

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و
نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه
متعلق به دانشگاه رازی است.



دانشکده علوم
گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته فیزیک

عنوان پایان نامه

اثرات میدان مغناطیسی روی صفحه ی گرافینی

استاد راهنما:

دکتر حمزه موسوی

نگارش:

سیده مریم علوی سیدمحمدلو

اسفند ۱۳۸۹

تقدیم بہ پدرم مستحکم ترین پایہ ی زندگی ام

ومادرم بزرگترین سرمایہ ی عاطفی ام

تقدیر و قدردانی

اکنون که به یاری خداوند متعال این پایان‌نامه به پایان رسیده است از تمامی کسانی که در نگارش این رساله سهیم بوده اند تشکر و قدردانی می‌نمایم. بخصوص از استاد محترم، جناب آقای دکتر حمزه موسوی که با صبر و حوصله و راهنمایی‌های دلسوزانه و بی‌دریغ‌شان مرا در تمامی مراحل پایان‌نامه یاری نمودند کمال تشکر و سپاس‌گذاری را دارم. در ضمن از داور خارجی جناب آقای دکتر مهران باقری و داور داخلی جناب آقای دکتر علی فتحعلیان که داوری این پایان‌نامه را پذیرفته‌اند کمال تشکر را دارم همچنین از تمامی اساتید گروه فیزیک که تمامی دانسته‌های خود را مدیون حضور ارزشمند این عزیزان هستم، کمال تشکر را دارم.

چکیده

در این پایان نامه ما اثر میدان مغناطیسی یکنواخت را روی چگالی حالت‌های صفحه‌ی گرافینی بررسی می‌کنیم. از تکنیک‌های مدل هامیلتونین تنگ بست و تابع گرین در این پایان نامه استفاده کردیم. همچنین اثر میدان مغناطیسی را روی ساختار باند شبکه‌ی مربعی مورد مطالعه قرار دادیم.

در فصل اول این پایان نامه، ابتدا کربن و آلوتروپ‌های کربنی مثل گرافیت، الماس، و فلورن و نانوتیوب را معرفی می‌کنیم و در پایان این فصل پیرامون جدیدترین ساختار کربنی یعنی گرافین بحث کرده و دو روش سنتز آن را به طور مختصر توضیح دادیم.

در فصل دوم ابتدا مدل تنگ بست و سلول بسیط گرافین را معرفی کردیم، سپس به محاسبه بردارهای پایه‌ی شبکه‌ی مستقیم و وارون گرافین پرداختیم، و با توجه به این محاسبات منطقه‌ی اول بریلوئن را نشان دادیم و ساختار باند گرافین را محاسبه کردیم و در پایان نیز به طور اجمالی و مختصر پیرامون نقاط دیراک بحث کردیم. در فصل سوم تابع گرین را معرفی کردیم، و در ادامه با استفاده از تابع گرین دو زمانی معادله‌ی حرکت وابسته به تابع گرین را به دست آوردیم، در مرحله‌ی بعدی چگالی حالت‌ها‌ی شبکه‌ی مربعی و گرافین را در غیاب میدان مغناطیسی محاسبه کردیم و مطابق این محاسبات نمودار چگالی حالت بر حسب انرژی را با استفاده از نرم افزار Mat-Lab رسم کردیم و نشان دادیم که گرافین در غیاب میدان مغناطیسی خاصیت شبه فلزی از خود نشان می‌دهد.

در فصل چهارم پس از تعیین پیمان‌ه‌ی لاندائو و بحثی مختصر پیرامون ترازهای لاندائو به طور اجمالی چگالی حالت‌های شبکه‌ی مربعی و به طور خاص چگالی حالت‌های گرافین را درون میدان مغناطیسی مورد بررسی قرار دادیم.

و نشان دادیم که گرافین در حضور شار مغناطیسی $\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$ د سطح فرمی چگالی حالت صفر دارد و همچنان

خاصیت شبه فلزی خود را دارد ولی با اعمال شار مغناطیسی $\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{1}{8}$ دیگر گرافین خاصیت شبه فلزی از خود نشان

نمی‌دهد و تبدیل به فلز می‌شود.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	فصل اول: معرفی ساختارهای کربنی
۲	۱-۱ مقدمه
۳	۲-۱ کربن
۳	۳-۱ ساختارهای مختلف کربن
۱۳	فصل دوم: معرفی مدل تنگ بست و محاسبه ی ساختار نواری گرافین
۱۴	۱-۲ معرفی مدل تنگ بست
۱۵	۲-۲ سلول بسیط در گرافین
۱۶	۳-۲ محاسبه ی بردارهای پایه ی شبکه ی مستقیم و وارون در گرافین
۱۷	۴-۲ منطقه اول بریلون در گرافین
۱۸	۵-۲ روش تنگ بست برای یک جامد بلوری
۲۱	۶-۲ بررسی ساختار الکترونی پلی استیلن
۲۵	۷-۲ محاسبه ی ساختار باند گرافین در غیاب میدان مغناطیسی
۲۹	۸-۲ نقاط دیراک در گرافین
	فصل سوم: معرفی تابع گرین و محاسبه ی چگالی حالت های شبکه ی مربعی و گرافین بدون حضور میدان مغناطیسی
۳۱	مغناطیسی
۳۲	۱-۳ معرفی تابع گرین
۴۰	۲-۳ معادله ی حرکت وابسته به تابع گرین
۴۷	۳-۳ چگالی حالت شبکه مربعی در غیاب میدان مغناطیسی
۴۸	۴-۳ نمودار چگالی حالت برای شبکه مربعی در غیاب میدان مغناطیسی
۴۸	۵-۳ چگالی حالت گرافین در غیاب میدان مغناطیسی
۴۹	۶-۳ نمودار چگالی حالت ها برای گرافین در غیاب میدان مغناطیسی
۵۰	فصل چهارم: چگالی حالت شبکه ی مربعی و گرافین در میدان مغناطیسی
۵۱	۱-۴ ترازهای لانداو

صفحه	عنوان
۵۳	۲-۴ تقریب تنگ بست درون میدان مغناطیسی
۵۴	۳-۴ شبکه مربعی درون میدان مغناطیسی
۵۶	۴-۴ محاسبه ی چگالی حالت شبکه ی مربعی در حضور میدان مغناطیسی
۶۰	۵-۴ نمودار چگالی حالت شبکه ی مربعی در میدان مغناطیسی
۶۰	۶-۴ محاسبه ی چگالی حالت گرافین در در حضور میدان مغناطیسی $\left(\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{1}{2}, \frac{1}{4}\right)$
۸۶	۷-۴ محاسبه ی چگالی حالت گرافین در در حضور میدان مغناطیسی $\left(\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{1}{8}\right)$
۱۰۹	۸-۴ نمودار چگالی حالت گرافین در حضور میدان مغناطیسی $\left(\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{1}{8}\right)$
۱۱۰	نتیجه گیری
۱۱۳	منابع چکیده انگلیسی

فصل اول:

بررسی ساختارهای کربنی

۱-۱ مقدمه

فناوری نانو به عنوان یک فناوری کاربردی در دو دهه ی اخیر مورد توجه قرار گرفته است، که از همگرایی علوم فیزیک، شیمی و زیست به وجود آمده است. این فناوری توانایی کار در سطح اتم و ایجاد ساختارهایی که نظم مولکولی کاملاً جدیدی دارند را فراهم می آورد. ماده ی اصلاح شده در مقیاس نانو، خصوصیات جدید و مفیدی را دارا می گردد که قبلاً در آن مشاهده نمی شد. برای احساس اندازه ی نانو، قطر موی سر انسان را که یک دهم میلیمتر است در نظر بگیرید، یک نانو متر صد هزار مرتبه از آن کوچکتر است (10^{-9} متر).

امروزه از یک سو توانایی های سیلیکون به محدودیتهای خود رسیده و از سوی دیگر به طور هم زمان کشف گرافین با خواص منحصر به فرد خود در مقیاس نانو مسیر موجود برای تولید جایگزین های ممکن برای نسل جدید قطعات الکترونیکی سریعتر و کوچکتر در قرن ۲۱ را هموار کرده است. ویژگیهای جذاب گرافین، باعث شده است که اعتبارات و حامیان مالی فراوانی برای تحقیقات در این زمینه پیدا شود و ما شاهد افزایش نمایی در تعداد مقالات مرتبط با گرافین باشیم. پروفیسور ریچارد فاینمن، در جمله ی معروف، «فضای زیادی در سطوح پایین وجود دارد» آینده ی محتمل نانو را پیش بینی کرده بود؛ «من نمی توانم بینم که چه چیزی اتفاق می افتد، اما به جرأت می گویم هنگامی که ما بر روی آرایش اجزاء کنترل داشته باشیم به محدوده ی بسیار وسیع تری از خواص قابل پیش بینی اجزاء دست خواهیم یافت و کارهای مختلفی می توانیم انجام دهیم. او این جمله را در دسامبر ۱۹۵۹ بیان کرد: که ما شاهد کاش رویایی مقیاس اتمها و مولکولهای منفرد خواهیم بود. از آن زمان به بعد، تلاش های زیادی به منظور درک و بهره برداری از مواد در سطح اتمی با استفاده از خواص نانو مقیاس انجام گرفته است [۱ و ۲].

در این فصل ابتدا به معرفی کربن و انواع مختلف پیوندهایی را که این اتم در ساختارهای گوناگون از خود نشان می دهد می پردازیم و در ادامه یکی دیگر از ساختارهای عنصر کربن به نام گرافین، که از سال ۲۰۰۵ به بعد مورد توجه بسیار قرار گرفته است را معرفی می کنیم.

۲-۱ کربن

کربن یکی از معمولی ترین عناصر جهان است و در تمام کیهان می توان ردی از آن پیدا کرد. ششمین عنصر جدول تناوبی و اولین عنصر از گروه ۴ (IVA) است. کربن می تواند به صورت زنجیره های طولانی در آید که به آن زنجیری شدن می گویند که این فرایند منجر به تشکیل ترکیبات آلی گوناگون می شود. آرایش الکترونی لایه ی ظرفیت این عنصر $2s^2 2p^2$ است. کربن به طور مشخص یک نافلز است و بیشتر به صورت ترکیب در زغال سنگ، گاز طبیعی، کانیهای کربنات دار مانند سنگ آهک و همچنین در موجودات زنده گیاهی و حیوانی وجود دارد. کربن به حالت طبیعی در الماس و گرافیت یافت می شود کربن نسبتا کم اثر بوده به طوریکه در طبیعت به حالت آزاد بسیار فراوان است

۳-۱ ساختارهای مختلف کربنی

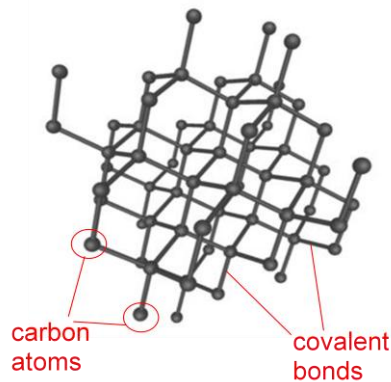
کربن یک عنصر ۴ ظرفیتی است که در دسته بندی علم نانو دارای ۴ آلوتروپ می باشد. در تمامی این آلوتروپها اتمهای کربن به طور منظم و در هر یک به طور خاص و ویژه کنار هم قرار گرفته اند. در هر چهار حالت گفته شده اتمهای کربن با به اشتراک گذاشتن الکترونها، پیوندهای کووالانسی تشکیل می دهند. برای تشکیل این پیوندهای کووالانسی اوربیتالهای $2s^2 2p^2$ طوری باید تغییر کنند که بیش از دو الکترون والانس (ظرفیت) قابل دسترسی باشد؛ تغییر در آرایش الکترونی به وسیله فرایندی به نام هیبریداسیون (همپوشانی یا ترکیب) صورت می گیرد. در فرایند هیبریداسیون، آرایش الکترونی در پوسته L و در حالت پایه تغییر می کند. یکی از الکترونهای اربیتال $2s$ با اوربیتال $2p$ همپوشانی می یابد و ترکیبی از اوربیتالهای $2s$ و $2p$ ایجاد می شود. این فرایند همپوشانی تعداد الکترونهای والانس را دو برابر می کند؛ یعنی از ۲ به ۴ افزایش می یابد.

اوربیتالهای هیبریدی ممکن است پیوندهای سیگما (σ) یا پیوندهای پی (π) را باعث شوند. اگر در فرایند هیبریداسیون، اوربیتالها همپوشانی محوری داشته باشند پیوند (σ) را باعث می شوند و اگر اوربیتالها همپوشانی جانبی داشته باشند پیوند (π) را ایجاد می کنند، هنگامی که دو اوربیتال p همپوشانی جانبی با یکدیگر داشته باشند پیوند (π) ایجاد می شود.

در پیوند (σ) در فضای بین دو اتم بیشترین چگالی بار وجود دارد و در پیوند (π) در اطراف یعنی بالا و پایین یا چپ و راست محور اتصال دو هسته به هم، چگالی بار ماکزیمم است. چگونگی شکل گیری اوربیتالهای sp مسئول ساختارهای پیوندی گرافیت، الماس، فلورن و کربن نانوتیوب هستند که در ادامه به بررسی آنها می پردازیم :

کربن در طبیعت به دو صورت الماس و گرافیت یافت می شود. الماس جسمی شفاف، سخت و شکننده است. الماس یک جامد کووالانسی می باشد، هر اتم کربن در بلور الماس چهار الکترون لایه ی ظرفیت خود را با چهار اتم کربن دیگر در پیوندهای کووالانسی یگانه به اشتراک می گذارد و می توان گفت که هر

اتم کربن برای تشکیل پیوند از اوربیتالهای هیبریدی sp^3 استفاده می کند، به این صورت که در هر اتم کربن یک اوربیتال $2s$ با ۳ اوربیتال $2p$ برای تشکیل ۴ اوربیتال هیبریدی sp^3 با هم همپوشانی می کنند. ۴ اوربیتال هیبریدی هر اتم کربن با ۴ اوربیتال هیبریدی از اتم کربن مجاور خود ترکیب شده و تشکیل یک ساختار ۴ وجهی را می دهند به طوریکه زاویه ی بین هر کدام از پیوندها 109.5° است. پیوندهای C-C در الماس به صورت پیوندهای کووالانسی از نوع σ می باشد که قویترین نوع پیوند است (شکل ۱-۱) [۳و۴].



شکل ۱-۱: نمایی از پیوندهای کووالانسی در ساختار سه بعدی الماس

گرافیت یکی دیگر از آلوتروپهای کربن است. یک رسانای الکتریکی و یک شبه فلز محسوب می شود، در نتیجه در مواردی مانند الکترودهای لامپی قوسی که در شیمی تجزیه برای تجزیه های الکتریکی، مورد استفاده قرار می گیرد. گرافیت از کربنی که در شرایط استاندارد قرار دارد، مقاوم تر است بنابراین در علم الکترو شیمی به عنوان حالت استاندارد برای تعریف گرمای تشکیل ترکیبات کربنی مورد استفاده قرار می گیرد.

سه نوع اصلی از گرافیت طبیعی وجود دارد که هر یک از این پدیده ها در یک حالت خاصی از رسوب کانی انجام می شود:

۱- گرافیت متبلور فلس مانند، که به صورت ذرات مسطح و ورقه ای جدا از هم تشکیل می شوند، اگر نشکنند دارای لبه های هگزاگونال هستند و اگر بشکنند زاویه دار و نامنظم می شوند (شکل ۱-۲).



شکل ۱-۲. نمایی از گرافیت متبلور فلس

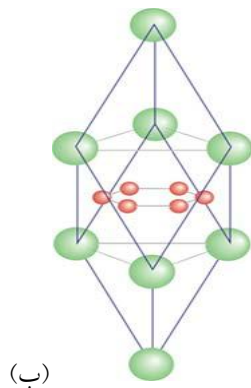
۲- گرافیت بی شکل به صورت ذرات ظریفی هستند که نتیجه ی دگرذیسی گرمایی زغال در آخرین مرحله ی تشکیل زغال می باشد.

۳- گرافیت لامپ^۱ که کرافیت رگه دار هم نامیده می شود.

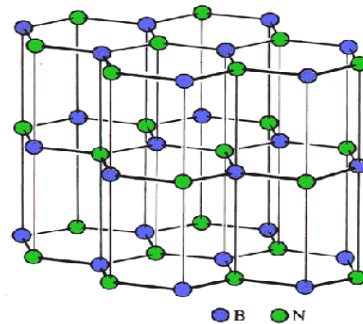
گرافیت ساختاری صفحه ای و لایه لایه دارد. در هر لایه، اتمهای کربن در یک شبکه ی شش گوش منظم شده اند به طوریکه فاصله ی بین اتمهای کربن $1/42\text{nm}$ است و فاصله ی بین لایه ها $0/335\text{nm}$ می باشد [۵].

دو شکل شناخته شده از گرافیت، آلفا و بتا هستند. گرافیت نوع آلفا دارای ساختار شش گوش^۲ و گرافیت نوع بتا دریک شبکه ی لوزی الوجه^۳ است (شکل ۱-۳) که دارای ویژگیهای فیزیکی مشابهی هستند (بجز اینکه دسته لایه های گرافین آنها اندکی متفاوتند بعبارتی انباشتگی یا فشردگی لایه ها متفاوت است). گرافیت نوع آلفا ممکن است خمیده یا مسطح باشد [۶].

ساختار آلفا از طریق یک روش مکانیکی به گرافیت نوع بتا تبدیل می شود و اگر گرافیت نوع بتا را تا دمای 1300 درجه سانتی گراد حرارت دهیم به گرافیت نوع آلفا تبدیل می شود [۷].



(ب)



(الف)

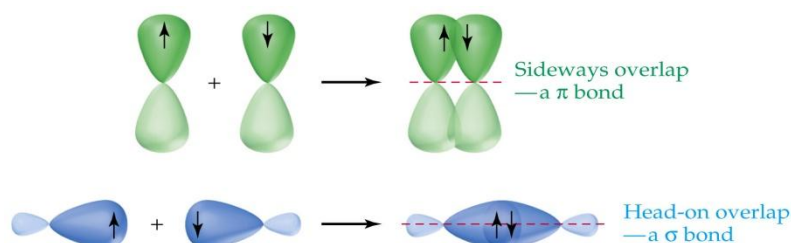
شکل ۱-۳: نمایی از (الف) گرافیت نوع آلفا با ساختار شش گوش (ب) گرافیت نوع بتا با ساختار لوزی الوجه

گرافیت دارای هیبریداسیون sp^3 است به این صورت که یک اوربیتال کروی s با دو اوربیتال دمبلی p_x و p_y با هم همپوشانی دارند و ۳ اوربیتال هیبریدی sp^2 را تشکیل می دهند و یک اوربیتال pz عمود بر آنها باقی می ماند. ۳ الکترون خارجی هر اتم کربن، ۳ اوربیتال هیبریدی sp^2 را اشغال می کنند تا ۳ پیوند محکم سیگما تشکیل شود. الکترون موجود در اوربیتال p_z نیز می تواند آزادانه بین صفحات گرافیتی حرکت کند که پیوند ضعیف پای بین صفحات گرافیتی را سبب می شود (شکل ۱-۴).

^۱ lump

^۲ hexagonal

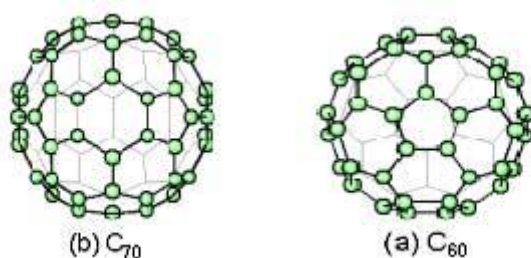
^۳ rhombohedral



شکل ۱-۴. (بالایی) همپوشانی ضعیف اوربیتالهای p_z و تشکیل پیوند پای (پایینی) همپوشانی محکم اوربیتال هیبریدی sp^2 و تشکیل پیوند سیگما

سومین آلوتروپ کربن که در اینجا مورد بررسی قرار می گیرد فولرن است. پایه ی فولرین ها صفحات موجود در گرافیت می باشد با این تفاوت که در ساختار اتمی فولرین ها به جای شش ضلعی های منظم موجود در صفحات گرافیت، یک سری شش ضلعی و پنج ضلعی منظم وجود دارد که به صورت یک در میان در کنار هم قرار گرفته و کره فولرن را تشکیل داده اند. قرارگیری این پنج ضلعی و شش ضلعی ها در کنار هم برای شکل دادن یک ساختار کروی ضروری است. در حقیقت بدون حضور پنج ضلعی ها در ساختار گرافین نمی توان از صفحات گرافین ساختارهای کروی به دست آورد.

در سال ۱۹۶۶ دانشمندی به نام دالس برای اولین بار در مورد توانایی تولید ساختارهای کروی بسته ای از اتم های کربن بحث نمود. در ابتدا این پیشنهاد مورد توجه دانشمندان وقت قرار نگرفت. چهار سال بعد در سال ۱۹۷۰ دانشمندی به نام اوساوا در تحقیقاتش راجع به ساختارهای کربنی موجود در طبیعت، یک مولکول کربنی C_{60} را با ساختاری شبیه توپ فوتبال متصور شد. تا این که در سال ۱۹۸۴ در اثر تبخیر لیزری گرافیت، خوشه های بزرگ کربنی C_n ، در آزمایشگاه مشاهده شد (n مقداری بین ۳۰ تا ۹۰ دارد) (شکل ۱-۵).



شکل ۱-۵: نمایی از انواعی از فولرن

کشف اصلی فولرن در سال ۱۹۸۵ رخ داد. در این سال سه دانشمند به نام های کروتو، اسمالی و کارل بر روی فرایندی برای تولید کلاسترهای کربنی ستاره ای شکل مطالعه می کردند. این روش به وسیله متمرکز کردن لیزر روی یک گرافیت انجام شد. بعد از انجام این آزمایش ها و طی انجام یک سری آزمایش های طیف سنجی روی محصولات تولید شده، مولکول های C_{60} در مواد تولید شده کشف شدند. این مولکول به علت شباهتی که با ساختار توصیف شده توسط معمار معروف، باک مینستر فولر داشت، به این اسم نامیده شد. دانشمندان مذکور به خاطر این کشف در سال ۱۹۹۶ جایزه نوبل سال را دریافت نمودند .

شکل زیبا و بی سابقه فولرن ها و خواص شگفت انگیز این مولکول ها توجه بسیاری از دانشمندان را به خود معطوف کرده است. پایدارترین و فراوان ترین فولرن ها انواع C_6 و C_{70} هستند. بنابراین بیشتر خواص ذکر شده در مورد فولرن ها نیز روی این دو نوع متمرکز شده است [۸ و ۹ و ۱۰].

یکی دیگر از آلوتروپهای کربن نانو لوله های کربنی است. نانولوله های کربنی که از صفحات کربن به ضخامت یک اتم و به شکل استوانه ای توخالی ساخته شده است برای نخستین بار در سال ۱۹۹۱ توسط سامیو ایجیما^۴ کشف شد [۱۱].

خواص ویژه و منحصر به فرد آن از جمله مدول یانگ بالا و استحکام کششی خوب از یک طرف و طبیعت کربنی بودن نانولوله ها (به خاطر این که کربن ماده ای است کم وزن، بسیار پایدار و ساده جهت انجام فرایندها که نسبت به فلزات برای تولید ارزان تر می باشد) باعث شده که در دهه گذشته شاهد تحقیقات مهمی در کارایی و پرباری روش های رشد نانولوله ها باشد. کارهای نظری و عملی زیادی نیز بر روی ساختار اتمی و ساختارهای الکترونی نانولوله متمرکز شده است. کوشش های گسترده ای نیز برای رسیدگی به خواص مکانیکی شامل مدول یانگ و استحکام کششی و ساز و کار عیوب و اثر تغییر شکل نانولوله ها بر خواص الکتریکی صورت گرفته است. می توان گفت این علاقه ویژه به نانو لوله ها از ساختار و ویژگی های بی نظیر آن ها سرچشمه می گیرد.

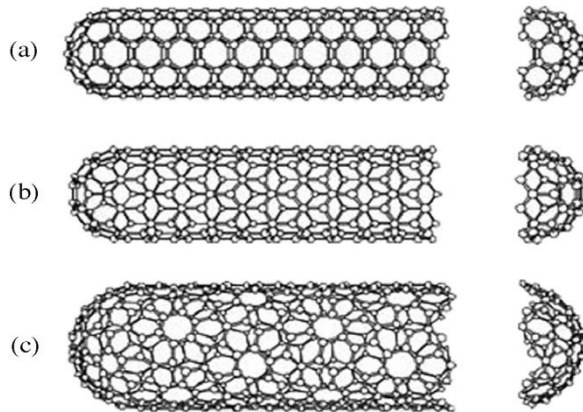
نانولوله های کربنی یکی از پرکاربردترین نانو ساختارهای شناخته شده در دنیای امروز هستند. نانو لوله به دو صورت تک دیواره (مثل یک لوله یا استوانه) و یا چند دیواره (شبه حالتی که چند ورق کاغذ را لوله کرده و در هم قرار دهیم) یافت می شود. پیش از آنکه وارد مبحث کاربرد نانولوله های کربنی شوم بد نیست اشاره ای به برخی خواص منحصر به فرد آنها داشته باشیم [۱۲]:

۱. قطر: ۳۰-۲ نانومتر
 ۲. طول: از چند تا ۱۰۰ میکرون
 ۳. هدایت الکتریکی: توانایی عبور ۱ میلیارد آمپر بر سانتی متر مربع (حدود ۱۰۰۰ برابر مس)
 ۴. هدایت گرمایی: ۲ برابر الماس به عنوان هادی ترین عنصر پیش از ساخت نانولوله های کربنی.
 ۵. استحکام کششی: ۴۵ میلیارد پاسکال یعنی حدود ۲۳ برابر مستحکم ترین فولادها.
 ۶. سفتی یا مقاومت در برابر خم شدن: ۱/۸ تا ۱/۲۸ تراپاسکال یعنی حدود ۱۰ برابر فولاد.
- به این مجموعه باید نسبت ابعادی بالا (طول به قطر) و نیز سطح ویژه ی بسیار زیاد را نیز اضافه نمود.
- با کمی تفاوت خواص ذکر شده تمامی نانولوله های کربنی را در بر می گیرند ولی باید توجه داشت که در رابطه با بخش عمده ای از این خواص، شامل هدایت حرارتی و الکتریکی و نیز استحکام کششی، سهم

^۴ Sumio Iijima

نانولوله های کربنی تک دیواره به مراتب بیشتر است. نوع نانولوله های کربنی به طور دقیق به چگونگی پیچش آنها بستگی دارد [۱۳].

نانولوله ها به دو دسته تک جداره^۵ و چند جداره^۶ تقسیم می شوند. نانو لوله های تک جداره نیز بر حسب آرایش اتم های کربنی مقطع لوله به سه دسته مهم تقسیم می شوند، نانو لوله های آرمچیر^۷ که دارای خاصیت فلزی هستند و نانو لوله های کایرال^۸ و نانو لوله های زیگزاگ^۹ که هم خاصیت نیمه رسانایی و هم خاصیت فلزی دارند. (شکل ۱-۶) [۱۴].



شکل ۱-۶: نانو لوله ی نوع (a) صندلی (b) زیگزاگ (c) کایرال

نانولوله های کربنی تک جداره فقط از کربن و یک ساختار ساده (ورقه ای از شش ضلعی های منظم) تشکیل شده اند. برخی پیش بینی ها حاکی از آن است که تک جداره ها می توانند رسانا یا نیمه رسانا باشند. این هدایت الکتریکی بالا بستگی به هندسه دقیق اتم های کربن دارد. از آغاز کار روی تک جداره ها از آن ها به عنوان یک پدیده تک بعدی نام برده می شد تا این که این نظریه مرحله به مرحله پیشرفت کرد. علت علاقه به این نانولوله های تک جداره و تلاش برای جایگزین کردن آن ها در صنعت، بر اساس محاسبات نظری و تأثیرات آزمایشگاهی، بر خصوصیات عالی مکانیکی و رسانایی الکتریکی آن ها مانند فلزات می باشد. البته تولید نانو لوله های تک جداره دارای هزینه بالایی است و تولید به همراه پایدار کردن خصوصیات آن ها در حین فراوری پلیمر- نانولوله مشکل می باشد. هر چند نانولوله هایی که با استفاده از تکنیک لانگهوری- بلاجت که شامل حرکاتی افقی و عمودی شبیه نقاشی سنتی ژاپن می باشد تولید شده اند، علاوه بر این که ثابت نگه داشته می شوند- توسط ژلاتین و تشکیل نانورل کربنی- از لحاظ نوری نیز یکدست و همگن و از لحاظ ساختاری قابل کنترل می باشند.

بر عکس در دسترس بودن و تجاری بودن نانولوله های کربنی چند جداره باعث شده که پیشرفت های

^۵ SWNT
^۶ MWNT
^۷ Armchair
^۸ chiral
^۹ Zigzag

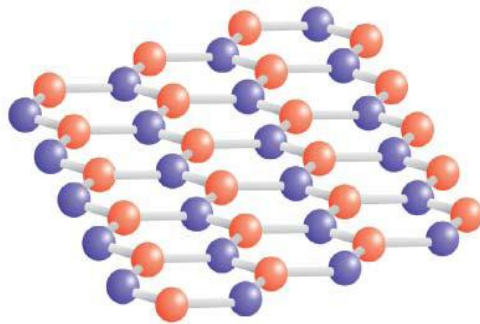
بیشتری در این زمینه داشته باشیم تا حدی که محصولات در آستانه تجاری شدن تولید شده است. به عنوان مثال از نانولوله‌های کربنی چند جداره (جایگزین کربن بلک^۱) در پودرهای رنگ استفاده شده است. یکی از معایب نانولوله‌های چند جداره نسبت به تک جداره این است که استحکام‌دهی آن‌ها کمتر می‌باشد زیرا پیوندهای صفحات داخلی ضعیف می‌باشند. اما از آنجا که در حال حاضر کاربردهای نانولوله‌ها در تقویت پلیمرها باعث بهبود خواص گرمایی و الکتریکی می‌شود تا بهبود خواص مکانیکی، کاربرد نانولوله‌های کربنی چند جداره بسیار زیاد می‌باشد. از طرفی تکنیک‌های موجود نیز برای تولید نانولوله‌های تک جداره به اندازه کافی بازدهی ندارد و خلوص لازم را نیز به همراه نمی‌آورد. تخلیص این مواد بسیار زحمت‌آور است و در نهایت ممکن است به ساختار نانولوله صدمه نیز بزند.

نزدیک به هفتاد سال پیش دو فیزیک دان معروف به نام های لاندائو و پائیرلز [۱۵ و ۱۶] استدلال کردند که شبکه اکیداً دو بعدی به لحاظ ترمودینامیکی ناپایدار است و نمی‌تواند وجود داشته باشد. نظریه آنها به این نکته اشاره داشت که سهم افت و خیزهای گرمایی در بلور با ابعاد کم، هم مرتبه و قابل مقایسه با فاصله اتمی ذرات در نقاط شبکه ای است. این بحث سپس توسط مرمن توسعه داده شد که به موجب آن قضیه ی مرمن-ویگنر [۱۷] بیان می‌کند که نظم بلند برد در سیستمهای دو بعدی نباید وجود داشته باشد. پس جابجایی ساختاری در سیستم بلوری دو بعدی در هر دمای محدودی ظاهر خواهد شد. توصیف استاندارد [۱۸] از نوسانات اتمی، بیان می‌کند که دامنه ی نوسانات اتمی u حول جایگاه تعادلشان خیلی کوچکتر از فواصل بین اتمی، d ، است. در غیر این صورت بلور بر طبق معیار تجربی لیند من ذوب می‌شود (در نقطه ی ذوب $u = 0.1d$).

تا این که در سال ۲۰۰۴ میلادی گرافین دو بعدی پایدار در آزمایشگاه گروه Geim ساخته شد [۱۹ و ۲۰]. چنین لایه دو بعدی نه تنها پیوسته است بلکه یک بلور با کیفیت بالا است، به طوری که حاملهای بار می‌توانند بدون پراکندگی مسافت حدود هزار فاصله بین اتمی را پیمایند. به عبارتی تحریک پذیری حامل‌ها بالاست. چنین ساختار بلوری دو بعدی با حذف ملایم بعد سوم به دست آمده است و شدیداً پایدار است.

به عبارتی شکل دو بعدی کربن، گرافین نامیده می‌شود و ممکن است بهترین آلوتروپ قابل مطالعه ی کربن از لحاظ نظری باشد! گرافین، صفحه ای مسطح از شش گوش‌هایی با اتم‌های کربن است (شکل ۱-۷). یعنی همان جایی که محاسبات روی گرافیت، نانولوله‌های کربنی و فولرین‌ها آنجا آغاز می‌شود [۲۱].

^۱ Carbon-black



شکل ۱-۷: ساختار بلور شناسی گرافین اتم های مربوط به زیر شبکه های متفاوت (A,B) با رنگهای متفاوت مشخص شده اند. امروزه از آنجا که توانایی های سیلیکون به محدودیتهای خود رسیده و از سوی دیگر، به طور هم زمان کشف گرافین با خواص منحصر به فرد خود در مقیاس نانو، مسیر موجود برای تولید جایگزین های ممکن برای نسل جدید قطعات الکترونیکی سریعتر و کوچکتر در قرن ۲۱ را هموار کرده است.

در سال ۲۰۰۴، یک گروه فیزیکدان دانشگاه منچستر انگلستان، که توسط آندره گیم^{۱۱} و کنستانتین نووسلوف^{۱۲} سرپرستی می شدند برای نخستین بار نشان دادند که کربن در این شکل مسطح خاص، ویژگیهای بسیار متفاوتی دارد که ریشه در دنیای فیزیک کوانتوم دارد آنها به کمک شیوه ای کاملاً متفاوت و طبیعی گرافین را ساختند و تحولی در بررسی های مربوط به کربن به وجود آوردند. آنها از گرافیت سه بعدی شروع کردند و ورقه ای تک لایه (یک لایه اتمی) را با روشی که شکاف میکرومکانیکی نامیده می شود، استخراج کردند [۱۹ و ۲۰].

امروزه فیزیکدانان می توانند با استفاده از گرافین، طبقه ی تازه ای از مواد ۲ بعدی را که دارای ویژگی های خاص خود هستند، مطالعه کنند. گرافین مطالعاتی را ممکن کرده که پیچیدگی های تازه ای را در دنیای پدیده های فیزیک کوانتوم پدیدار می کنند. همچنین کاربردهای عملی تازه و بسیار متنوعی بعد از کشف گرافین به راه افتاده، مانند ساخت مواد جدید و تولید ابزار الکترونیکی کاملاً نو و ابتکاری، پیش بینی می شود که ترانزیستورهای گرافینی بسیار سریعتر از ترانزیستورهای سیلیکونی عمل کنند و این یعنی ظهور رایانه هایی با کارآمدی بسیار بالاتر.

از آنجایی که گرافین واقعاً شفاف است و رسانایی خوبی هم دارد، می تواند برای ساخت نمایشگرهای لمسی شفاف، صفحه های نوری و شاید حتی صفحه های خورشیدی به کار آید. وقتی گرافین با پلاستیک ترکیب شود، می تواند آن را به رسانای الکتریکی تبدیل کند و در حالی که مقاومتش در برابر گرما بالاتر می رود، از نظر مکانیکی قویتر هم شود. از این مقاومت می توان در مواد جدید فوق

^{۱۱} Andree Geim

^{۱۲} Konstantin Novoselov

قوی استفاده کرد که هم ظریف هستند و هم الاستیک؛ هم انعطاف پذیرند و هم از سبکی فوق العاده ای بهره می برند. در آینده، ماهوارها، هواپیماها و خودروها را می توان از این مواد ترکیبی جدید ساخت.

از جمله خواص فیزیکی که گرافین نشان می دهد و قبلاً در مقیاس نانو مشاهده نشده بود عبارت اند از: مدول یانگ بالا (حدود ۱۱۰۰ گیگاپاسکال)، مقاومت مکانیکی بالا در برابر شکست (۱۲۵ گیگاپاسکال)، رسانایی حرارتی خوب (حدود ۵۰۰۰ W/mK) تحرک پذیری بالای حاملان بار یا به عبارت دیگر رسانایی الکتریکی بالا (۲۰۰۰۰۰ Vs/cm)، مساحت سطحی ویژه ی بالا (مقدار محاسبه شده: ۲۶۳۰ متر مربع بر گرم)، و پدیده های انتقالی شگفت انگیزی همچون اثر کوانتومی هال [۲۲ و ۲۳].

گرافین از نقطه نظر الکتریکی یک ماده قابل ملاحظه است. به دلیل سختی و ویژه بودن پیوندهای σ در یک صفحه ی گرافینی، جایگزین شدن اتمهای شبکه لانه زنبوری به وسیله اتمهای خارجی بسیار مشکل است. این یکی از دلایلی است که باعث می شود مسافت آزاد میانگین الکترونی در گرافین زیاد باشد و به حدود $1\mu\text{m}$ در نمونه های موجود نیز می رسد. همان طور که قبلاً بیان شد گرافین با استفاده از فرآیند لایه برداری مکانیکی از گرافیت تولید شد [۲۴]. این روش قابلیت تولید نمونه های اندک با کیفیت بالا را برای مطالعات بنیادی دارد.

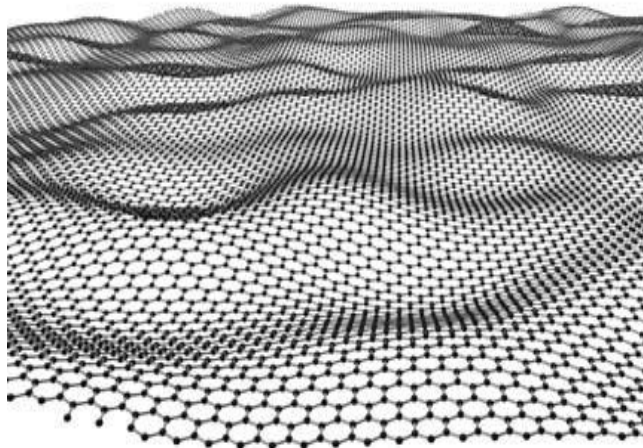
در اینجا دو روش برای سنتز صفحات گرافین معرفی می شود:

۱) لایه برداری مکانیکی از گرافیت

۲) رشد گرافین روی سطح بلور کاربید سیلیکون [۲۵].

هزینه، عملکرد، اندازه صفحات، کیفیت صفحات، اصلاح شیمیایی و سازگاری با فرآیندهای تجاری تولید تراشه مهمترین نکاتی هستند که در انتخاب روش سنتز گرافین باید به آن توجه شود. روش لایه برداری مکانیکی از گرافیت: با استفاده از نوار چسب های معمولی ابتدا توده ای از گرافیت را از هم جدا می کنند، با تکرار این فرآیند لایه ی بسیار نازکی از گرافیت به دست می آید [۲۴]. با قرار دادن آن روی پایه ی سیلیکونی امکان آشکار سازی گرافین به این صورت فراهم می شود که پایه ی سیلیکونی تمامی رنگهای موجود در طیف تابشی را منعکس می کند و با توجه به اینکه تک لایه های گرافیت طیف نوری خاصی را در مقایسه با توده های زیاد گرافیتی به نمایش می گذارند، می توان با استفاده از میکروسکوپ نوری به مشاهده ی گرافین پرداخت که البته این مشاهده به دشواری امکان پذیر است. رشد گرافین روی سطح بلور کاربید سیلیکون: می توان گرافین را روی سطحی از سیلیکن کاربید رشد داد، با گرم کردن SiC تا دمای 1300°C درجه سانتیگراد

سیلیکن از روی لایه ای زیرین جدا می شود و لایه های اندکی از گرافین روی سطح باقی می ماند، تعداد این لایه های گرافین را با محدود کردن زمان یا حرارت می توان کنترل کرد. کیفیت و تعداد لایه های به دست آمده در این نمونه ها به Si بستگی دارد که برای رشد گرافین به کار می رود. برای مثال گرافین رشد داده شده روی Ru لبه های زیگزاگ دارد البته مثل نمونه اصلی گرافین دارای موج است. (شکل ۵-۱) [۲۶].



(شکل ۵-۱) نمایی از سطح موج دار گرافین