





دانشگاه کاشان  
دانشکده فیزیک  
گروه حالت جامد

## پایان نامه

جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد  
در رشته فیزیک حالت جامد

عنوان:

# اثر میدان الکتریکی بر خواص الکترونی و مغناطیسی نانودیسک‌ها و نانوحلقه‌های گرافینی

استاد راهنما :

دکتر روح اله فرقدان

توسط :

مرضیه فرکیان

شهریور ماه ۱۳۹۳

این پیام نامه که حاصل چندین ماه تلاش من است، تقدیم به:

روح پاک پدرم

کیمیای که به من آموخت چگونه رویاها را تحقق بخشم،

ومادرم

فرشته‌ای که عشق، این عطیه برتر را به من هدیه کرد.

## مشکر و قدردانی

حمد و سپاس بی کران پروردگاریکتارا که هستی مان بخشید، به طریق دانش ر، نمودمان کرد، به بهنشین رهروان علم متفکرمان نمود و خوشه چینی از علم و معرفت را روزی مان ساخت.

به مصداق «من لم یسکر المخلوق لم یسکر الخالق» بس شایسته است از استاد فریخته و ارجمند جناب آقای دکتر روح اله فردان که با ایده ها و راهبانی های ارزشمندشان بنده را در پیشبرد این پایان نامه یاری کردند، قدردانی نمایم. اشتیاق و دلسوزی های ایشان در امر آموزش، علاقه به کرایش حالت جلد و همچنین انگیزه های ادامه ای تحصیل را در من دوچندان نمود. سلامتی، سعادت و موفقیت روز افزون ایشان را از دگاه خداوند منان خواستارم.

و نیز از آقایان دکتر بهرام خوشنویسان و دکتر ابراهیم حیدری سمیری، به عنوان اساتید داور داخلی که زحمت بازخوانی، داوری و شرکت در جلسه دفاعیه را متحمل گردیدند ممنون و سپاس گزارم.

در پایان از جناب آقای دکتر بهرام خوشنویسان که به عنوان نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه قبول زحمت نموده اند، سپاس -

کزاری می نمایم.

## چکیده

در این پایان‌نامه ما به بررسی تاثیر میدان الکتریکی بر کنترل خواص الکترونی، مغناطیسی نانوحلقه‌ها و نانودیسک‌های گرافینی به منظور استفاده در نانوترانزیستورهای وابسته به اسپین می‌پردازیم. با توجه به تنگ بست قوی تک‌نواری و مدل میدان متوسط هابارد، از حل معادله پواسن به منظور در نظر گرفتن اثر میدان الکتریکی (پتانسیل در هر جایگاه اتمی) استفاده کردیم. با در نظر گرفتن میدان‌های الکتریکی متفاوت، خواص الکترونی و مغناطیسی نانو ساختارهای مختلف را به منظور استفاده در کانال نانوترانزیستورهای مغناطیسی و طراحی مناسب برای آنها، مورد بررسی قرار می‌دهیم. خواص الکترونی و مغناطیسی ترکیبات پایه کربنی به شدت از هندسه‌ی این ساختارها تاثیر می‌گیرد. لذا ما به بررسی نانودیسک‌های گرافینی تک-لایه با هندسه‌های مستطیلی، شش ضلعی، مثلثی، نانودیسک گرافینی دولایه‌ی مستطیلی و نانوحلقه‌های گرافینی با هندسه‌های شش ضلعی، مثلثی و دایره‌ای با لبه‌های زیگزاگ و آرمچیر می‌پردازیم. اهمیت خواص ویژه‌ی نانوحلقه‌های گرافینی در کوانتش شار آهارانوف-بوهم، ما بر آن داشت تا تمرکز خود را روی خواص الکترونی اثرات تداخلی آهارانوف-بوهم در حضور میدان الکتریکی معطوف کنیم. نتایج نشان می‌دهد که اعمال میدان الکتریکی عرضی حتی در بخش کوچکی از حلقه شش ضلعی، گشتاور مغناطیسی را در تمام اتم‌های لبه زیگزاگ، بصورت متقارن کاهش می‌دهد. بعلاوه حالت‌های اسپینی و الکترونی در ساختارهای نانوحلقه‌ها را می‌توان با استفاده از یک میدان الکتریکی دستکاری کرد. با تغییرات شدت میدان الکتریکی که ناشی از وابستگی چگالی‌های اسپین به شکل‌ها و لبه‌های این نوع از نانوحلقه‌هاست، رفتار واقعبیندگی اسپینی متفاوتی مشاهده شد. در مورد حلقه‌های کوانتومی مثلثی، مغناطش بر روی لبه‌های داخلی و خارجی می‌تواند بصورت انتخابی تنظیم و واقعبیندگی حالت‌های اسپینی به تدریج به اندازه شدت میدان افزایش یابد در حالی که در مورد نانوحلقه‌های شش ضلعی، میدان الکتریکی عرضی گشتاورهای مغناطیسی در هر دو لبه داخلی و خارجی را بصورت متقارن و به سرعت کاهش می‌دهد. هم‌چنین، در نانودیسک‌های گرافینی مستطیلی دولایه جالب توجه است که با افزایش شدت میدان، گاف اسپینی بین دو شاخه اسپینی بطور متفاوت تنظیم می‌شود، اما مغناطش خالص صفر باقی می‌ماند. هم‌چنین برآورد شده است که، میدان الکتریکی عمود، گشتاورهای مغناطیسی را در هر لایه بصورت نامتقارن و متفاوت کاهش می‌دهد. علاوه بر این، نوسانات آهارانوف-بوهم در انواع نانوحلقه‌ها، متاثر از میدان الکتریکی به ویژه نزدیک انرژی فرمی بوده و از این رو کاهش دامنه نوسانات در ساختار نانوحلقه‌ها دیده می‌شود. بطور خلاصه، با انتخاب نحوه‌ای مناسب برای اعمال میدان الکتریکی و تنظیم شدت آن می‌توان خواص مغناطیسی و الکترونی را در نانودیسک‌ها و نانوحلقه‌های گرافینی کنترل نمود.

### کلمات کلیدی:

۱. میدان الکتریکی عرضی
۲. نانو حلقه‌های کوانتومی گرافینی
۳. نانو دیسک‌های کوانتومی گرافینی
۴. لبه‌ی مغناطیسی
۵. برهمکنش الکترون-الکترون
۶. اثر آهارانوف-بوهم.

## فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول: مقدمه ای بر ساختارهای گرافینی و مبانی نظری پژوهش	۱
۱-۱ مقدمه	۱
۲-۱ شرحی مختصر بر اسپینترونیک	۲
۳-۱ ساختار گرافین	۳
۱-۳-۱ ساختار گرافینی تک لایه	۳
۲-۳-۱ ساختار هندسی گرافین دولایه	۶
۳-۳-۱ نانونوار گرافینی	۸
۴-۳-۱ دیسک گرافینی	۸
۵-۳-۱ حلقه های گرافینی	۱۰
۴-۱ اهمیت بررسی اثر میدان الکتریکی	۱۶
۱-۴-۱ ترانزیستورهای گرافینی	۱۶
۲-۴-۱ نمودار تراز انرژی	۱۹
۳-۴-۱ تابع فرمی	۲۰
۵-۱ اثر استتار	۲۲
۶-۱ اثر اشتارک	۲۳
۷-۱ اثر زیمان	۲۳
۱-۷-۱ اثر بهنجار زیمان ( $s=0$ )	۲۳
۲-۷-۱ اثر نابهنجار زیمان	۲۴
۸-۱ کوانتش شار و اثر آهارانوف-بوهم	۲۵
فصل دوم: مروری بر تحقیقات انجام شده در زمینه ی ساختارهای گرافینی تک لایه، دولایه و اثر آهارانوف-بوهم	۲۹
۱-۲ ساختارهای تک لایه	۲۹

۲۹.....	۱-۱-۲	اثر میدان الکتریکی در فیلم های کربنی نازک اتمی
۳۲.....	۲-۱-۲	اثر میدان الکتریکی بر ترابرد اسپین قطبیده در نانو نوارهای گرافینی
۳۳.....	۳-۱-۲	خاصیت نیم فلزی در نانونوارهای گرافینی با اعمال میدان الکتریکی
۳۴.....	۴-۱-۲	قطبیدگی اسپین در دیسک های گرافینی تحت اثر میدان الکتریکی القایی
۳۶.....	۵-۱-۲	کنترل خطی الکتریکی ساختار الکترونی دیسک های کوانتومی گرافینی
۳۹.....	۶-۱-۲	قطبیدگی اسپینی کنترل شده با میدان الکتریکی در حلقه ی کوانتومی گرافینی
.....	مثلی	۳۹.....
.....	۲-۲	ساختارهای گرافینی دولایه.....
.....	۱-۲-۲	ساختارهای الکترونیکی و اثرات میدان الکتریکی عرضی بر نانونوارهای
.....	گرافینی	تاخوردده با لبه های زیگزاگ.....
.....	۲-۲-۲	گاف انرژی، مغناطش و اثرات میدان الکتریکی روی نانونوارهای گرافینی
.....	دولایه	.....
.....	۳-۲-۲	اسپین کنترل شده با میدان الکتریکی در دیسک های گرافینی مثلثی دولایه
.....	۳-۲	آهارانوف-بوهم.....
.....	۱-۳-۲	اثر آهارانوف-بوهم در حلقه های کوانتومی پر الکترون.....
.....	۲-۳-۲	همبستگی الکترونیکی و اسپینی در حلقه های کوانتومی گرافینی گیت شده ..
.....	.....	.....
.....	۳-۳-۲	الگوهای نوسانات آهارانوف-بوهم در نانوحلقه های گرافینی.....
.....	۴-۳-۲	بررسی اثر آهارانوف-بوهم در حلقه ی گرافینی گیت شده.....
.....	۵-۳-۲	حالت های لبه ی مغناطیسی در حلقه های گرافینی تحت اثر آهارانوف-
.....	بوهم	.....
.....	فصل سوم: روش انجام محاسبات (مدلهای هامیلتونی)	.....
.....	۱-۳	هامیلتونی تنگ بست.....
.....	۲-۳	مدل هابارد.....

۳-۳	حل معادله ی پواسن.....	۶۲
۳-۳-۱	روش تفاضل محدود.....	۶۲
۳-۴	تابع گرین.....	۶۳
۳-۴-۱	تابع گرین تک ذره ای.....	۶۳
۳-۵	معرفی هامیلتونی کلی ساختارهای گرافینی مورد بررسی در این پایان نامه.....	۶۵
<b>فصل چهارم: بررسی تاثیر میدان الکتریکی بر خواص الکترونی و مغناطیسی نانوساختارهای گرافینی تک لایه، دولایه و همچنن نوسانات آهارانوف-بوهم.....</b>		
۳-۶۹	مقدمه.....	۶۹
۴-۲	بررسی اثرات میدان الکتریکی در واقطیبیدگی اسپینی نانوحلقه های شش ضلعی گرافینی.....	۷۰
۴-۳	کنترل حالت های لبه ی اسپینی از طریق میدان الکتریکی در نانوحلقه های کوانتومی گرافینی.....	۷۴
۴-۴	بررسی اثرات میدان بر خصوصیات الکترونی و مغناطیسی دیسک های گرافینی مستطیلی دولایه.....	۸۱
۴-۵	بررسی اثر میدان های الکتریکی عرضی بر نوسانات آهارانوف-بوهم حلقه های گرافینی.....	۸۴
۴-۶	بررسی خواص الکترونی در دیسک های گرافینی تک لایه با انتها و اندازه های متفاوت در حضور میدان های الکتریکی یکنواخت.....	۸۷
۴-۶-۱	دیسک گرافینی مثلثی با لبه های زیگزاگ.....	۸۷
۴-۶-۲	دیسک گرافینی مثلثی با لبه های آرمچیر.....	۹۰
۴-۶-۳	دیسک گرافینی شش ضلعی با لبه های زیگزاگ.....	۹۳
۴-۶-۴	دیسک گرافینی شش ضلعی با لبه های آرمچیر.....	۹۶
نتیجه گیری.....		۱۰۱
منابع.....		۱۰۳



## فهرست شکل ها

### صفحه

### عنوان

- شکل ۱-۱: (a) لایه ی گرافین در فضای حقیقی (b) ناحیه ی اول بریلوئن در فضای وارون یک شش گوشه است..... ۴
- شکل ۲-۱: ساختار نواری گرافین. نوار هدایت و ظرفیت با یکدیگر در شش نقطه در گوشه های ناحیه ی بریلوئن در فضای تکانه تماس دارند..... ۶
- شکل ۳-۱: (a) طرح مسطح (b) منظر کناری از ساختار کریستالی گرافین دولایه. اتم های A1 و B1 روی لایه ی پایینی با دایره های سفید و مشکی و A2 و B2 روی لایه ی بالایی با دایره های مشکی و خاکستری نشان داده شده اند. لوزی سایه دار در (a) بیانگر سلول واحد قراردادی می باشد..... ۷
- شکل ۴-۱: ساختار هندسی گرافین تاخورد..... ۷
- شکل ۵-۱: دو نوع نانونوار گرافینی که یاخته ی بسیط هر یک در کادر مستطیلی مشخص شده است. .... ۸
- شکل ۶-۱: ساختار اتمی دیسک کوانتومی گرافینی با لبه های زیگزاگ..... ۱۰
- شکل ۷-۱: ساختار اتمی دیسک کوانتومی گرافینی با لبه های زیگزاگ..... ۱۰
- شکل ۸-۱: روش تجربی برای طراحی حلقه ی گرافینی مثلثی. سه نانولوله ی کربنی در مثلث متوازی الاضلاع همراه با لبه های زیگزاگ نقش ماسک را بازی می کند..... ۱۱
- شکل ۹-۱: نمودار طیف انرژی برای حلقه های گرافینی با اندازه های متفاوت. تبهگنی در سطح فرمی به صورت خطچین نشان داده شده و تابعی از عرض حلقه است. در قسمت (a) و (b) به ترتیب، نه و هجده حالت صفر-انرژی وجود دارد..... ۱۲
- شکل ۱۰-۱: نمودار طیف انرژی و چگالی اسپین..... ۱۳
- شکل ۱۱-۱: ساختارهای حلقه که با واحدهای نواری کوچک تر طراحی شده اند. در شکل سمت چپ شش نوار باریک وجود دارد که در ساختار حلقه ی شش ضلعی مرتب شده اند. ضخامت هر حلقه ی بنزنی با  $W$  و طول هر نوار با  $L$  مشخص شده است..... ۱۴
- شکل ۱۲-۱: تصویر شماتیک از طراحی حلقه های شش ضلعی گرافینی..... ۱۵
- شکل ۱۳-۱: (a) دیسک، (b) حلقه گرافینی و (c) توزیع گشتاورهای مغناطیسی. مقدار گشتاور مغناطیسی جایگزیده متناسب با شدت رنگ است..... ۱۶
- شکل ۱۴-۱: طرحی از یک ترانزیستور اثر میدانی..... ۱۷
- شکل ۱۵-۱: طرحی از ترانزیستور اثر میدانی که کانال آن از نانو ساختارهای گرافینی است..... ۱۸
- شکل ۱۶-۱: (a) جریان چشمه به صورت تابعی از ولتاژ دریچه به ازای مقادیر مختلف ولتاژ چاهک،

- (b) جریان چشمه به صورت تابعی از ولتاژ چاهک به ازای مقادیر مختلف ولتاژ دریچه..... ۱۹
- شکل ۱۷-۱: نمودار تراز انرژی مجاز درون کانال که الکترون ها می توانند اشغال کنند به ازای مقادیر مختلف دریچه..... ۲۰
- شکل ۱۸-۱: نمودار تابع فرمی..... ۲۱
- شکل ۱۹-۱: تصویر شماتیک از اثر مغناطیسی آهارانوف-بوهم..... ۲۶
- شکل ۲۰-۱: اثر آهارانوف-بوهم..... ۲۷
- شکل ۱-۲: طرح کلی فیلم های گرافینی..... ۳۰
- شکل ۲-۲: نمودارهای مربوط به اثر میدان در گرافین چندلایه..... ۳۱
- شکل ۳-۲: طرح کلی از قطعات نانونوار گرافینی که اطراف آنها الکترودهای فلزی چشمه و چاهک که غیرمغناطیسی هستند قرار دارد. خواص ترابردی توسط الکترودهای بالا و پایین در طول میدان های الکتریکی عرضی تولید شده کنترل می شود. در قطعه ی (a) نوار با یک جفت الکتروود گیت و در قطعه ی (b) نوار با دو جفت الکتروود میزان شده است. ولتاژ برای جفت الکترودهای سمت چپ در مقادیر  $\pm \frac{V_0}{2}$  ثابت می باشد..... ۳۳
- شکل ۴-۲: طرح نانونوار گرافینی لبه زیگزاگ با میدان الکتریکی خارجی..... ۳۴
- شکل ۵-۲: شکل ساختار اتمی دیسک کوانتومی گرافینی مثلثی با لبه های زیگزاگ همراه با به کار بردن میدان الکتریکی که در امتداد محور  $x$  نشان داده شده است..... ۳۵
- شکل ۶-۲: طرح کلی اسپین کل دیسک گرافینی مثلثی با لبه های زیگزاگ به عنوان تابعی از شدت میدان الکتریکی برای درجه های مختلف بی نظمی لبه..... ۳۵
- شکل ۷-۲: طرح اعمال دو میدان الکتریکی غیریکنواخت با پتانسیل های الکتروستاتیکی  $\pm U$  می باشد. الکترودها در شکل (a) داخل و خارج، (c) سمت چپ و راست دیسک گرافینی مثلثی قرار دارند. شکل (b) و (d) کانتور پتانسیل الکتروستاتیک را نشان می دهد..... ۳۶
- شکل ۸-۲: نمودار طیف حالت های کم-انرژی برای دیسک کوانتومی که در معرض میدان الکتریکی غیریکنواخت مربوط به قسمت a شکل (۷-۲) است را نشان می دهد..... ۳۷
- شکل ۹-۲: چگالی ویژه حالت های دیسک گرافینی..... ۳۸
- شکل ۱۰-۲: رسم چگالی ویژه حالت های دیسک گرافینی..... ۳۹
- شکل ۱۱-۲: طرح کلی اعمال دو میدان الکتریکی غیریکنواخت به حلقه های گرافینی با لبه های زیگزاگ همراه با توزیع گشتاور مغناطیسی جایگزیده. الکترودها در (a) موازی و در (b) متقاطع با پتانسیل های الکتروستاتیکی  $U$  که خارج از حلقه قرار دارد، می باشد. دایره های آبی و قرمز به ترتیب با اسپین الکترون ها با حامل های اکثریت و اقلیت مطابقت دارد..... ۴۰
- شکل ۱۲-۲: طرح گشتاورهای مغناطیسی و نمودار سطوح انرژی نزدیک سطح فرمی برای میدانهای

- الکتريکی غيريکنواخت که با الکترودهای متقاطع اعمال شده است..... ٤١
- شکل ١٣-٢: طرح گشتاورهای مغناطیسی و نمودار سطوح انرژی نزدیک سطح فرمی برای میدانهای الکتريکی غيريکنواخت که با الکترودهای موازی اعمال شده است..... ٤٢
- شکل ١٤-٢: ساختار هندسی برای نانونوار گرافینی (a) تاخورده (b) تاخورده..... ٤٤
- شکل ١٥-٢: طرح کلی گرافین دولایه با لبه های زیگزاگ و آرمچیر در دو جهت..... ٤٥
- شکل ١٦-٢: طرح دیسک گرافینی مثلثی دولایه با لبه های زیگزاگ. (a) ساختار متشکل از دو دیسک تکلایه با اندازه های برابر (سمت چپ) و اندازه های مختلف (سمت راست). (b) رسم چگالی اسپینی در حضور و غیاب میدان الکتريکی..... ٤٦
- شکل ١٧-٢: طرح کلی حلقه های گرافینی شش ضلعی و مثلثی باریک با شرایط مرزی زیگزاگ (برای هر دو لبه ی داخلی و خارجی) با استفاده از محاسبات بستگی قوی. (a) حلقه ی مثلثی متساوی الاضلاع با پهنای سه، (b) حلقه ی شش ضلعی با پهنای پنج ردیف از اتم های کربن... ٤٩
- شکل ١٨-٢: طرح حلقه های گرافینی لبه زیگزاگ (a) شش ضلعی، (b) مثلثی و (c) دایره ای با توزیع گشتاور مغناطیسی جایگزیده را نشان می دهد. دایره های آبی (قرمز) به ترتیب چگالی الکترون ها با اسپین بالا و پایین است..... ٥٠
- شکل ١٩-٢: سطوح انرژی نزدیک انرژی فرمی برای سه نوع متفاوت از حلقه های گرافینی لبه زیگزاگ را نشان میدهند. (a) و (b) حلقه شش ضلعی با پهنای متفاوت، (c) و (d) حلقه مثلثی با پهنای متفاوت و (e) و (f) حلقه دایره های ضخیم (نازک). در این شکلها ستونهای سمت چپ و وسط (خطهای آبی و قرمز) به ترتیب طیف انرژی را برای اسپینهای اکثریت و اقلیت و ستون سمت راست (خطوط سیاه) سطح انرژی را در غیاب برهمکنش الکترون-الکترون نشان می دهند..... ٥١
- شکل ٢٠-٢: نوسانات آهارانوف-بوهم حلقه گرافینی شش ضلعی با  $W=2$  (شکل ١٨) را نشان می دهد. منحنی توپر (خطچین) مدل آهارانوف-بوهم را (با بدون) در نظر گرفتن تاثیر برهمکنش الکترون-الکترون بدست آمده است. این نوسانات برای الکترون های با اسپین بالا و پایین کاملا تبهگن می باشند..... ٥٢
- شکل ٢١-٢: نوسانات آهارانوف-بوهم به عنوان تابعی از شار مغناطیسی  $\phi$  برای حلقه های مثلثی با (a)  $W=3$  و (b)  $W=1$ ، (مربوط به قسمت a شکل ١٨-٢). منحنی توپر آبی (قرمز) مدل آهارانوف-بوهم برای اسپین اکثریت و اقلیت الکترونها. منحنی خطچین مدل آهارانوف-بوهم را بدون برهمکنش الکترون الکترون نشان می دهد. نوسانات برای اسپین اکثریت و اقلیت الکترون ها کاملا غير تبهگن هستند..... ٥٣
- شکل ٢٢-٢: نوسانات آهارانوف-بوهم به عنوان تابعی از شار مغناطیسی  $\phi$  برای حلقه های دایره ای گرافینی (c شکل ١٨-٢) نشان میدهد. منحنی توپر (خط چین) مدل آهارانوف-بوهم را در حضور

(غیاب) برهمکنش الکترون الکترون برای حلقه های دایره های (a) ضخیمتر و (b) نازک تر نشان می دهند. نوسانات برای الکترونها با اسپین بالا و پایین کاملاً تبهگن هستند..... ۵۴

شکل ۱-۳ : زنجیره ی خطی از اتم ها..... ۵۹

شکل ۲-۳ : تابع  $f(x)$  و تقریب های بکار رفته برای بدست آوردن مشتق آن در نقطه ی  $P$  به روش تفاضل محدود..... ۶۲

شکل ۱-۴ : طرح (a) حلقه کوانتومی گرافینی شش ضلعی (b) نقاط کوانتومی گرافینی. حلقه های گرافینی تحت تاثیر توزیع های متفاوت پتانسیل الکتریکی. اعمال پتانسیل (c) متقارن (d) نامتقارن (لبه بالا و پایین) (e) اعمال پتانسیل تنها در قسمت بالایی حلقه..... ۷۱

شکل ۲-۴ : گشتاورهای مغناطیسی موضعی در حلقه کوانتومی گرافینی زیگزاگ در حضور میدان الکتریکی متقارن (شکل (۱c)). دایره های قرمز و آبی متناسب با مقدار گشتاور مغناطیسی است. (c) و (d) به ترتیب نمودار چگالی حالات موضعی بر حسب انرژی، خطوط ممتد الکترون های با اسپین موازی با مغناطش کل و خطوط خط چین الکترون هایی با اسپین پاد موازی با مغناطش کانال..... ۷۲

شکل ۳-۴ : گشتاور مغناطیسی موضعی ایجاد شده در حلقه های کوانتومی گرافینی در حضور میدان الکتریکی نامتقارن. دایره های آبی و قرمز به ترتیب چگالی اسپین بالا و پایین الکترون را نشان می دهند..... ۷۳

شکل ۴-۴ : گشتاور مغناطیسی موضعی ایجاد شده در حلقه های کوانتومی گرافینی در حضور میدان الکتریکی در نیمه بالایی حلقه. دایره های آبی و قرمز مغناطش را نشان می دهند..... ۷۳

شکل ۵-۴ : طرح حلقه کوانتومی گرافینی (a) مثلثی (b) شش ضلعی همراه با توزیع گشتاور مغناطیسی جایگزیده در یک میدان الکتریکی یکنواخت در جهت  $x$ . دایره های آبی و قرمز به ترتیب با اسپین بالا و پایین الکترون ها مطابقت دارد..... ۷۵

شکل ۶-۴ : سطوح انرژی اسپینی نزدیک به فرمی انرژی برای حلقه ی گرافینی مثلثی لبه زیگزاگ با  $L = 7$  و  $W = 3$  در حضور مقادیر مختلف از میدان الکتریکی..... ۷۶

شکل ۷-۴ : روند تغییرات حالات لبه ی مغناطیسی با به کارگیری میدان های الکتریکی (a)  $E = 3.5$  ولت بر نانومتر و (b)  $E = 5.0$  ولت بر نانومتر در حلقه ی گرافینی مثلثی با لبه های زیگزاگ. (c) اسپین کل و (d) گاف های انرژی دو حلقه ی مثلثی متفاوت به عنوان تابعی از شدت میدان الکتریکی می باشند. مربع های آبی مربوط به نانوحلقه با  $W = 2$  و  $L = 7$  و دایره های قرمز مربوط به نانوحلقه با  $W = 3$  و  $L = 7$  می باشند..... ۷۸

شکل ۸-۴ : سطوح انرژی اسپینی نزدیک به فرمی انرژی برای حلقه های شش ضلعی لبه زیگزاگ در حضور میدان الکتریکی (a)  $E = 1$  V / نانومتر و (b)  $E = 1:07$  V / نانومتر است. مثلث های

- آبی و قرمز به ترتیب مربوط به اسپین بالا و پایین الکترون ها می باشد..... ۷۹
- شکل ۴-۹: روند تغییرات حالات لبه مغناطیسی در یک حلقه ی شش ضلعی در حضور میدان الکتریکی (a)  $E = 1.7$  ولت بر نانومتر و (b)  $E = 1.8$  ولت بر نانومتر است. (c) حداکثر گشتاور مغناطیسی اتمهای لبه و (b) گاف انرژی حلقه ی شش ضلعی به عنوان تابعی شدت میدان الکتریکی..... ۸۰
- شکل ۴-۱۰: طرح (a) سطوح انرژی، (b) دیسک گرافینی مستطیلی دولایه به همراه گشتاورهای مغناطیسی جایگزیده در غیاب میدان الکتریکی. دایره های قرمز و آبی متناسب با مقدار گشتاور مغناطیسی است..... ۸۱
- شکل ۴-۱۱: سطوح انرژی نزدیک انرژی فرمی برای دیسک گرافینی مستطیلی دولایه با لبه ی زیگزاگ را نشان می دهند. در این شکل ها ستون های سمت چپ و وسط (خط های آبی و قرمز) به ترتیب طیف انرژی را برای اسپین های اکثریت و اقلیت و ستون سمت راست (خطوط سیاه) سطح انرژی را در غیاب برهمکنش الکترون-الکترون نشان می دهند..... ۸۲
- شکل ۴-۱۲: گشتاورهای مغناطیسی موضعی در دیسک کوانتومی گرافینی مستطیلی دولایه زیگزاگ در حضور میدان الکتریکی ۲ ولت (a) و ۴ ولت (b). دایره های قرمز و آبی متناسب با مقدار گشتاور مغناطیسی است..... ۸۳
- شکل ۴-۱۳: طرح حلقه کوانتومی گرافینی لبه زیگزاگ (a) مثلثی (b) شش ضلعی با زیر شبکه های مختلف (دایره های آبی و قرمز) (a) حلقه مثلثی با  $W = 3$  و  $L = 13$  و (b) حلقه شش ضلعی با  $W = 3$  و  $L = 8$  نشان داده شده است..... ۸۴
- شکل ۴-۱۴: نمودار تغییرات ویژه مقادیر انرژی بر حسب شار مغناطیسی آهارانوف-بوهم برای حلقه مثلثی با  $W = 3$ . نوسانات مشاهده شده با اعمال میدان الکتریکی (a)  $E = 0$  و (b)  $E = 0.02 V/m$  و (c)  $E = 0.05 V/m$ ..... ۸۵
- شکل ۴-۱۵: تغییرات ویژه مقادیر انرژی بر حسب شار مغناطیسی برای حلقه شش ضلعی با  $W = 3$ . نوسانات با صرف نظر از برهمکنش الکترون-الکترون با اعمال میدان الکتریکی (a)  $E = 0$  و (b)  $E = 0.02 V/m$  در (c) نشان داده شده است..... ۸۶
- شکل ۴-۱۶: نوسانات آهارانوف-بوهم برای حلقه گرافینی (a) مثلثی، (b) شش ضلعی را در حضور برهمکنش الکترون-الکترون. خطوط ممتد (خطچین) مربوط به الکترونها با اسپین موازی (پاد موازی) میباشد. این نوسانات برای الکترونها با اسپین بالا و پایین حلقه مثلثی (شش ضلعی)، غیرتبهگن (تبهگن) است..... ۸۶
- شکل ۴-۱۷: طرح کلی (a)، (b) دیسک گرافینی مثلثی لبه زیگزاگ در حضور میدان الکتریکی، (c) دیسک همراه با شماره ی اتم ها و (d) نمودار پتانسیل الکتریکی..... ۸۸

- شکل ۴-۱۸ : سطوح انرژی و نمودار چگالی حالات برحسب انرژی..... ۸۹
- شکل ۴-۱۹ : طرح (a) دیسک گرافینی ، (b) نمودار ویژه مقادیر و (c) چگالی حالات الکترونی..... ۹۰
- شکل ۴-۲۰ : طرح کلی (a)، (b) دیسک گرافینی مثلثی لبه زیگزاگ در حضور میدان الکتریکی، (c) دیسک همراه با شماره ی اتم ها و (d) نمودار پتانسیل الکتریکی..... ۹۱
- شکل ۴-۲۱ : سطوح انرژی و نمودار چگالی حالات برحسب انرژی..... ۹۲
- شکل ۴-۲۲ : : طرح (a) دیسک گرافینی ، (b) و (c) نمودار ویژه مقادیر و (d) چگالی حالات الکترونی..... ۹۳
- شکل ۴-۲۳ : طرح کلی (a)، (b) دیسک گرافینی شش ضلعی لبه زیگزاگ در حضور میدان الکتریکی، (c) دیسک همراه با شماره ی اتم ها و (d) نمودار پتانسیل الکتریکی..... ۹۴
- شکل ۴-۲۴ : (a) و (b) سطوح انرژی ، (c) نمودار چگالی حالات برحسب انرژی و (d) چگالی حالت ها..... ۹۵
- شکل ۴-۲۵ : طرح (a) دیسک گرافینی ، (b) و (c) نمودار ویژه مقادیر و (d) چگالی حالات الکترونی..... ۹۶
- شکل ۴-۲۶ : طرح کلی (a)، (b) دیسک گرافینی شش ضلعی با لبه های آرمچیر در حضور میدان الکتریکی یکنواخت، (c) دیسک همراه با شماره ی اتمها و (d) نمودار پتانسیل الکتریکی..... ۹۷
- شکل ۴-۲۷ : (a) و (b) سطوح انرژی، (c) نمودار چگالی حالات برحسب انرژی و (d) چگالی حالت ها..... ۹۸
- شکل ۴-۲۸ : طرح (a) دیسک گرافینی ، (b) و (c) نمودار ویژه مقادیر و (d) چگالی حالات الکترونی..... ۹۹

## فصل اول

### مقدمه ای بر ساختارهای گرافینی و مبانی نظری پژوهش

#### ۱-۱ مقدمه

در طبیعت کربن به شکل‌های الماس و گرافیت وجود دارد. الماس بسیار سخت و عایق است، در حالی که گرافیت رسانا و نرم است. در سال ۱۹۴۷ ایده‌ی آلوتروپ جدیدی از کربن به نام گرافین توسط فیلیپ والاس<sup>۱</sup> مطرح شد. اما این ایده جدی گرفته نشد. چرا که طبق یک قضیه، هیچ شبکه دویبعدی نمی‌تواند پایدار باشد و این در حالی است که گرافین یک نیمه فلز با ساختار لانه زنبوری در دویبعد می‌باشد. بطوریکه در آن هر اتم کربن باسه اتم مجاور پیوند کووالانسی از نوع سیکما دارد. بالاخره در سال ۲۰۰۴ یک گروه در منچستر به سرپرستی آندره گایم<sup>۲</sup> و کونستانتین نووسلف<sup>۳</sup> توانستند برای اولین بار گرافین را بطور میکرومکانیکی تولید کنند [۱]. علت اینکه گرافین توانست ایجاد شود نادرست بودن آن قضیه نبود بلکه کاملاً تخت نبودن گرافین در ابعاد میکروسکوپی بود. خلوص بالا در گرافین به ترابرد بالستیک در آن منجر می‌شود و در نتیجه سرعت فرمی در گرافین صد مرتبه از سرعت فرمی در فلزات بیشتر است و شاهد تحرک پذیری بسیار بالا  $2/5 \times 10^8 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  در گرافین هستیم، که این به ما امکان ساخت قطعات با سرعت بالا همچون نانوترانزیستور را می‌دهد. چگالی جریان در گرافین می‌تواند تا  $10^8 \text{ A/cm}^2$  برسد که نشان می‌دهد رسانایی گرافین صد برابر از مس بیشتر است [۲]. رسانایی گرمایی نیز در گرافین  $30-50 \text{ W/cmK}$  می‌باشد اما در مس  $4 \text{ W/cmK}$  می‌باشد. اسپین در گرافین می‌تواند برای مدت طولانی خود را حفظ کند و این به ما امکان استفاده از

---

<sup>۱</sup>Philip Wallace

<sup>۲</sup>Andre Geim

<sup>۳</sup>Konstantin Novoselov

گرافین در قطعات اسپینترونیکی را می‌دهد. استحکام مکانیکی و انعطاف پذیری در گرافین بالا می‌باشد. همچنین چگالی حامل‌ها را می‌توان با ولتاژ گیت کنترل کرد [۳].

## ۱-۲ شرحی مختصر بر اسپینترونیکی

اسپینترونیکی<sup>۱</sup> از اکتشاف مرتبط با انتقال الکترونیکی وابسته به اسپین در قطعات حالت جامد در سال ۱۹۸۰ پدیدار شد. اسپینترونیکی یا الکترونیکی اسپینی، علم استفاده از اسپین الکترون‌ها در الکترونیکی است. تکنولوژی اسپینترونیکی از چرخش ذاتی الکترون با گشتاور مغناطیسی متناظر و بار الکترون در قطعات حالت جامد استفاده می‌کنند [۴].

ذرات بنیادی به غیر از بار الکترونیکی و جرم خاصیت دیگری به نام اسپین دارند که یکی از خواص ذاتی الکترون است. که مقدار  $1/2$  و  $-1/2$  به آن نسبت داده می‌شود. پژوهشگران اسپینترونیکی تلاش می‌کنند تا با استفاده از قوانین حاکم بر برهمکنش و تغییرات اسپین الکترون روش‌های جدیدی برای ساخت سیستم‌های معادل با مدارهای الکترونیکی به خصوص برای محاسبه و ذخیره‌ی اطلاعات بیابند [۴].

کاربردهای اسپینترونیکی تغییرات اساسی را در صنعت حافظه‌های مغناطیسی بوجود آورده است. قطعات اسپینترونیکی براساس یک طرح ساده کار می‌کنند که ابتدا اطلاعات به صورت یک جهت‌دهی خاص برای اسپین ذخیره می‌شوند (بالا یا پایین) سپس این اسپین‌ها به الکترون‌های متحرک متصل شده و در انتها اطلاعات اسپین‌ها بازخوانی می‌شود.

الکترونیکی نوین به دنبال توانایی کنترل خواص الکترونیکی مواد مختلف توسط اعمال ولتاژ خارجی است. ادوات الکترونیکی حاضر اکثراً بر پایه‌ی گذردهی حامل‌های بار الکتریکی در نیمه‌هادی‌های همچون سیلیکان هستند. اسپینترونیکی علم بررسی خواص تراپردی و ذخیره-ی اطلاعات با استفاده از اسپین الکترون‌ها است. با توجه به اینکه استفاده از اسپین الکترون به جای بار الکترون می‌تواند در انتقال و ذخیره‌سازی اطلاعات مفید باشد. دانشمندان تلاش می‌کنند از اسپین الکترون به جای بار آن استفاده کنند.

مزایای اسپینترونیکی نسبت به الکترونیکی حاضر می‌توان به موارد زیر پرداخت

- سرعت بسیار بالا و قدرت محاسبات بیشتر

- مصرف انرژی کمتر

---

<sup>۱</sup>Spintronic



- امکان استفاده در محاسبات کوانتومی

- ابعاد کوچک تر

اسپین یک خاصیت کوانتومی است و دارای دو حالت خاص برای الکترون‌ها است که می‌تواند جهت‌های بالا یا پایین داشته باشد. همان طور که می‌دانیم در سیستم‌های کامپیوتری داده‌ها را کدگذاری می‌کنند حال می‌توان داده‌ها را با جهت‌های بالا و پایین کدگذاری کرد. استفاده از اسپین به عنوان یک خاصیت کوانتومی، در این است که حافظه‌های اسپینی با قطع جریان الکتریکی از بین نمی‌روند. با توجه به اینکه ادوات اسپیترونیکی به مراتب عملکرد بهتری نسبت به ادوات الکترونیکی حاضر دارند، در آینده‌ی نزدیک به تدریج جایگزین ادوات خواهند شد [۴].

گرافین یک ماده‌ی مهم برای ادوات اسپیترونیکی است، زیرا اسپین الکترون در آن می‌تواند برای مدت طولانی جهت خود را حفظ کند. در نتیجه اطلاعات ذخیره شده به سادگی از بین نمی‌روند.

## ۱-۳ ساختار گرافین

### ۱-۳-۱ ساختار گرافینی تک لایه

#### ۱-۳-۱-۱ ساختار هندسی گرافین تک لایه

#### ۱-۳-۱-۱-۱ ساختار شبکه

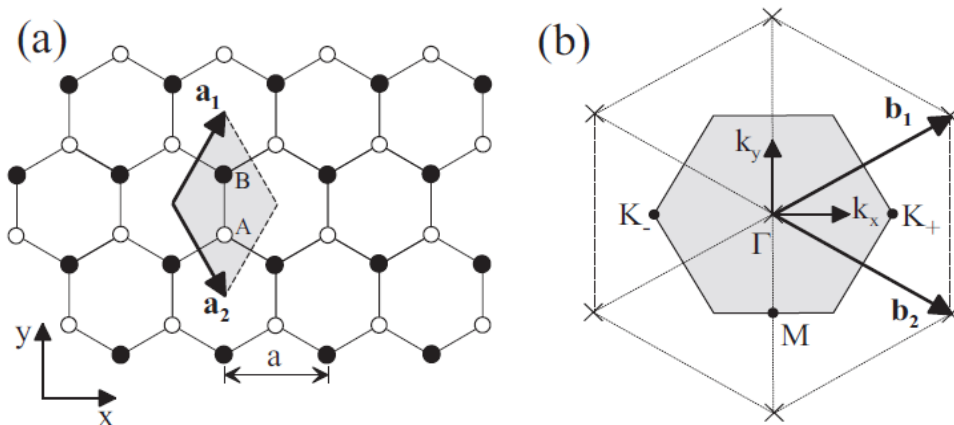
گرافین لایه‌ای دوبعدی از اتم‌های کربن به ضخامت یک اتم است. یک اتم کربن شش الکترون دارد و اوربیتال‌های اتمی  $1s^2 2s^2 2p^2$  را اشغال می‌کنند. الکترون‌های اوربیتال  $1s^2$  شدیداً مقیدند، بنابراین نمی‌توانند در پیوند شیمیایی شرکت کنند و الکترون‌های مغزه (هسته) نامیده می‌شوند. چهار الکترون باقیمانده، الکترون‌های ظرفیت هستند و در اوربیتال‌های غیرجایگزیده تری قرار دارند [۵]. از آن جایی که اختلاف انرژی بین ترازهای  $2s$  و  $2p$  از انرژی بستگی آن‌ها کوچک تر است، تابع موج این چهار الکترون به راحتی هیبرید<sup>۱</sup> می‌شوند. نتیجه سه حالت  $2sp^2$  است که در صفحه‌ی  $xy$  قرار می‌گیرند و با هم زاویه  $120^\circ$  درجه می‌سازند. این حالت‌ها با اتم‌های همسایه پیوندهای کوالانسی<sup>۲</sup> تشکیل داده که به آن پیوندهای  $\sigma$  می‌گویند و

---

<sup>۱</sup>Hybridization

<sup>۲</sup>Covalent bond

ساختار شبکه‌ای شش‌گوشی<sup>۱</sup> گرافین را تشکیل می‌دهند. پیوندهای  $\sigma$  معمولاً در نظریه‌ای که ویژگی‌های الکتریکی گرافین را توضیح می‌دهد نادیده گرفته می‌شوند. حالت باقیمانده اوربیتال  $2p_z$  است که بر صفحه گرافین عمود هستند به آن حالت  $\pi$  می‌گویند و جهت گیری آن در راستای محور  $z$  است. الکترون‌ها در این حالت پیوند ضعیفی دارند به عبارت دیگر دارای انرژی بستگی کمی بوده و به راحتی می‌توانند بین اتم‌های همسایه حرکت کنند. بنابراین برای خواص تراپردی سیستم مناسبند. همچنین برای بررسی خواص الکترونی گرافین از این حالت-های  $\pi$  استفاده می‌کنیم [۱].



شکل ۱-۱: (a) لایه ی گرافین در فضای حقیقی (b) ناحیه ی اول بریلوئن در فضای وارون یک شش‌گوشی است [۶].

### ۱-۳-۱-۲ شبکه لانه زنبوری

در یک لایه ی گرافین، اتم‌های کربن در گوشه‌های شش‌گوشی قرار گرفته‌اند. به این ساختار یک شبکه لانه زنبوری<sup>۲</sup> می‌گویند. شبکه لانه زنبوری یک شبکه برآوه<sup>۳</sup> نیست [۷]، اما می‌توان آن را به عنوان یک شبکه مثلثی<sup>۴</sup> با دو اتم با پایه در نظر گرفت. شبکه لانه زنبوری

<sup>۱</sup>Hexagonal

<sup>۲</sup>Honeycomb

<sup>۳</sup>Bravais lattice

<sup>۴</sup>Triangular

گرافین یک شبکه دوبخشی<sup>۱</sup> است [۸]. طوری که از دو زیر شبکه مثلثی  $A$  و  $B$  تشکیل شده که همسایه اول اتم  $A$  به زیر شبکه  $B$  تعلق دارد و برعکس [۹]. در قسمت a در شکل (۱-۱) لایه‌ی گرافین در فضای حقیقی نشان داده شده که در آن دایره‌های توپر (توخالی) به ترتیب سایت‌های زیر شبکه  $B$  ( $A$ ) هستند.  $a$  ثابت شبکه است. در آن  $a_0 = 1/42A^0$  فاصله میان دو اتم است. و با ثابت شبکه  $a$  چنین رابطه‌ای دارد  $a = \sqrt{3}a_0$  با  $a = \sqrt{3}|r_i|$  ( $i=1,2,3$ ) می‌توان بردارهای پایه را این‌گونه در نظر گرفت [۱۰ و ۱۱]

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

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

ناحیه وارون شبکه فیزیک شبکه مثلثی است در قسمت (b) در شکل (۱-۱) ناحیه اول بریلوئن برای گرافین نشان داده شده است.

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

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

$r_1$  و  $r_2$  و  $r_3$  فاصله میان یک سایت  $A$  و  $B$  را مشخص می‌کند.

$$r_1 = (0, \frac{a}{\sqrt{3}}) \quad (3-1)$$

$$r_2 = (\frac{-a}{2}, \frac{-a}{2\sqrt{3}})$$

$$r_3 = (\frac{a}{2}, \frac{-a}{2\sqrt{3}})$$

از بین شش گوشه‌ی ناحیه‌ی بریلوئن تنها دوتای آن‌ها معادل نیستند و بقیه را می‌توان با انتقال بدست آورد. معمول است که این گوشه‌های ناهمسان را با  $k_+$  و  $k_-$  نشان می‌دهند. مختصات  $k_+$  و  $k_-$  و  $\Gamma$  این‌گونه است [۱۱]

$$k_+ = \frac{2\pi}{a}(\frac{1}{3}, \frac{1}{\sqrt{3}}) \quad (4-1)$$

$$k_- = \frac{2\pi}{a}(\frac{2}{3}, 0)$$

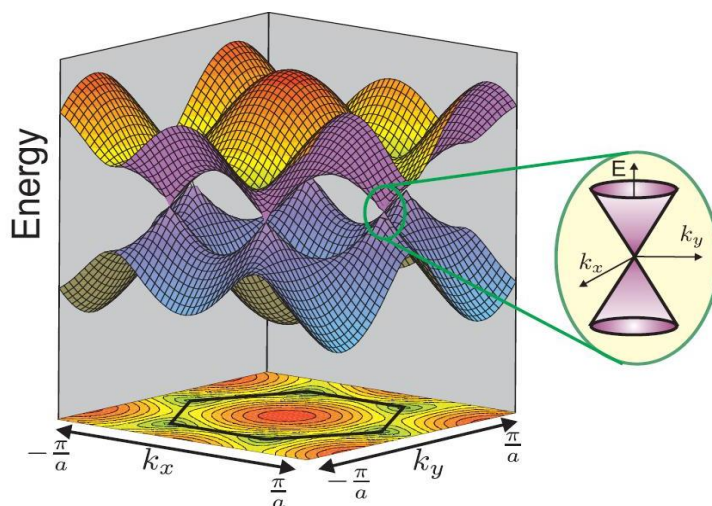
$$\Gamma = (0, 0)$$

---

<sup>۱</sup>Bipartite lattice

### ۱-۳-۲ ساختار نواری گرافین تک لایه

اوربیتال‌های  $\pi$  در حالت‌های  $\pi$  پیوندی و ضد پیوندی در طیف انرژی شرکت می‌کنند. حالت  $\pi$  پیوندی (در انرژی‌های پایین‌تر) نوار ظرفیت و حالت  $\pi$  ضد پیوندی (در انرژی‌های بالاتر) نوار هدایت را تشکیل می‌دهند. نوارهای ظرفیت و هدایت در شش گوشه ناحیه بریلوئن تلاقی می‌کنند و یک پاشندگی شبه خطی دارند [۱۲]. به بیان دیگر در ساختار نواری گرافین تک لایه، گاف انرژی صفر می‌باشد و رابطه پاشندگی در انرژی‌های پایین یک رابطه خطی است [۱۳ و ۱۵]. در نتیجه ساختار نواری گرافین تک لایه، به شکل زیر در می‌آید.



شکل ۲-۱ : ساختار نواری گرافین. نوار هدایت و ظرفیت با یکدیگر در شش نقطه در گوشه‌های ناحیه بریلوئن در فضای تکانه تماس دارند [۱۳].

### ۱-۳-۲ ساختار هندسی گرافین دولایه

گرافین دولایه<sup>۱</sup> از روی هم قرار گرفتن دولایه (یا نوار) گرافینی تک لایه به شکل  $AB$  و  $AA$  به دست می‌آید. در مورد  $AA$  تمام اتم‌های لایه‌ی بالایی در بالای اتم‌های لایه‌ی پایینی قرار دارند. اما در مورد  $AB$  نیمی از اتم‌های لایه‌ی بالایی (اتم‌های زیر شبکه‌ی  $B_2$ ) در بالای مرکز شش ضلعی لایه‌ی پایینی قرار دارند و نیمه‌ی دیگر (اتم‌های زیر شبکه‌ی  $A_2$ ) در بالای نیمی از

<sup>۱</sup>Bilayer graphene