

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان‌نامه‌ی دکتری رشته‌ی فیزیک گرایش ماده چگال

نوفه شلیکی در اتصال‌های گرافینی

استاد راهنما:

دکتر فردین خیراندیش

پژوهشگر:

زینب رشیدیان

بهمن ماه ۱۳۹۰

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



دانشگاه اصفهان





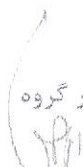
دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه‌ی دکتری رشته‌ی فیزیک گرایش حالت جامد زینب رشیدیان
تحت عنوان

نوفه شلیکی در اتصال های گرافینی

در تاریخ ۱۳۹۰/۱۱/۱۷ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه عالی به تصویب نهایی رسید.

 امضا	با مرتبه ی علمی دانشیار	دکتر فردین خیراندیش	۱- استاد راهنمای پایان نامه:
 امضا	با مرتبه ی علمی دانشیار	دکتر حشمت اله یآوری	۲- استادان داور داخل گروه:
 امضا	با مرتبه ی علمی دانشیار	دکتر حمیدرضا فلاح	
 امضا	با مرتبه ی علمی استادیار	دکتر شهریار سلیمی	۳- استاد داور خارج گروه:
 امضا	امضای مدیر گروه		

چکیده:

گرافین، یک لایه‌ی دو بعدی از اتم‌های کربن است که در یک ساختار زنبور عسلی چیده شده است. این ماده‌ی دو بعدی که مانند نیمه‌رسانای با گاف صفر رفتار می‌کند، به دلیل داشتن الکترون‌های دیراک گونه‌ی نسبیتی متمایز از نیمه رساناهای معمول رفتار می‌کند. همچنین گرافین به دلیل داشتن اندازه‌ی از مرتبه‌ی اتمی، قابلیت تبدیل به مواد فرومغناطیس با الکترون‌های اسپین قطبیده را دارد که این امر گرافین را در علم اسپینترونیک از توجه خاصی برخوردار کرده است. یک موضوع بسیار جالب و ویژگی قابل اندازه‌گیری در علم اسپینترونیک، رسانش کوانتومی می‌باشد. علاوه بر رسانش، افت و خیزهای غیرتعادلی جریان که از گسسته‌بودن حامل‌های بار ایجاد می‌شوند (نوفه شلیکی) ابزار قابل اندازه‌گیری دیگری هستند که اطلاعاتی از سیستم به ما می‌دهند که از اندازه‌گیری رسانش و جریان نمی‌توان بدست آورد. نوفه شلیکی و رسانش کوانتومی در اتصال گرافین عادی / گرافین فرومغناطیس / گرافین عادی با استفاده از فرمولبندی لاندائور بوتیکر بررسی شده است که در این اتصال گرافین فرومغناطیسی نقش سد مغناطیسی را بازی می‌کند. با توجه به اینکه برهمکنش‌ها مقدار نوفه را از مقدار نوفه پواسونی‌اش (نوفه مربوط به ذرات مستقل از هم) کم می‌کنند و همچنین با توجه به کایرال بودن حامل‌های بار در گرافین، به دنبال برهمکنش جدیدی در این اتصال هستیم. بررسی‌ها نشان داده است که اصل طرد پائولی که بین الکترون‌های با اسپین موافق است، مقدار نوفه را کم می‌کند. ما نشان می‌دهیم به دلیل کایرال بودن ذرات نسبیتی در گرافین، یک اصل طرد دیگری وجود دارد که بین ذرات با اسپین مخالف است. یعنی در حالتی که تونل‌زنی کلاین امکان‌پذیر است الکترون‌های با اسپین بالا و پائین در هنگام ورود به ناحیه فرومغناطیس گرافین، به ترتیب به نوار رسانش و ظرفیت می‌روند و این قید مقدار نوفه را کم می‌کند. برای بررسی بیشتر رفتار اتصال گرافین عادی / گرافین فرومغناطیس / گرافین عادی، ترابرد وابسته به اسپین در مجموعه متوالی از این اتصال‌ها محاسبه شده است. محاسبات نشان می‌دهند که اتصال گرافین عادی / گرافین فرومغناطیس / گرافین عادی نقش قطبنده را دارد و با افزایش نامتناهی از این ساختار می‌توان به الکترون‌های کاملاً قطبیده رسید. همچنین نکته حائز اهمیت دیگری که متمایز بودن گرافین را از نیمه‌رساناهای معمول نشان می‌دهد این است که با افزایش پتانسیل الکتروستاتیکی همواره ترابرد اسپینی به جای میراشدن، به صورت تناوبی تغییر می‌کند.

واژه‌های کلیدی: گرافین، اتصال، ترابرد، نوفه شلیکی، رسانش، اسپینترونیک، شبه اسپین.

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فصل اول: نظریه نواری گرافین

- ۱-۱- تقریب بستگی قوی..... ۱۱
- ۱-۲- یافتن شش گوشه منطقه اول بریلوئن..... ۱۵

فصل دوم: باطلنمای کلاین

- ۱-۲- مقدمه‌ای تاریخی از تونل‌زنی کوانتومی..... ۱۹
- ۲-۲- تونل‌زنی کوانتومی نسبیته..... ۲۱
- ۳-۲- بررسی پارادوکس کلاین از منظر نظریه‌ی حفره..... ۲۷

فصل سوم: محاسبه‌ی رسانندگی

- ۱-۳- مسیر آزاد میانگین یک الکترون..... ۳۶
- ۲-۳- محاسبه رسانندگی الکترون با استفاده از فرمولبندی لاندائور بوتیکر..... ۳۷
- ۳-۳- رسانندگی در گرافین با استفاده از فرمول کوبو..... ۴۱
- ۱-۳-۳- عدم وجود جایگزیدگی..... ۴۴
- ۲-۳-۳- زیربیوگانک یا مسئله ضریب رسانندگی گم شده..... ۴۵

فصل چهارم: ترابرد وابسته به اسپین

- ۱-۴- ترابرد کوانتومی در اتصال N/F/N..... ۵۱
- ۱-۱-۴- پایه‌های حالت‌های پراکندگی در ناحیه نرمال و فرومغناطیس..... ۵۲
- ۲-۱-۴- رسانش در اتصال N/F/N..... ۵۴
- ۳-۱-۴- نوفه شلیکی در اتصال N/F/N..... ۵۹
- ۲-۴- ترابرد کوانتومی در اتصال‌های نامتناهی N/F/N..... ۶۷

فصل پنجم: نتیجه‌گیری

- منابع و مآخذ..... ۸۲

فهرست شکل‌ها

صفحه	عنوان
۳	شکل ۱-۰-۱- انواع ساختارهای کربنی.....
۴	شکل ۲-۰-۲- نانوریبون‌های کربنی مشتق شده از گرافین که بسته به برش نانوساختار، ویژگی‌های مختلف دارند.....
۹	شکل ۱-۱-۱- نمایش اربیتال هیبریداسیون گرافین.....
۹	شکل ۲-۱-۲- ساختار شبکه‌ای زنبور عسل گرافین.....
۱۱	شکل ۳-۱-۳- ساختار گرافین و منطقه وارونش.....
۱۴	شکل ۴-۱-۴- ساختار نواری گرافین به صورت نیمه‌رسانای با گپ صفر است. نوارهای رسانش و ظرفیت در شش نقطه منطقه اول بریلوئن همدیگر را قطع می کنند.....
۱۴	شکل ۵-۱-۵- (چپ): شبکه دو بعدی زنبور عسل گرافین: هر سلول واحد شامل دو اتم که هر یک متعلق به یکی از زیرساختارهای براوه مثلثی A و دیگری به زیر ساختار B می باشد.
۱۸	$a=0.246\text{nm}$ ثابت شبکه رسم شده است. (راست): اولین منطقه بریلوئن گرافین با بردارهای وارون شبکه b_1, b_2
۲۲	شکل ۱-۲-۱- انواع تونل زنی کلاسیکی-کوانتومی-نسبیتی.....
۲۵	شکل ۲-۲-۲- خلق جفت الکترون-حفره در سد.....
۲۷	شکل ۳-۲-۳- تونل زنی ذرات نسبیتی از سد پتانسیل.....
۳۸	شکل ۱-۳-۱- ناحیه پراکننده با احتمالات عبور و بازتاب الکترون.....
۴۴	شکل ۲-۳-۲- مقادیر مخلف کمینه رسانندگی بدست آمده با استفاده از روشهای نظری و عددی و آزمایشی مختلف.....
۴۴	شکل ۱-۴-۱- ساختار اتصال N/F/N گرافین.....
۵۵	شکل ۲-۴-۲- در فرمولبندی لاندائور بوتیکر، تراپرد به صورت پراکندگی حالات ورودی (با a مشخص می شوند) به حالات خروجی (که با دامنه b مشخص می شوند) بوسیله یک ناحیه پراکننده همدوس فازی در نظر گرفته می شود.....
۶۲	شکل ۳-۴-۳- رسانش و ضریب فانو.....
۶۵	شکل ۴-۴-۴- ساختار اتصال N/F/N/F/N گرافین.....

- شکل ۴-۵- ترابرد بار و ترابرد اسپین اتصال N/F/N/F/N گرافین ۷۱
- شکل ۴-۶- ترابرد سه بعدی وابسته به اسپین اتصال N/F/N/F/N گرافین (سدصفر)..... ۷۲
- شکل ۴-۷- ترابرد سه بعدی وابسته به اسپین اتصال N/F/N/F/N گرافین(سد بینهایت) ۷۳
- شکل ۴-۸- ترابرد وابسته به اسپین اتصال N/F/N/F/N گرافین..... ۷۳

پیش‌گفتار

علم اسپینترونیک یا الکترونیک اسپین شامل تولید حامل‌های اسپین قطبیده، دینامیک اسپین و ترابرد حامل‌های اسپین قطبیده، بر پایه درجه آزادی اسپین استوار است. اسپینترونیک منجر به افزایش قابل ملاحظه در انتقال اطلاعات و حضور رم‌ها [۱] ^۱ با ظرفیت بالا و ذخیره بالای اطلاعات است که به سرعت وارد صنعت و سپس بازار شده است.

تکنولوژی اطلاعات امروزه بر پایه مغناطیس و ترابرد اسپین استوار است. قدیمی‌ترین ایده‌ی ساز و کار خواندن اطلاعات در ذخایر مغناطیسی به قانون القای فاراده برمی‌گردد که به تدریج ابتدا با مقاومت مغناطیسی غیر یکنواخت (AMR) ^۲، مقاومت مغناطیسی عظیم (GMR) ^۳ و مقاومت مغناطیسی تونلی (TMR) ^۴ دارای پیشرفتهای چشمگیری بوده است. ساز و کار نوشتن اطلاعات نیز که تا قبل از ورود علم اسپینترونیک هنوز بر اساس قانون آمپر قرن ۱۹ بود با استفاده از پدیده گشتاور ترابرد اسپینی ^۵ امکان کوچک کردن مواد را در حد نانو فراهم کرده است. این ساز و کار جدید نیز که یکی از شاخه‌های اسپینترونیک است بر پایه‌ی کنترل مغناطش با جریان، بدون متوسل شدن به میدان‌های مغناطیسی استوار است.

ترابرد اسپین با ترابرد بار از این جهت فرق دارد که اسپین بر خلاف بار، به دلیل برهمکنش فوق ریز و جفت شدگی اسپین مدار پایسته نیست. واژه اسپین می‌تواند به دو مفهوم منتهی شود؛ اسپین یک الکترون منفرد که می‌تواند بوسیله گشتاور مغناطیسی آن آشکار شود $-g\mu_B s$ ، μ_B مگنتون بوهر و g ضریب الکترون که مقدار آن در یک جامد با مقدار الکترون آزاد $g_0 = 2.0023$ فرق دارد یا به میانگین آنسامبلی از الکترون‌ها که بوسیله مغناطش معرفی می‌شود.

^۱ Magnetic Random Access Memory

^۲ Anisotropic MagnetoResistance

^۳ Giant MagnetoResistance

^۴ Tunneling MagnetoResistance

^۵ Spin Transfer Torque

سؤالاتی که در علم اسپینترونیک مطرح می‌شوند شامل راه مناسب برای قطبیده‌کردن یک سامانه اسپینی، مدت زمانی که سامانه قادر است جهت اسپینی خودش را حفظ کند و چگونگی آشکار کردن آن می‌باشد. این علم بر روی مواد نیم‌رسانای فرومغناطیسی [۲]، [۳]، نیم‌رساناهای آلی [۴]، فرومغناطیس‌های آلی [۵]، [۶] ابر رساناهای با دمای بالا [۷]، نانولوله‌های کربنی [۸]، [۹] و گرافین صورت گرفته است.

گرافین می‌تواند کاندیدای خوبی برای اسپینترونیک باشد. زیرا به دلیل ساختار خاص آن دارای برهمکنش ساختار ریز کم [۱۰]، برهمکنش اسپین مدار بسیار ضعیف [۱۱] و اثر میدان الکتریکی قوی^۶ و کار [۱۲] می‌باشد همچنین چگالی حاملان بار می‌تواند بوسیله ولتاژ گیت تنظیم شود. برهمکنش اسپین مدار بسیار ضعیف در گرافین منجر به طولهای اسپین وارون^۷ بالا [۱۳]، [۱۴] می‌شود. اخیراً طول اسپین وارون $1\mu m$ در دمای اتاق گزارش شده است [۱۵].

نکته جالب دیگری که در مورد گرافین وجود دارد این است که با وجود اینکه گرافین به طور ذاتی خنثی است ولی این ویژگی را دارد که با اثرات مجاورت به گرافین فرومغناطیس یا حتی ابررسانا تبدیل شود که این امر گرافین را در علم اسپینترونیک مورد توجه قرار داده است.

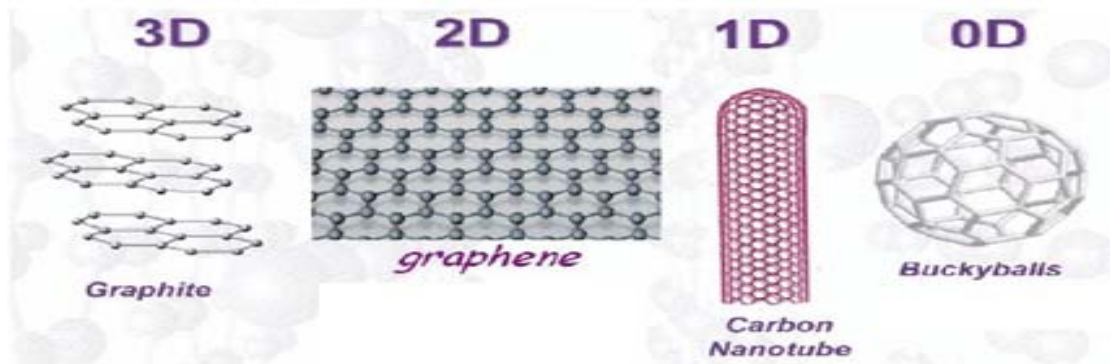
یک موضوع بسیار جالب و ویژگی قابل اندازه‌گیری در علم اسپینترونیک، رسانش کوانتومی می‌باشد. افت و خیزهای غیرتعادلی جریان که از گسسته‌بودن حاملان بار ایجاد می‌شوند (نوفه شلیکی) ابزار قابل اندازه‌گیری دیگری هستند که اطلاعاتی از سیستم به ما می‌دهند که از اندازه‌گیری جریان نمی‌توان بدست آورد. رسانش کوانتومی و نوفه شلیکی که مطالب اصلی این پایان‌نامه هستند در فصلهای ۴ و ۵ به تفصیل بررسی می‌شوند.

گرافین، یک لایه دوبعدی از اتم‌های کربن است که در یک ساختار زنبور عسلی چیده شده است. این ماده دوبعدی که مانند نیمه‌رسانای با گاف صفر رفتار می‌کند به دلیل داشتن الکترونهای دیراک گونه نسبیتمتمایز از همه مواد رفتار می‌کند. در واقع گرافین دارای ویژگی‌های قابل ملاحظه و متفاوت از نیمه‌رساناهای معمول هست که ریشه در ساختار گرافین دارد. برای آشنایی بیشتر با این ماده بهتر است که ساختار این ماده را مرور کنیم.

کربن جزء مهمترین عناصر در جدول تناوبی می‌باشد که بسته به نوع هیبریداسیون تشکیل دهنده، قابلیت شکل

Electric-Field Effec^۶

Spin-Flip^۷



شکل ۱-۰: انواع ساختارهای کربنی.

گرفتن به گونه‌های مختلف را دارد. برخی از این گونه‌ها همانطور که در شکل (۱-۰) نشان داده شده است، شامل گرافیت و الماس که از زمان‌های باستان شناخته شده، فلورنس سومین شکل کربنی کشف شده در سال ۱۹۸۵ و نانولوله‌های کربنی تک جداره و چند جداره که به ترتیب در سال‌های ۱۹۹۱ و ۱۹۹۳ کشف شدند. با وجودی که در سال ۱۹۹۱ فهمیده بودند که نانولوله‌ها از پیچادن لایه گرافین دو بعدی تشکیل می‌شوند تلاش برای ساخت گرافین تا سال ۲۰۰۴ میلادی ناموفق و در عین حال که امکان پایدار بودن این پوسته گرافینی دو بعدی از لحاظ تئوری [۱۶]، [۱۷]، [۱۸] ناممکن بود.

در سال ۲۰۰۴ میلادی، گروهی از فیزیکدان‌های دانشگاه منچستر^۸، به سرپرستی اندری گایم^۹ و کاستانوسولو^{۱۰} موفق به ساخت نازکترین ماده از طریق استخراج آن از گرافیت شدند [۱۹] و این کشف منجر به انقلاب بزرگی در حوزه‌ی ماده چگال شد. گایم و شاگرد فوق دکترش، نووسلو با ساخت آن موفق به دریافت جایزه نوبل ۲۰۱۰ میلادی شدند.

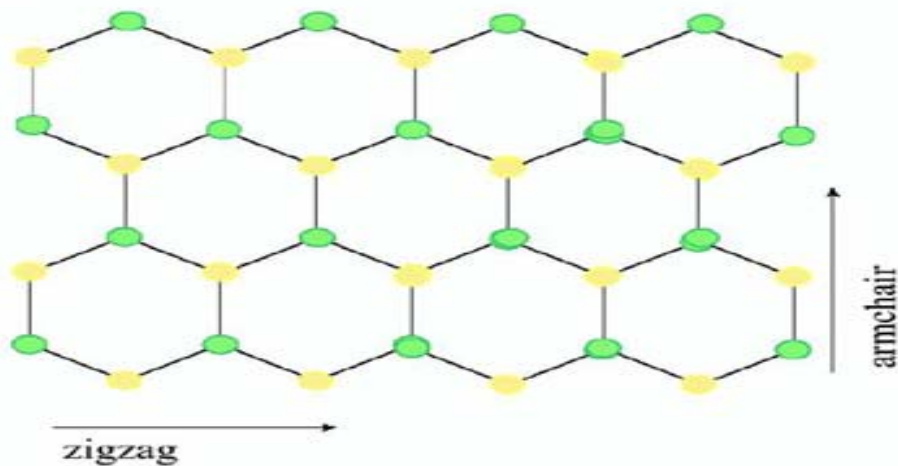
آنها با استفاده از یک گرافیت سه بعدی و با استفاده از تکنیک خراش میکرومکانیکی^{۱۱} روی سطح سیلیکونی، یک پوسته‌ی تکی نازک از گرافیت (گرافین دو بعدی) را استخراج کردند. دیدن این لایه نازک دو بعدی تنها با قرار گرفتن گرافین در بالای وافر سیلیکون *Sic* با انتخاب ضخامت ۳۰۰ نانومتر در یک میکروسکوپ اپتیکی

Manchester University^۸

Andry Geim^۹

Kostya Novoselov^{۱۰}

Micromechanical Cleavage Methode^{۱۱}



شکل ۲-۰: نانوریبون‌های کربنی مشتق شده از گرافین که بسته به برش نانوساختار، ویژگی‌های مختلف دارند.

بخاطر اثرات داخلی ضعیف امکان پذیر است و جالب اینکه این کریستال اتمی دو بعدی تحت شرایط محیط پایدار است. این گونه‌ی دو بعدی که گرافین نام گرفته، توجه بسیاری از فیزیکدان‌ها را به خود جلب نموده و چشم‌اندازهای روشنی را برای صنعت الکترونیک باز کرده است.

از آنجا که گرافیت از انباشته شدن لایه‌های گرافین بر روی هم تشکیل شده، ممکن است این سؤال مطرح شود که چند لایه از گرافین را به عنوان یک گرافیت در نظر بگیریم. پارتوانز [۲۰] نشان داد که ساختار الکترونی به سرعت با تعداد لایه‌ها تغییر می‌کند و در ده لایه به حد سه بعدی گرافیت می‌رسد.

نانوساختارهایی که از گرافین بدست می‌آیند دارای ویژگی‌های حتی جالب‌تری هستند. نانوریبون‌های گرافینی، گرافین‌های شبه یک بعدی با پهنای باریک ($< 10nm$ پهنای) هستند و همانطور که در شکل (۲-۰) نشان داده شده است بسته به نوع برش، دو نوع لبه به نام‌های زیگزاگ و صندلی شکل وجود دارند. آزمایشها نشان می‌دهد که این نانوریبون‌ها، گپهای نواری از خود نشان می‌دهند که برای عمل ترانزیستور در دمای اتاق به کار می‌روند [۲۱]. همچنین نانوریبون‌های $10nm$ با روش‌های شیمیائی بدست آمده و ثابت شده این نانوریبون‌ها می‌توانند به صورت نیمه‌رساناهای با گپ انرژی که به صورت معکوس با پهنای نوار متناسب هستند [۲۲] رفتار می‌کنند.

آنچه که موجب اهمیت تحقیقاتی این ماده‌ی دو بعدی شده، خطی بودن طیف انرژی آن (البته در حد انرژی‌های پائین) می‌باشد که بسیار شبیه طیف میدان دیراک برای فرمیون‌های بدون جرم است. با توجه به خطی بودن طیف برای گرافین، مشاهده می‌شود که شبه‌ذره‌ها در گرافین خیلی متفاوت از آنچه در نیمه‌رساناها و فلزات معمول می‌بینیم، رفتار می‌کنند چرا که طیف انرژی در مورد نیمه‌رساناها و فلزات به صورت سهموی است. معادله‌ی دیراک، ذرات کوانتومی نسبیتی را با اسپین $\frac{1}{2}$ توصیف می‌کند. مشخصه‌ی اصلی طیف دیراک که از اصول اساسی مکانیک کوانتومی و تئوری نسبیتی حاصل می‌شود، حضور پادذرات است. و جالب‌تر اینکه شبیه به آنچه در نظریه میدان‌ها داریم، حالات با انرژی مثبت و منفی (الکترون‌ها و پوزیترون‌ها) به طور عمیقی با هم ^{۱۲} در ارتباط هستند. این حالات بوسیله‌ی مؤلفه‌های مختلفی از توابع موج اسپینوری توصیف می‌شوند.

این واقعیت که حاملان بار در گرافین بوسیله‌ی طیف دیراک مانند توصیف می‌شوند نه بوسیله‌ی معادله‌ی معمول شرودینگر که برای ذرات کوانتومی غیر نسبیتی به کار می‌رود که به ساختار بلوری گرافین بر می‌گردد.

گرافین شامل دو زیرساختار هم‌ارز از اتمهای کربن است. جهش کوانتومی بین زیرساختارها منجر به تشکیل دو نوار انرژی و تقاطع این دو نوار نزدیک لبه‌های منطقه‌ی بریلوئن، طیف انرژی مخروطی را به وجود می‌آورد. توصیف دو مؤلفه‌ای برای گرافین خیلی شبیه توابع موج اسپینوری در الکترودینامیک کوانتومی است، با این تفاوت که اندیس اسپین برای گرافین به دو زیرساختار گرافین بر می‌گردد، نه به اسپین واقعی الکترون‌ها که در الکترودینامیک برای فرمیونهای نسبیتی تعریف می‌شود و معمولاً به آن شبه‌اسپین گویند. علت این نام‌گذاری این است که شبه اسپین به تابع موج برای دو ساختار زیر شبکه مربوط می‌شود، که در آن یک چرخش 2π از تابع موج شبه اسپین حول نقطه k در منطقه دو بعدی بریلوئن تابع موج اولیه را با علامت مخالف می‌دهد. به این دلیل شبه اسپین کاملاً شبیه اسپین واقعی در فضای واقعی عمل می‌کند. یادآور می‌شویم که چون شبکه زنبور عسلی براوه نیست، بنابراین این شبکه را می‌توان به صورت دو شبکه‌ی براوه مثلثی در هم تنیده شده در نظر گرفت.

ساختار شبه اسپین پیامدهای جالبی را در بردارد. برای مثال پدیده پارادوکس کلاین که در نتیجه کشف گرافین به تونل زنی کلاین تغییر نام پیدا کرد به طبیعت شبه اسپین بر می‌گردد اکنون با داشتن مفهومی به نام شبه اسپین، کاپرالیته را در گرافین تعریف می‌کنیم.

مشابه آنچه در الکترو دینامیک کوانتومی داشتیم اگر تصویر اسپین در جهت حرکت الکترونها یا حفره‌ها باشد، به ترتیب می‌گوئیم کایرالیته مثبت یا منفی دارد. در گرافین شبه‌ذره‌ها به وسیله‌ی هامیلتونین دیراک گونه‌ی $\hat{H} = \lambda v \sigma \cdot p$ توصیف می‌شود ($\lambda = +or-$). هامیلتونین دیراک گونه، رابطه‌ی خطی vp را برای الکترون در نوار رسانش و $-vp$ را برای نوار ظرفیت (شاخه‌ی حفره‌ی شبه‌ذرات) [۲۳] تعیین می‌کند در هر دو حالت، حالات الکترونی و حفره‌ای از لحاظ تصویر شبه‌اسپینی در جهت تکانه‌شان با هم فرق دارند که به ترتیب برای الکترونها، کایرالیته‌ی $\frac{\hat{p}}{p} = 1$ و برای حفره‌ها $\frac{\hat{p}}{p} = -1$ تعریف می‌شود که بر اساس همین تعریف به ذرات حامل بار در گرافین، ذرات کایرال نیز می‌گویند.

در مکانیک کوانتومی نسبیتی، کایرالیته در نتیجه‌ی تقارن ذره-پادذره به وجود می‌آید که خطی بودن طیف انرژی برای ذرات با جرم صفر را به دنبال دارد. کشف گرافین به ما این فرصت را می‌دهد که ذرات کایرال با طیف انرژی سهموی (غیر نسبیتی) داشته باشیم چرا که شبه‌ذره‌های با چنین ویژگی‌های غیر معمول در گرافین دولایه نیز دیده می‌شوند.

البته پدیده‌های شگفت‌انگیز دیگری در گرافین رخ می‌دهند که توجیه آنها، تنها در سایه‌ی الکترو دینامیک کوانتومی امکان پذیر است. به عنوان مثال آزمایش کلاین که تا مدت‌ها به دلیل عدم مشاهده پذیری، باطلنما نام گرفته بود در قالب ماده‌ای به نام گرافین امکان پذیر است. در واقع مشخصه مهم فرمیون‌های دیراک عدم حساسیت آنها نسبت به اعمال پتانسیل الکتروستاتیکی خارجی به خاطر اثر موسوم به تونل زنی کلاین [۲۳]، [۲۴] است که بیان می‌کند فرمیون‌های بدون جرم دیراک می‌توانند از هر سد پتانسیل هر چند شدیدی عبور کنند. آنچه که در این مقدمه ذکر شد، خلاصه‌ای از برخی ویژگی‌های جالب این ماده‌ی نسبیتی بود که قرار است در فصل‌های آتی به تفصیل شرح داده شود.

در فصل اول این رساله، به بررسی ساختار نواری گرافین پرداخته می‌شود سپس در فصل دوم، انواع تونل زنی مخصوصاً آزمایش کلاین یا همان باطلنمای کلاین توضیح داده می‌شود و در نهایت در فصل سوم محاسبه ترابرد کوانتومی با استفاده از فرمولبندی کوبو و لاندائور بوتیکر مورد بررسی قرار می‌گیرد.

در فصل چهارم ترابرد کوانتومی و نوفه شلیکی در اتصال NFN بررسی شده است محاسبات وجود یک اصل

طرد دیگری را نشان می‌دهد. چرا که می‌دانیم اصل طرد پائولی که بین الکترون‌های با اسپین موافق است در گرافین به دلیل کایرال بودن ذرات در محدوده‌ای که تونل زنی کلاین امکانپذیر است اصل طرد دیگری بین ذرات با اسپین مخلف وجود دارد. در ادامه، ترابرد وابسته به اسپین را در اتصال نامتناهی از NF ها بررسی شده است و نشان داده‌ایم که NFN می‌تواند نقش پلاریزر را داشته باشد و با داشتن تعداد نامتناهی از آنها می‌توان به الکترون‌های کاملاً قطبیده دسترسی پیدا کرد. در نهایت فصل نتیجه‌گیری به صورت خلاصه در فصل پنجم آورده شده است.

فصل اول

نظریه نواری گرافین

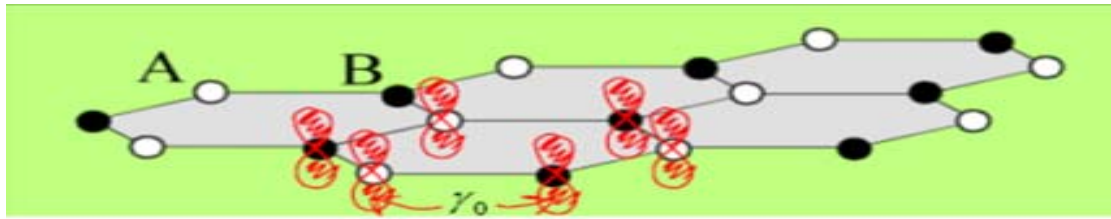
گرافیت یک نیمه فلز است که تا تقریب مرتبه ی اول از لایه های مستقل اتمهای کربن تشکیل شده است. فاصله ی این لایه های گرافینی که با نیروی ضعیف واندر والس در کنار هم قرار گرفته اند، 3.35 \AA است. هر اتم کربن در گرافیت شامل چهار الکترون ظرفیت بوده که سه تا از این الکترون هادر هیبریداسیون شرکت کرده و پیوندهای قوی با اتم های همسایه در صفحه تشکیل می دهند. تابع موج این سه الکترون را می توان به شکل زیر بیان کرد.

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_c(2s) + \sqrt{2}\psi_c(\sigma_i 2p)) \quad (1.1)$$

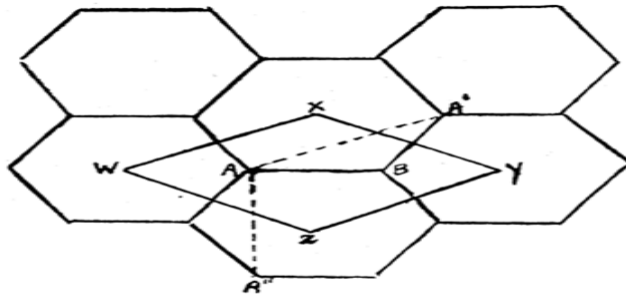
که $i = 1, 2, 3$ و $\psi_c(2s)$ تابع موج $2s$ کربن و $\psi_c(\sigma_i 2p)$ توابع موج $2p$ هستند.

از دو اربیتال مذکور تنها اربیتال s و دو تا از اربیتال های p در فرایند هیبریداسیون شرکت می کنند. هیبریداسیون sp^2 بین اربیتال s و p منجر به ساختار مثلثی صفحه ای با پیوند قوی σ با اتم های همسایه اش می شود. چهارمین الکترون که در حالت $2p_z$ می باشد و محور تقارنش عمود بر صفحه است، با اتم های همسایه در پیوند ضعیف π شرکت می کند. این اربیتال های π در شکل (۱-۱) در شبکه زنبور عسلی گرافین نشان داده شده اند. در ضمن فاصله ی بین اتم های کربن از هم مساوی و برابر 1.42 آنگستروم است.

سلول واحد شبکه، هگزاگونالهائی هستند که شامل دو پایه از اتم های نوع A و B هستند در واقع A و B اتم های



شکل ۱-۱: نمایش اریتمالی هیبریداسیون گرافین



شکل ۱-۲: ساختار شبکه‌ای زنبور عسلی گرافین

هم‌ارز کربن، منتها از دو زیرساختار هستند (در واقع هگزاگونال‌ها را به دو زیرساختار هم‌ارز مثلثی با اتمهای A و B در نظر می‌گیریم). باندها p_z و p_z^* بوسیله گاف بزرگ انرژی 12eV جدا شده‌اند. در شکل (۱-۲) این سلول واحد با $wxyz$ نشان داده شده است.

بردارهای اصلی شبکه عبارتند از

$$\vec{a}_1 = AA' = (a + a \cos 60, a \sin 60) = a\left(\frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) = (a'_x, a'_y) \quad (1.2)$$

$$\vec{a}_2 = AA'' = (0, -2a \cos 30) = a(0, -\sqrt{3}) = (a''_x, a''_y)$$

اکنون اگر بخواهیم بردارهای شبکه‌ی وارون را نیز محاسبه کنیم از ویژگی زیر

$$a_i \cdot b_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (1.3)$$

کمک می‌گیریم [۲۵]:

که با به‌کارگیری همین رابطه در محاسبه‌ی یکی از بردارهای شبکه‌ی وارون

$$\begin{cases} b'_x a'_x + b'_y a'_y = 2\pi \\ b'_x a''_x + b'_y a''_y = 0 \end{cases} \Rightarrow (b'_x, b'_y) = \left(\frac{4\pi}{3a}, 0\right) \quad (۱.۴)$$

و بردار دومی شبکه‌ی وارون به طریق مشابه بدست می‌آید:

$$(b''_x, b''_y) = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}) \quad (۱.۵)$$

اکنون با داشتن بردارهای منطقه‌ی وارون و سپس رسم ویگنر سایتز شبکه‌ی وارون، منطقه‌ی اول بریلوئن

بدست می‌آید.

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{3a}(2, 0), \vec{b}_2 = -\frac{2\pi}{3a}(2, 0) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}), \vec{b}_4 = -\frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}) \\ \vec{b}_5 &= \vec{b}_1 - \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), \vec{b}_6 = \vec{b}_3 - \vec{b}_1 = -\frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}) \end{aligned} \quad (۱.۶)$$

شبکه زنبور عسلی گرافین همراه با شبکه وارون آن در شکل (۳-۱) نشان داده شده است. لازم به ذکر است

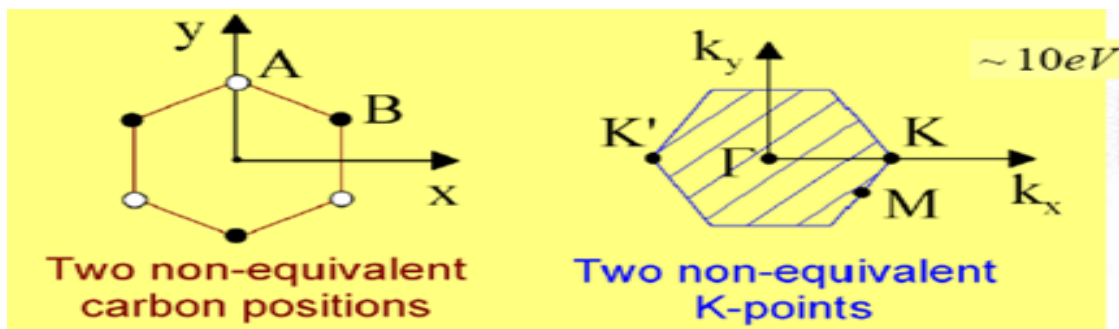
که در منطقه وارون، نقاط پرتقارن M, K, M' و Γ نشان داده شده است. اکنون با رسم عمودمنصف‌های

بردارهای b_i می‌توان به منطقه‌ی اول بریلوئن رسید که شکل آن همان 6 گوشه منتها با 90° درجه چرخش نسبت

به شبکه‌ی مستقیم است.

تا اینجا به ویژگی‌های ساختاری گرافین پرداخته شد تا بستر مناسب برای بررسی ویژگی‌های الکترونیکی آن

فراهم آید.



شکل ۳-۱: ساختار گرافین و منطقه وارونش

۱.۱ تقریب بستگی قوی

برای محاسبه‌ی ساختار نواری گرافین از تقریب بستگی قوی^۱ استفاده شده است. ممکن است این سؤال مطرح شود که چرا از روش بستگی قوی استفاده شده است. ما تا حدودی با مدل موج تخت آشنائی داریم این مدل یک تقریب ضعیف از رفتار الکترون در جامدات یونی است. در بسیاری جامدات، الکترون‌ها در مکان اتمی‌شان جایگزیده شده‌اند اما گاهی نیز به مکان‌های اتم‌های همسایه‌شان جهش می‌کنند. در روش بستگی قوی که مدل جامع‌تری از موج تخت است، علاوه بر انرژی موضعی، انرژی جهشی بین نزدیکترین همسایه‌ها نیز در نظر گرفته می‌شود.

یک مدل بسیار معمول از روش بستگی قوی، مدل نزدیکترین همسایه است و جملات جهشی^۲ تنها به نزدیکترین همسایه‌هایش محدود می‌شود. یادآور می‌شویم که کاربرد این مدل تنها زمانی است که همپوشانی بین توابع موج اتمی کوچک باشد.

اگر $\psi_{k,r}$ تابع موج بهنجار شده‌ی اربیتال $2p_z$ برای یک اتم باشد، تابع موج در تقریب بستگی قوی دارای شکل

$$\psi = \phi_1 + \lambda \phi_2$$

^۱ Tight-Binding Approximation

^۲ hopping

$$\phi_1 = \sum_A \exp 2\pi i (k \cdot r_A) \kappa(\vec{r} - \vec{r}_A) \quad (1.7)$$

$$\phi_2 = \sum_B \exp 2\pi i (k \cdot r_B) \kappa(\vec{r} - \vec{r}_B) \quad (1.8)$$

اولین مجموع برای ϕ_1 روی همه‌ی نقاط شبکه که زیرساختار A را می‌سازند و دومین مجموع روی همه‌ی نقاط تولید کننده‌ی زیرساختار از نوع B هستند.

برای محاسبات ویژه مقادیر هامیلتونین داریم [۲۶]:

$$H\psi = E\psi \Rightarrow H\phi_1 + \lambda H\phi_2 = E\phi_1 + \lambda E\phi_2 \quad (1.9)$$

$$\int d_\tau \phi_1^* H\phi_1 + \int d_\tau \phi_1^* H\phi_2 \lambda = \int d_\tau E\phi_1^* \phi_1 + \int d_\tau \lambda E\phi_1^* \phi_2 \quad (1.10)$$

$$\int d_\tau \phi_2^* H\phi_1 + \int d_\tau \phi_2^* H\phi_2 \lambda = \int d_\tau E\phi_2^* \phi_1 + \int d_\tau \lambda E\phi_2^* \phi_2$$

کمینه‌های بالا را به صورت زیر تعریف می‌کنیم [۲۶]:

$$\int d_\tau \phi_1^* H\phi_1 = H_{11}$$

$$\int d_\tau \phi_1^* H\phi_2 \lambda = H_{12} = H_{21}^*$$

(1.11)

$$\int d_\tau \phi_1^* \phi_1 = \int d_\tau \phi_2^* \phi_2 = S$$

$$\int d_\tau \phi_2^* \phi_2 = H_{22}$$

با جایگذاری تعاریف بالا

$$\begin{vmatrix} H_{11} - ES & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} - ES \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow E = \frac{1}{2S} \{H_{11} + H_{22} \pm (H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2\}^{\frac{1}{2}} \quad (1.12)$$

از تقارن مسئله در می‌یابیم که $H_{11} = H_{22}$ و $S = N$ از طرفی

$$H'_{11} = H'_{22} = \frac{1}{N} H_{11} = \frac{1}{N} H_{22}, H'_{12} = \frac{1}{N} H_{12} \quad (1.13)$$