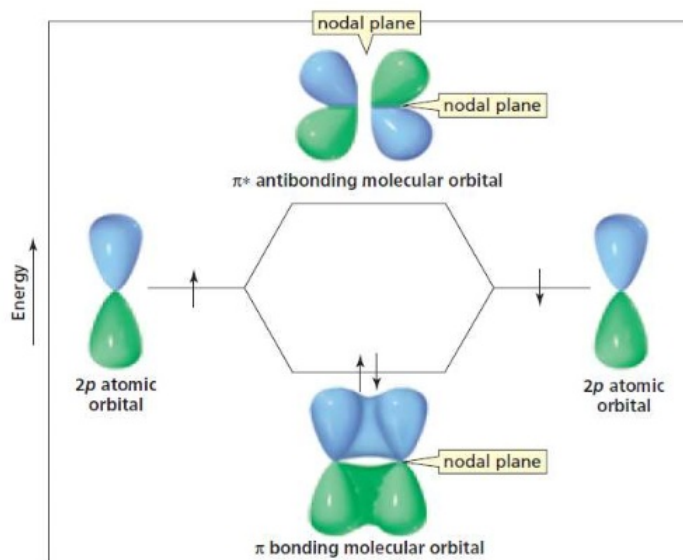
هستند. سومین احتمال اختلاط $2s$ با هر سه زیر اوربیتال $2p$ ، یعنی $2p_x$ ، $2p_y$ ، $2p_z$ است که چهار sp^3 با تقارن چهار وجهی تولید می‌کند. که اتصال چهار اتم کربن با چهار کربن همسایه در رئوس یک چهار ضلعی منتظم را تشکیل می‌دهند (شکل ۴.۱).

وقتی اتم‌های کربن در هر واکنش شیمیایی شرکت می‌کنند، اوربیتال‌های هیبریدی الکترون‌های خود را به اشتراک می‌گذارند که منجر به دو احتمال می‌شود. یک راه این است که هنگامی که دو اوربیتال در یک فاز در امتداد محور بین اتم‌ها با هم همپوشانی می‌کنند (مانند sp^2) به عنوان مثال، آن‌ها در یک مد سر به سر با هم همپوشانی می‌کنند که یک پیوند σ را تشکیل می‌دهند. در این مورد هنگامی که همپوشانی دو اوربیتال خارج از فاز باشد پادپیوند σ^* تشکیل می‌شود (شکل ۵.۱).

راه دوم هنگامی است که دو اوربیتال مانند $2p_z$ بایکدیگر همپوشانی پهلو به پهلو دارند به طوری که دو اوربیتال در یک فاز (یا خارج از فاز) باشند، که منجر به یک پیوند π (π^*) می‌شود (شکل ۶.۱).

پیوند اوربیتالی هیبرید sp^2 از اتم‌های کربن را می‌توان در مولکول اتن (C_2H_4) 16 نشان داد. اتن یک پیوند دو گانه بین اتم‌های کربن دارد که شامل یک پیوند سیگما σ از همپوشانی سر به

^{۱۶}Ethene



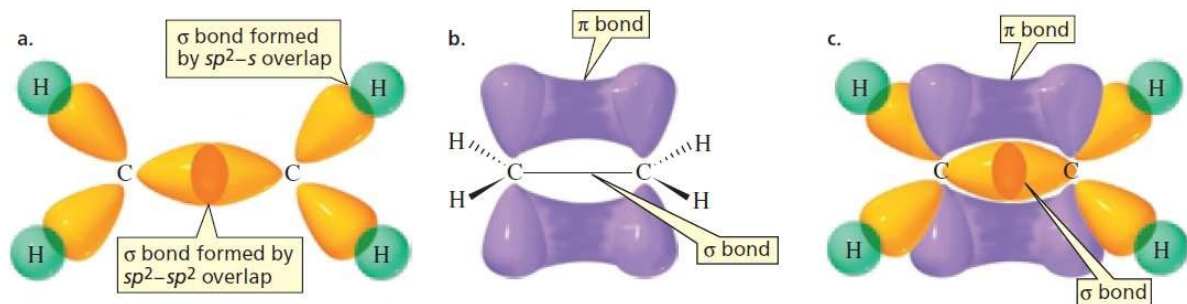
شکل ۱.۶: پیوند π (π^*) مابین دو اوربیتال هیبریدی sp^2 [۲]

سر دو اوربیتال sp^2 و یک پیوند پای π از همپوشانی پهلو به پهلو دو اوربیتال $2p_z$ تشکیل شده است، که پیوند π شامل دو قسمت بالا و پایین محور است. چهار پیوند هیدروژنی از همپوشانی اوربیتال sp^2 اتم کربن دیگر با اوربیتال $1s$ هیدروژن ناشی می‌شود. شکل کلی مولکول مسطح با $H - C - C - H$ و با زاویه پیوند در حدود 120° درجه است (شکل ۱.۷) [۲، ۳].

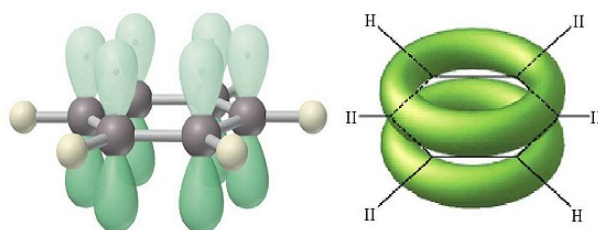
به منظور درک پیوند اتم‌های کربن در گرافین، یک پیوند شش‌تایی از اتم کربن در مولکول بنزن 17 می‌پردازیم. بنزن یک حلقه از ۶ اتم کربن با سه پیوند دوگانه که به طور مساوی بین آنها قرار گرفته است. اوربیتال $2p_z$ که هر کدام شامل یک الکترون می‌باشند، موازی یکدیگر قرار گرفته‌اند. بنابراین سه پیوند π وجود دارد. از آنجایی که هیچ پیکر بندی مرجحی برای سه پیوند π وجود ندارد کل حلقه ی مولکولی غیرجایگزیده 18 است (شکل ۱.۸). اوربیتال $2p_z$ منجر

^{۱۷}benzene

^{۱۸}delocalized



شکل ۷.۱: پیوند σ و π در اتن [۲]



شکل ۸.۱: پیوند π غیرجایگزیده در بنزن [۳]

به حامل‌های غیرجایگزیده در گرافین می‌شود، که دلیل برتری خواص گرافین را نشان می‌دهد. با توجه به نوع اوربیتال‌های هیبریداسیون اتم‌های کربن که نوع پیوندشان (σ یا π) انواع مختلف آلوتروپ‌های ^{۱۹} کربن را مشخص می‌کنند، شناخته شده‌ترین آن‌ها الماس ^{۲۰}، گرافیت ^{۲۱}، نانولوله‌ها ^{۲۲} و فولرن ^{۲۳} می‌باشد [۵]. در الماس هر اتم کربن با چهار اتم کربن دیگر پیوند می‌دهد. بنابراین از تمام چهار ظرفیت خود برای تشکیل پیوند استفاده کرده است. به دلیل این پیوند، الماس ماده‌ای بسیار سخت و نیمه شفاف و عایق است. در ساختار گرافیت، نانولوله و فولرن نیز پیوندهای یگانه‌ای بین اتم‌های کربن وجود دارد. با این تفاوت که هر اتم تنها با سه اتم دیگر پیوند می‌دهد و در نتیجه سه پیوند یگانه کوالانسی دارد. در این ساختارها اتم کربن یکی از ظرفیت‌های خود را مصرف نمی‌کند. این ظرفیت خالی که در واقع یک الکترون اضافی است، به شکل یک پیوند آزاد در خارج از صفحه‌ای که دیگر اتم‌ها در آن قرار دارند، قرار می‌گیرد. این پیوند آزاد یا معلق می‌تواند در شرایطی با گروه‌های عاملی یا دیگر اتم‌های رادیکالی موجود در محیط پیوند دهد و به دلیل چنین پیوندی گرافیت ماده‌ای نرم، کدر و رساناست.

صفحات گرافین با کنار هم قرار گرفتن اتم‌های کربن تشکیل می‌شوند. در یک صفحه گرافین، هر اتم کربن با سه اتم کربن دیگر پیوند داده است. [۸، ۱] این سه پیوند در یک صفحه قرار دارند و زوایای بین آن‌ها با یکدیگر مساوی و برابر با ۱۲۰ درجه است. در این حالت، اتم‌های کربن در وضعیتی قرار می‌گیرند که شبکه‌ای از شش ضلعی‌های منتظم را ایجاد می‌کنند (شکل ۹.۱). البته این ایده‌آل‌ترین حالت یک صفحه‌ی گرافین است. در برخی مواقع، شکل این صفحه به گونه‌ای تغییر می‌کند که در آن پنج ضلعی‌ها و هفت ضلعی‌هایی نیز ایجاد می‌شود (شکل ۹.۱). بنابراین

^{۱۹} allotropes^{۲۰} diamond^{۲۱} graphite^{۲۲} carbon nanotubes (CNTs)^{۲۳} fullerene