دانشگاه پیام نور استان تهران

مرکز تهران شرق

دانشکده فیزیک

پایان‌نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته فیزیک گرایش حالت جامد

بررسی ترابرد الکتریکی در لایه گرافین در تقریب فاز اتفاقی

دانشجو:

منصوره نوروزی

استاد راهنما:

دکتر محمدرضا جعفری

استاد مشاور:

دکتر علیرضا صفارزاده

بهمن ماه ۱۳۹۱

بسم الله الرحمن الرحيم

اینجانب منصوره نوروزی .دانشجوی ورودی سال ۱۳۸۸ .مقطع کارشناسی ارشد

رشته فیزیک (حالت جامد)گواهی می نمایم چنان‌چه در پایان نامه خود از فکر، ایده و نوشته دیگری بهره گرفته‌ام با نقل‌قول مستقیم یا غیرمستقیم منبع و ماخذ آن را نیز در جای مناسب ذکر کرده ام .بدیهی است مسئولیت تمامی مطالبی که نقل‌قول دیگران نباشد بر عهده خویش می‌دانم و جوابگوی آن خواهم بود.

دانشجو تأیید می‌نماید که مطالب مندرج دراین پایان نامه (یا رساله) نتیجه تحقیقات خودش می باشد و در صورت استفاده از نتایج دیگران مرجع آن را ذکر نموده است.

نام و نام خانوادگی دانشجو:

منصوره نوروزی

تاریخ و امضاء:

اینجانب منصوره نوروزی دانشجوی ورودی سال ۱۳۸۸ .مقطع کارشناسی ارشد
رشته فیزیک (حالت جامد) .گواهی می‌نمایم چنانچه براساس مطالب پایان‌نامه خود اقدام به انتشار مقاله، کتاب، و. ...نمایم ضمن مطلع نمودن استاد راهنما، با نظر ایشان نسبت به نشر مقاله، کتاب، و. ..و به صورت مشترک و با ذکر نام استاد راهنما مبادرت نمایم.

نام و نام خانوادگی دانشجو:
منصوره نوروزی
تاریخ و امضاء:

(کلیه حقوق مادی مترتب از نتایج مطالعات، آزمایشات و نو آوری ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه متعلق به دانشگاه پیام نور می باشد.)

تقدیم به:

پدر و مادر و همسر مهربانم

و مانای عزیزم

قدردانی و تشکر

شکر و سپاس فراوان از پروردگار مهربان که توفیق تهیه این پایان نامه را با همیاری اساتید ارجمند بر من منت نهاد.

با تشکر ویژه و سپاس فراوان از اساتید ارجمند ***آقایان دکتر محمدرضا جعفری و دکتر علیرضا صفارزاده و دکتر بهرام بهرامی*** که در تهیه و ارایه این پایان نامه کمکهای شایان و قابل توجهی به من نمودند و همواره یاریگر اینجانب بودند.امیدوارم خداوند مهربان با لطف بیکران خود همواره یاریگرشان در تمامی مراحل زندگیشان باشد.

از ***آقای دکتر علی اصغر شکری*** نیز که با راهنمایی های ارزنده شان مرا یاری فرمودند تشکر و قدردانی می‌نمایم.لطف خدا رهنمون راهش باد.

در پایان از ***خانواده خود*** که همواره در تمام مدت تحصیلم مرا یاری نمودند بسیار تشکر می‌نمایم.

چکیده

ما در این رساله پدیده ترابرد در گرافین تک لایه در حضور مراکز بار ناخالصی از لحاظ تئوری مورد بررسی قرار دادیم. از تئوری ترابرد بولتزمن و تقریب زمان واهلش برای بدست آوردن هدایت در چگالی های مختلف ناخالصی و الکترون کمک گرفتیم.

اثر استتار حاملهارا به کمک تابع دی الکتریک استاتیک تقریب فاز اتفاقی وارد مساله کردیم و نقش ثابت دی الکتریک زیر لایه گرافین در تعیین مقدار هدایت سیستم تک لایه در نظر گرفته شد.

نتیجه این که محاسبه نشان داد که هدایت سیستم گرافین تک لایه با بزرگتر شدن زیر لایه بزرگتر می شود.

کلیدواژه :گرافین تک لایه,هدایت ,معادله ترابرد بولتزمن , تقریب فاز اتفاقی

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول:

گرافین و ساختار آن

۱-۱- مقدمه ۲

۱-۲- ویژگیهای گرافین ۳

۱-۳- روش ساده تهیه گرافین ۵

۱-٤- ساختار گرافین ۵

۱-۵- نتیجه‌گیری ۸

فصل دوم :

بررسی گرافین به عنوان یک گاز الکترونی دو بعدی

۲-۱- مقدمه ۱۰

۲-۲- فرمیون دیراک ۱۰

۲-۳- هامیلتونی و نوار های انرژی در گرافین ۱۲

۲-٤- پارامترهای مهم در گرافین ۱٦

۲-٤-۱- چگالی حالت ۱٦

۲-٤-۲- پارامتر بر هم کنش rs ۱۷

۲-۵- تابع پاسخ در نظریه بس ذره ای ۱۸

۲-٦- تقریب فاز اتفاقی RPA ۲۱

فصل سوم:

پراکندگی از ناخالصی

مقدمه ۲۳

۳-۱- مدل درود ۲۳

۳-۲- پراکندگی حامل‌ها ۲٤

۳-۳- آهنگ گذار ۲۵

۳-٤- زمان واهلش تکانه ۳۰
۳-٥- پتانسیل ناخالصی های یونیزه شده ۳۱
۳-٦- تقریب زمان واهلش ۳۳
۳-۷- انواع ناخالصی ٤۱
۳-۸- میانگین ترابردی زمان واهلش..... ٤٦

فصل چهارم:

جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

٤-۱- مقدمه ٤۸
٤-۲- محتوا..... ٤۸
٤-۲-۱- جمع بندی ٤۸
٤-۲-۲- نوآوری ٥۰
٤-۲-۳- پیشنهاداتی برای ادامه کار..... ٥۳
٤-۲-٤- جنبه کاربردی پایان نامه ٥۳
پیوست ها ٥٤
مراجع ٥٥

فهرست شکل ها

عنوان **صفحه**

شکل(۱-۱): آلوتروپ کربن..... ۳
شکل (۱-۲):تک لایه های گرافین ۳
شکل (۱-۳): تبدیل گرافیت به گرافین..... ٤
شکل (۱-٤): ابزار مورد نیاز تهیه گرافین به روش ساده..... ٥
شکل (۱-٥): بردارهای بسیط و بردارهای نزدیکترین همسایه ٦
شکل (۱-٦): بردارهای شبکه وارون b2وb1 قسمت هاشور خورده منطقه بریلوئن..... ۷
شکل (۲-۱-الف): در قسمتA ساختار نواری گاز الکترونی دو بعدی، قسمتCساختار نواری گرافین. ۱۱
شکل (۲-۱- ب)حرکت الکترون در گرافین..... ۱۲
شکل (۲-۲): ساختار نواری گرافین در منطقه‌ی بریلوین ۱٥
شکل (۲-۳): تک نقطه تلاقی نوارهای انرژی ذرات باردار در فضای فاز، که به نقطه دیراک معروف است. ۱٥
شکل (۲-٤): چگالی حالت گرافین بر حسب انرژی..... ۱۷
شکل (۳-۱): برهمکنش بسته موج با پتانسیل..... ۲٥
شکل (۳-۲): نمایش تکانه..... ۳۰
شکل(۳-۳): سیستم مختصات نمایش دهنده فرآیند پراکندگی.تکانه حامل فرودیp ,تکانه حامل پراکنده شده p و نیرو f می باشد. ٤۰
شکل (۳-٤): زاویه بین تکانه فرودی و پراکنده شده..... ٤۲

فهرست نمودارها

عنوان **صفحه**

نمودار (٦-١): رسانندگی بر حسب چگالی برای سه ماده هوا و SiO_2 و sic روی گرافین با زیر لایه ثابت SiO_2 ..... ٥١

نمودار (٤-٢): رسانندگی بر حسب موقعیت بار ناخالصی(d)برای چگالی‌های مختلف ٥٢

فهرست علائم اختصاری

$\mathbf{a_1}$ ..... بردار پایه

$\mathbf{b_1}$ ..... بردار شبکه وارون

$\mathbf{e_1}$ ..... بردار نزدیکترین همسایه

ϑ ..... سرعت

H_{TB} ..... هامیلتونی

$g(E)$ ..... چگالی حالت

r_s ..... پارامتر برهم کنش

k ..... ثابت دی الکتریک زیر لایه ایموثر

ϵ_1 ..... ثابت دی الکتریک زیر لایه

$\emptyset_{ind}$ ..... پتانسیل قطبش القایی

$\emptyset_{ext}$ ..... پتانسیل خارجی

ε ..... تابع پاسخ دی الکتریک

k_0' ..... آهنگ پراکندگی از k_0 به $s(k,k_0')$

$\tau(k_0)$ ..... زمان واهلش تکانه

$f(r,k,t)$ ..... تابع توزیع

$\mu(T,n)$ ..... پتانسیل شیمیایی دمای محدود

$V^{(\alpha)}(q,d)$ ..... عناصر ماتریسی پتانسیل پراکندگی بین یک الکترون و ناخالصی برای برهم کنش کولنی

$\varepsilon(q)$ ..... تابع دی الکتریک استاتیکی استتار (پوششی)در تقریب RPA

q_s ..... بردار موج موثر گرافین دو بعدی

فصل اول:

گرافین و ساختار آن

در این بحث با پیشینه گرافین و ساختار آن آشنا خواهیم شد.

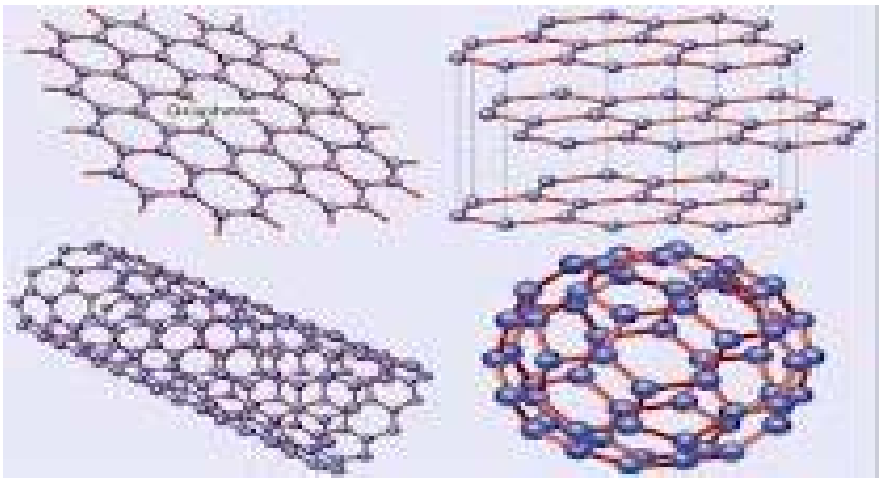
۱-۱- مقدمه

کربن یکی از مهمترین عناصر در جدول تناوبی است.کربن عنصر اصلی حیات در زمین است به طوری که تمامی موجودات زنده از ترکیبات آلی (کربنی)تشکیل یافته اند.کربن علاوه بر فراهم کردن امکان حیات با قابلیت ایجاد نانوساختارهای هندسی مختلف جایگاه خود را به عنوان عنصری موثر در پیشرفت علم و صنعت مسلم نموده است.

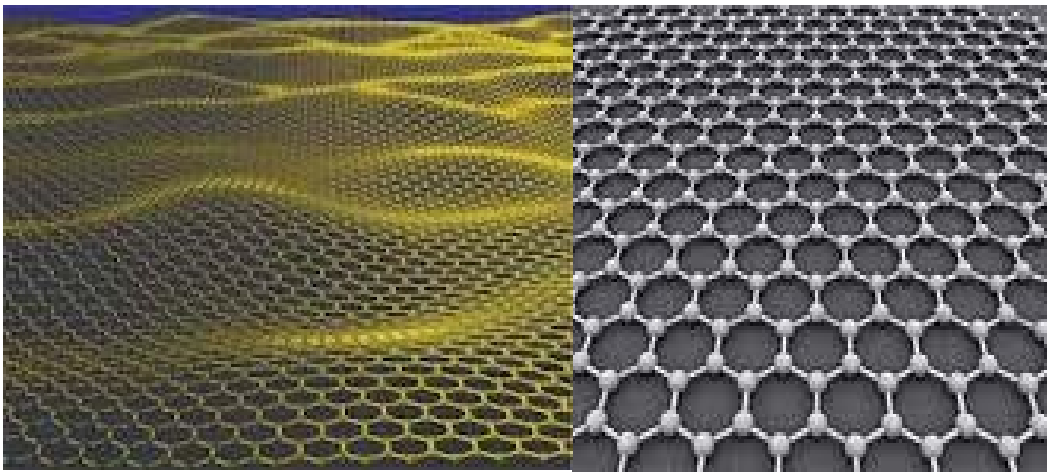
ساختارهایی از قبیل الماس و گرافیت (شکل (۱-۱))سالهاست مورد استفاده بشریت بوده و بعضی دیگرمانند نانولوله ها (شکل (۱-۱))و فولرین ها (شکل (۱-۱))در سالهای اخیر کشف و استفاده از آنها تحقق یافته است. شکل دو بعدی کربن گرافین[1] (شکل (۱-۱))نامیده می شود و ممکن است بهترین آلوتروپ قابل مطالعه کربن از لحاظ نظری باشد.

گرافین تک لایه برای اولین بار در سال۲۰۰٤ توسط گروه نووسلف[2] تولید و گزارش شدواولین بار در اواخر سال ۲۰۰٤ به روش مکانیکی از گرافیت جدا شد.در واقع گرافین از مدتها قبل ساخته شده بود ولی چند دلیل سبب شدندکه این ماده کشف نشود. اول اینکه مشاهده این ماده خیلی نازک خیلی سخت بود. دوم اینکه مرمین و ویگنر اثبات کرده بودند که ماده دو بعدی نمیتواند نظم بلند برد داشته باشد[1968 مرمین[3]] در حقیقت ادعای آنها بر این بود که با کاهش ضخامت لایه، دمای ذوب آن ماده کاهش پیدا می کند و این موضوع باعث ناپایدار شدن یک سیستم بلوری و جزیره ای شدن و نهایتاً از هم پاشیده شدن سیستم دو بعدی می شود. به همین دلیل در طول این زمان سیستم تک لایه اتمی عملاً بخشی از ساختار سه بعدی در نظر گرفته می‌شده که با روی هم قرار گرفتن این لایه ها ساخته می‌شوند. گرافین اولین ماده دو بعدی است. گرافین (یا به طور دقیق گرافین تک لایه) یک صفحه دو بعدی از اتم های کربن در یک شبکه لانه زنبوری است.همان طور که در شکل (۱-۲) می-بینیم تک لایه های گرافین مانند سرزمینهای پهن می‌باشند و حاملهای متحرک لزوماً محدود در این لایه دو بعدی هستند.در این شکل لایه گرافین به شکل تخت (حالت ایده آل) و شکل موج دار (حالت عادی)را نشان می دهد.

[1] *Graphene*
[2] *Novoselov*
[3] *Mermin*



شکل(۱-۱): آلوتروپ کربن.



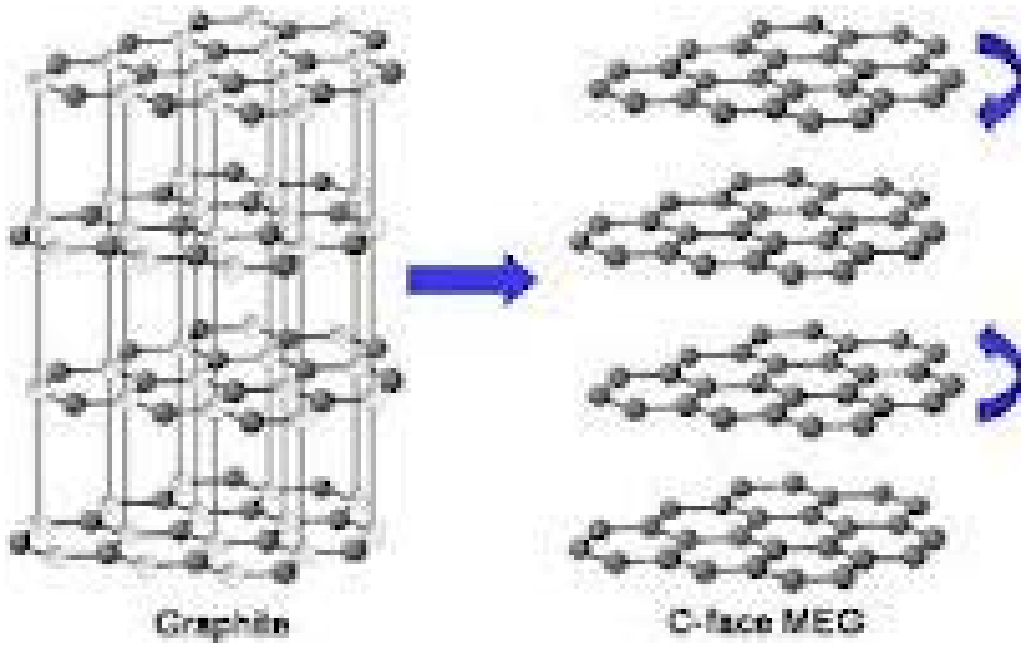
شکل (۱-۲):تک لایه های گرافین

۱-۲- ویژگیهای گرافین

گرافین دارای ویژگیهای بسیار جالبی می‌باشدبه همین دلیل توجه بسیاری از دانشمندان و محققان را به سوی خود جذب کرده است. این ویژگیها شامل ویژگی های الکتریکی، ویژگیهای مکانیکی ورسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی، چگالی بالا و تحرک پذیری حامل‌های بار، رسانندگی اپتیکی و... می‌باشند. در باره ویژگیهای مکانیکی می‌توان گفت که این ماده خیلی مقاوم در برابر فشار

است و می تواند فشار زیادی را تحمل کند. همچنین به خاطر ساختارگرافین یک نیمه رسانا با گاف انرژی صفر می‌باشد که اگر تحت ولتاژ ورودی[1] قرار گیرد به فلز تبدیل می‌شود.

در گرافیت هر کدام از اتم‌های چهارظرفیتی کربن، با سه پیوندِ کووالانسی به سه اتمِ کربنِ دیگر متصل شده‌اند و یک شبکه گسترده را تشکیل داده‌اند. این لایه خود بر روی لایه‌ای کاملاً مشابه قرار گرفته‌است و به این ترتیب، چهارمین الکترونِ ظرفیت نیز تشکیل یک پیوندِ شیمیایی داده‌است، اما پیوندِ این الکترونِ چهارم، از نوعِ پیوندِ واندروالسی است که پیوندی ضعیف است. به همین دلیل لایه‌های گرافیت به راحتی بر روی هم سر می‌خورند و می‌توانند در نوکِ مداد به کار روند. گرافین ماده‌ای است که در آن تنها یکی از این لایه‌های گرافیت وجود دارد و به عبارتی چهارمین الکترونِ پیوندی کربن، به عنوان الکترونِ آزاد باقی مانده‌است.همانطور که در شکل (۱-۳) می بینیم گرافینبه طور ساده یک لایه دو بعدی از اتمهای کربن و پوسته ای از یک گرافیت ساده (باحذف ملایم بعد سوم) است.



شکل (۱-۳): تبدیل گرافیت به گرافین

[1] $Gate : v_g$

۱-۳) روش ساده تهیه گرافین

تکه‌ای کوچک از ماده‌ی مهمِ گرافین را می‌توان در چند ثانیه تولید کرد. ابتدا باید نواری چسبناک را روی تکه‌ای از گرافیت فشرد و سپس آن‌را به قطعه نازکی از جنس سیلیکونِ بسیار خالص که به عنوان زیر لایه استفاده می‌شودچسباند. پس از جداکردن این نوار چسبناک، پوسته‌ای نقره‌ای‌رنگ به‌دست می‌آید که به شکل نقاطی روی سطحِ زیر لایه سیلیکونی را پوشانده است. این پوسته، ورقه‌هایی از جنس کربن با ساختارِ لانه‌زنبوری و ضخامتی در حدودِ ابعادِ اتم است که با نام "گرافین" شناخته می‌شود. اما ضخامت گرافیت بدست آمده توسط این روش برابر با ۱۰ نانو متر است که تقریبا برابر با ۳۰ لایه گرافین تک لایه است. لایه‌های گرافینی از ۵ تا ۱۰ لایه را به نام گرافین کم لایه و بین ۲۰ تا ۳۰ لایه را به نام گرافین چند لایه، گرافین ضخیم و یا نانو بلور های نازک گرافیتی، می‌نامند.

شکل (۱-٤): ابزار مورد نیاز تهیه گرافین به روش ساده

۱-٤- ساختار گرافین

ساختار لانه زنبوری می‌تواند به عنوان یک شبکه مثلثی با پایه هایی از دو اتم A, B مطابق شکل (۱-٤)در هر سلول واحد با بردار موج دو بعدی در نظر گرفته شود (شبکه ٦ ضلعی براوه نیست ولی می‌توان آن را به صورت دو زیر شبکه ی مثلثی براوه A,Bتوضیح داد.) این امر منجر به ایجاد منطقه بریلوئنی با دو نقطه $\boldsymbol{k}$ و$\acute{\boldsymbol{k}}$ (مطابق شکل (۱-۵)) می‌شود.این دو نقطه به عنوان نقاط دیراک شناخته می‌شوند. در این ساختار نزدیکترین فاصله کربن –کربن ۱/٤۲ آنگستروم می‌باشد,اما طول بردارهای شبکه بسیط (بردارهای $\mathbf{a_1}$ و $\mathbf{a_2}$ در شکل (۱-٤))۲/٤٦ آنگستروم می‌باشند.

.بردارهای شبکه در گرافین عبارتند از[سرما2011[1]]:

$$\mathbf{a_1} = (\frac{a}{2})(\sqrt{3}, 3)$$
$$\mathbf{a_2} = (\frac{a}{2})(-\sqrt{3}, 3)$$

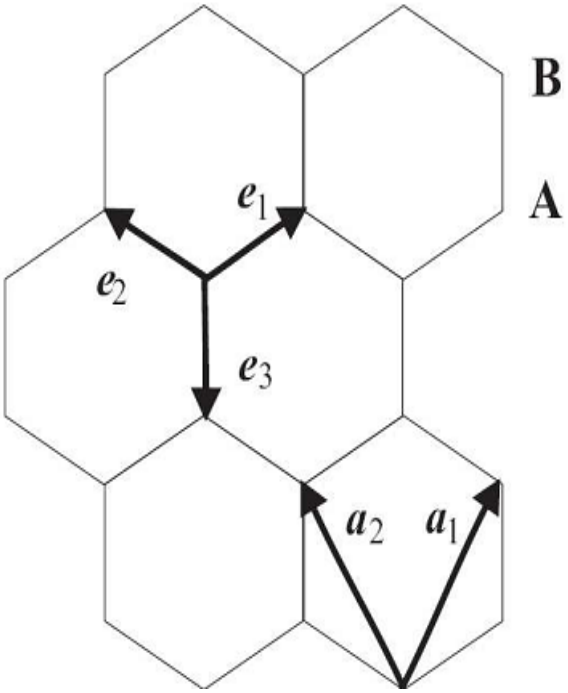
که در آن$a = 0.142nm$ فاصله میان اتمهای کربن می‌باشد.

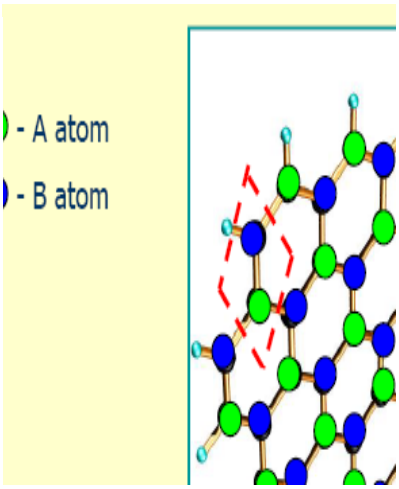
وبردارهای شبکه وارون مطابق شکل (۱ – ۵)عبارتند از:

$$\mathbf{b_1} = (2\pi/\mathbf{3}\sqrt{3}\boldsymbol{a}\ و\ 2\pi/3a)$$
$$\boldsymbol{b_2} = (-2\pi/\mathbf{3}\sqrt{3}\boldsymbol{a}\ و\ 2\pi/3a)$$

وسه بردار نزدیکترین همسایه مطابق شکل (۱ – ٤)عبارتند از[3] :

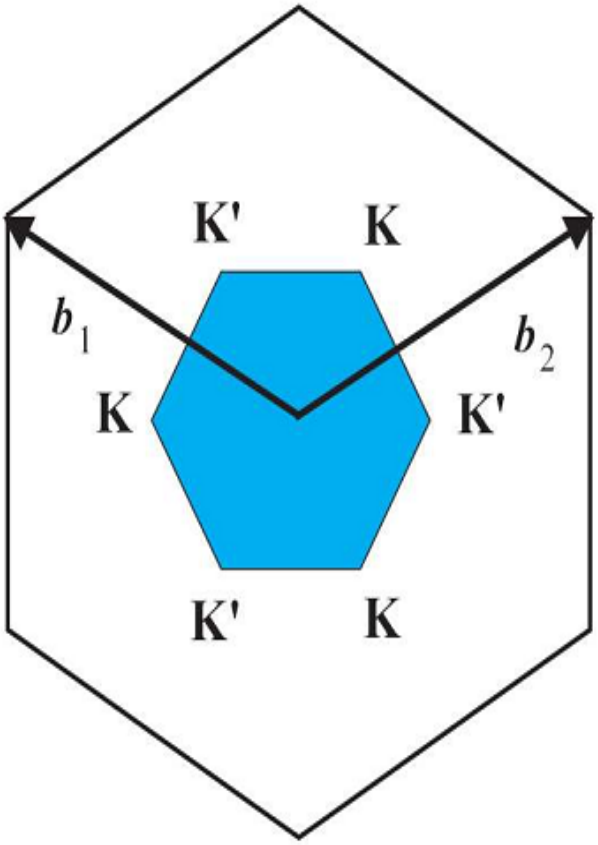
$$\boldsymbol{e_1} = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1)$$
$$\boldsymbol{e_2} = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 1)$$
$$\boldsymbol{e_3} = a(0, -1)$$





شکل (۱–۵): بردارهای بسیط و بردارهای نزدیکترین همسایه

[1] *Sarma*



شکل (۱-٦): **بردارهای شبکه وارون $\mathbf{b_2}$و$\mathbf{b_1}$ قسمت هاشور خورده منطقه بریلوئن**

گوشه ها معادل منطقه بریلوین هستند که نقاط دیراک نامیده می‌شوند.این گوشه های دیراک در ترابرد الکتریکی گرافین خیلی مهم هستند. الکترونهای گرافین در نزدیکی انرژی فرمی دارای پاشندگی انرژی بدون جرم دو بعدی، توصیف شده توسط مخروط دیراک، می‌باشند.[سرما[1] 2011]

[1] *Sarma*