بسمه تعالی

دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی

مدیریت تحصیلات تکمیلی

تعهدنامه اصالت اثر

اینجانب فاطمه پاکدل متعهد می‌شوم که مطالب مندرج در این پایان‌نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است و دستاوردهای پژوهشی دیگران که در این پژوهش از آنها استفاده شده است، مطابق مقررات ارجاع و در فهرست منابع و مأخذ ذکر گردیده است. این پایان‌نامه/ رساله قبلاً برای احراز هیچ مدرک هم سطح یا بالاتر ارایه نشده است. در صورت اثبات تخلف (در هر زمان) مدرک تحصیلی صادر شده توسط دانشگاه از اعتبار ساقط خواهد شد.

کلیه حقوق مادی و معنوی این اثر متعلق به دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی[1] می‌باشد.

نام و نام خانوادگی

فاطمه پاکدل

امضاء

تهران – لویزان – کدپستی ۱۶۷۸۸- صندوق پستی ۱۶۳-۱۶۷۸۵ – تلفن۹-۲۲۹۷۰۰۶۰ (داخلی۲۳۴۷)- نمابر۲۲۹۷۰۰۱۱ – پست الکترونیکی sru@sru.ac.ir

دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی

دانشکده علوم پایه

اثر گاف در رسانندگی الکتریکی گرافین دولایه

نگارش

فاطمه پاکدل

استاد راهنما: دکتر ایوب اسماعیل پور

استاد مشاور: دکتر مهدی سعادت

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته فیزیک حالت جامد

آبان ۱۳۹۱

تأییدیه هیئت داوران

تقدیم به،

اولین آموزگاران زندگی‌ام، که الفبای زیستن را برایم هجی کردند،

آنان که امروز من، تجسم دیروز از دست رفته‌شان است،

آنان که برای هموار کردن راهم، موهایشان سپید شد تا من روسفید شوم،

آنان که روشنی وجودشان گرمای امیدبخش حیات من است،

زیباترین بهانه‌های آفرینشم؛ پدر و مادرم.

سپاس؛

از زحمات بی دریغ، تدبیر عالمانه و بردباری استاد گرامی؛ **جناب آقای دکتر ایوب اسماعیل پور**، که در این مسیر بزرگوارانه راهنمای من بودند.

و نیز متشکرم از مشاوره و همراهی **جناب آقای دکتر مهدی سعادت**، که از ایشان بسیار آموختم.

و از تمام کسانی که در انجام این پروژه مرا یاری کردند...

چکیده

در این پژوهش به بررسی اثر گاف انرژی و پارامترهای ساختاری بر رسانندگی گرافین دولایه می‌پردازیم. با قرار دادن یک لایه گرافین بر روی گرافین تک لایه، گرافین دولایه، سیستمی متفاوت با خواص قابل تغییر، تشکیل می‌شود. یکی از جالب‌ترین خواص گرافین دولایه گاف انرژی قابل تغییر آن است. این گاف با اعمال بایاس بین دو لایه یا داپینگ یکی از لایه‌ها ایجاد می‌شود که منجر به اختلاف پتانسیل بین دولایه می‌گردد.

سیستم ابرشبکه شامل سدها و چاه‌های پتانسیل متوالی است، با تغییر پتانسیل سد، در یک پتانسیل بحرانی، گاف انرژی تولید می‌شود و رسانندگی به صفر می‌رسد. این پتانسیل بحرانی به پارامترهای ساختار ابرشبکه و انرژی ذره فرودی وابسته است. همچنین در ابرشبکه‌ی گرافین دولایه گاف‌دار، با تغییر بایاس و بی‌نظمی آن در بعضی اندازه‌های گاف، رسانش کمینه یا بیشینه می‌شود وحتی در بعضی موارد احتمال عبور به یک می‌رسد. با تغییر پتانسیل سد، پارامترهای ساختار، انرژی ذرات فرودی و بایاس اعمالی می‌توان عبور و انتقال ذرات را کنترل کرد.

واژه‌های کلیدی: گرافین دولایه، گاف انرژی، ابرشبکه.

فهرست مطالب

فصل اول: آشنایی با گرافین دو لایه ۱

مقدمه ۲

۱-۱ ناپایداری بلور دوبعدی ۷

۱-۲ ساخت گرافین تک لایه و دو لایه ۸

۱-۳ افزایش رسانایی الکتریکی درساخت گرافین‌های دو لایه‌ای ۱۱

۱-۴ الکترون های کایرال ۱۲

۱-۵ فرمیون های بالستیک ۱۳

۱-۶ کمینه رسانش ۱۴

فصل دوم : پارادوکس کلاین در گرافین تک لایه و دو لایه ۱۶

مقدمه ۱۷

۲-۱ داستان فیزیکی پارادوکس کلاین ۱۸

۲-۲ تونل زنی کوآنتومی ۲۵

۲-۳ گرافین دو لایه در برابر پله کلاین ۲۶

۲-۴ نقض بازتاب کلاین در گرافین دولایه ۲۹

فصل سوم: تقریب تنگ بست ۳۰

مقدمه ۳۱

۳-۱ ساختار بلوری و منطقه اول بریلوئن ۳۲

۳-۲ تقریب تنگ بست ۳۷

۳-۲-۱ ساختاربلوری دلخواه ۳۷

۳-۲-۲ گرافین تک لایه ۳۸

۳-۲-۳ گرافین دو لایه ۴۴

۳-۳ هامیلتونی مؤثر ۵۰

فصل چهارم: ساختار نواری و ایجاد گاف انرژی ۵۲

مقدمه ۵۳

۴-۱ روش‌های ایجاد گاف انرژی ۵۵

۴-۲ ترانزیستور اثر میدانی ۵۷

۴-۳ ساختار نواری در منطقه‌ی اول بریلوئن ۵۸

۴-۴ ساختار نواری در نزدیکی نقاط دیراک ۶۱

فصل پنجم: ابر شبکه و تاثیر گاف بر رسانندگی آن ٦٦

مقدمه ۶۷

۵-۱ مدل ۶۸

۵-۱-۱ هامیلتونی مرتبه ۴ ..... ۷۰

۵-۱-۲ هامیلتونی مؤثر (مرتبه ۲) ۷۶

۵-۲ نتایج عددی ۸۱

فصل ششم: نتایج و پیشنهادات ۹۷

پیوست‌ها ۱۰۰

هامیلتونی مؤثر ۱۰۱

محاسبه ماتریس گذار ۱۰۶

منابع ۱۱۰

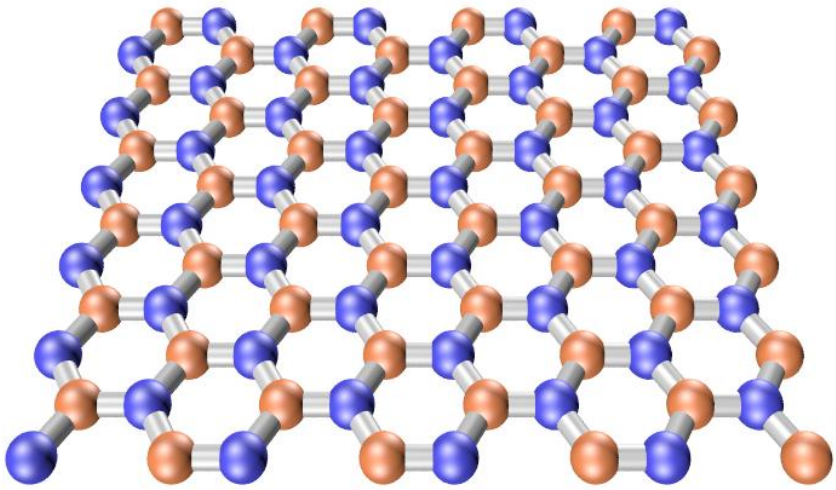
فصل اول:

آشنایی با گرافین دو لایه

مقدمه

کربن نقش یگانه‌ای در طبیعت بازی می کند .شکل‌گیری کربن در ستاره‌ها نتیجهٔ یکی شدن سه ذرهٔ آلفا، پدیده‌ای است که باعث به وجود آمدن تمام عناصر نسبتاً سنگین در عالم می‌شود [۱]. توانایی اتم‌های کربن در تشکیل شبکه‌های پیچیده [۲] (حداقل در شکل‌های شناخته شده‌اش)، اساس شیمی آلی و مبنایی برای وجود حیات در عالم است.

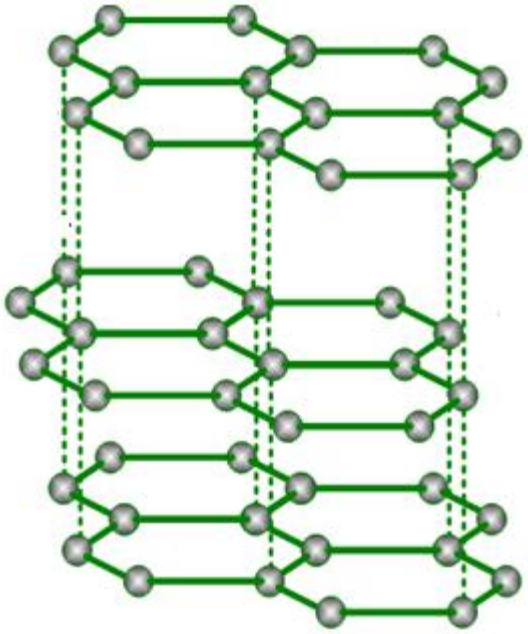
گرافین[1] به صفحه‌ی تک لایه‌ی تخت از اتم‌های کربن گفته می‌شود که در یک شبکه بلوری دو بعدی لانه زنبوری شکل، پکیده شده‌اند. گرافین همان صفحه‌های تشکیل دهنده‌ی ساختار گرافیت است و در ساختار دیگر مواد گرافینی نیز دیده می‌شود (شکل ۱-۱).



شکل (۱-۱) : شکل ساختاری گرافین(۲بعدی).

[1]- Graphene

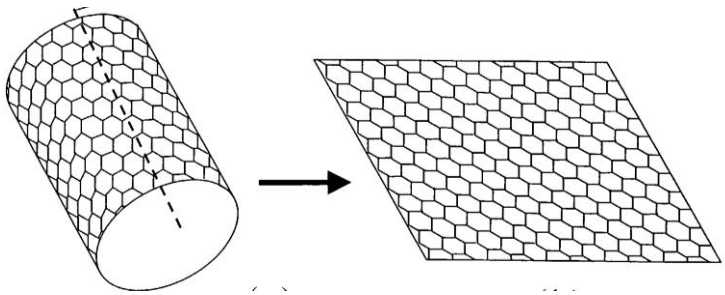
گرافیت[۲] یک الوتروپ[۳] سه بعدی کربن است که بعد از اختراع مداد در سال ۱۵۶۴ شناخته شد [۳] در گرافیت لایه‌های گرافین با نیروی ضعیف واندروالس[٤] روی هم قرارگرفته‌اند (شکل ۱-۲). این لایه‌ها می‌توانند نسبت به هم زاویه داشته باشند، اگر تعداد لایه‌ها از ۸ لایه تجاوز کند این ماده دیگر خواص گرافین را نخواهد داشت و گرافیت خواهد بود ولی تا ۴ لایه هم همچنان گرافین گونه عمل می‌کنند.



شکل (۱-۲) : شکل ساختاری ۳ لایه از گرافیت (۳بعدی).

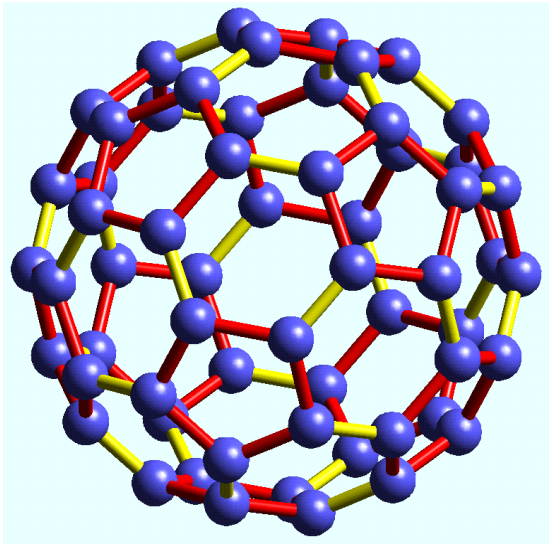
نانولوله‌های کربنی[۵] که از صفحات گرافین به شکل استوانه‌ای توخالی ساخته شده است آلوتروپ یک بعدی کربن به حساب می‌آیند.(شکل ۱-۳) خواص ویژه و منحصر به فرد آن از جمله مدول یانگ[۶] بالا و استحکام کششی خوب باعث شده که در دهه گذشته شاهد تحقیقات مهمی در کارایی و پرباری روش‌های رشد نانولوله‌ها باشد [۶-۴].

[2] -Graphite
[3] -Allotrope
[4] -Van der Waals
[5] -Carbon nanotubes
[6] - Young's modulus



شکل(۱-۳) : ساختار نانولوله کربنی(۱بعدی) که بصورت باز شده همان گرافین تک لایه را می‌دهد.

فولرن‌ها[7] آلوتروپ صفربعدی کربن، مولکول‌های قفس مانندند که عموماً با فرمول $C_{۶۰}$ شناخته شده‌اند. فولرن از شبکه پنج‌گوشه‌ها و شش‌گوشه‌ها تشکیل شده است [۱۰-۷]. یک فولرن برای آنکه بصورت یک شکل کروی بسته شود، باید دقیقا ۱۲ وجه پنج گوشه داشته باشد، ولی تعداد وجه‌های شش گوشه می‌تواند بطور گسترده‌ای تغییر کند (شکل ۱-۴).



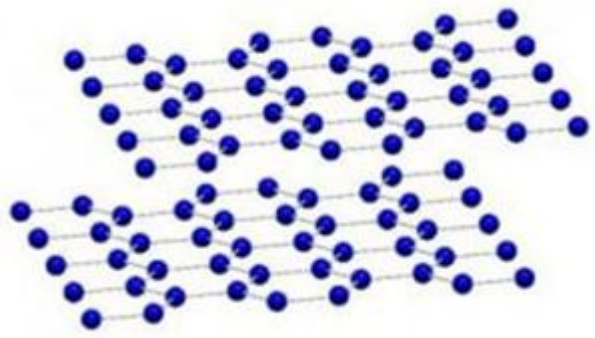
شکل (۱-۴) : شکل ساختاری فولرن (صفر بعدی).

[7] -Fullerenes

اما در این میان گرافین؛ این موجود دوبعدی، به علت خواص الکترونیکی بی نظیرش نقش مهمی در میان آلوتروپ‌های کربنی بازی می‌کند [۱۱].

با اینکه به صورت تجربی مدت کوتاهی است که این ساختار در آزمایشگاه به دست آمده است [۱۲،۱۳] ولی در تئوری سال‌هاست که در مورد آن مطالعه شده است [۱۶-۱۴]. این مطالعات برای بررسی خواص مواد بر پایه‌ی کربن (مانند گرافیت، نانو لوله‌های کربنی و ...) به کار برده می‌شد. سال‌ها بعد پژوهشگران به این نتیجه رسیدند که گرافین می‌تواند شبیه‌ساز خوبی برای نظریه‌ی کوانتومی نسبیتی و الکترودینامیک ۱+۲ بعدی، با انرژی‌های پایین‌تر در ماده چگال باشد [۱۹-۱۷]. با این حال تصور بر آن بود که گرافین یک ماده مطالعاتی است [۱۸] و نمی‌تواند به صورت آزاد در طبیعت وجود داشته باشد. رویداد بزرگ زمانی رخ داد که گرافین آزاد[8] ساخته شد [۱۲،۱۳] و از نظر تجربی دیده شد که حامل‌های بار در گرافین به صورت فرمیون‌های دیراک بدون جرم رفتار می‌کنند [۲۰،۲۱] از آن زمان توجه فیزیکدانان را به گرافین بیشتر جلب کرده است گرافین همچنین پلی بین فیزیک مادهٔ چگال والکترودینامیک کوانتومی برقرار میکند.

مدتی بعد دانشمندان آمریکایی موفق شدند یک گرافین دولایه[9] را ایجاد کنند که دارای یک نوار شکافنده است وبه این طریق راه جدیدی را در عرصه فناوری نانو الکترونیک گشودند. زمانی که دو لایه گرافین روی هم قرار گیرند ساختار "دولایه گرافینی" بوجود می‌آید.



شکل(۱-۵) : ساختار کلی گرافین دو لایه.

[8]- Free-Standing Graphene
[9] -Bilayer Graphene

این ساختار نیز همانند گرافین تک لایه دارای هدایت الکتریکی بالا است. دلیل این امر، سرعت بسیار بالای الکترون‌ها در حین عبور از ورقه گرافینی است.

بخش بزرگی از پژوهش‌ها بر روی گرافین دولایه، بررسی خواص مکانیکی و الکترونیکی آن است. گرافین دارای ویژگی‌های غیر معمولی می‌باشد که برخی از آنها عبارتند از:

- تاثیر بر هم کنش الکترون- الکترون در خواص حالت پایه [۲۲،۲۳].
- تونل زنی و بازتاب غیر عادی کلاین، که به ترتیب درگرافین تک لایه و دو لایه مشاهده می‌شود [۲۴،۲۵].
- تونل‌زنی در یک اتصال $n-p$ [۲۴،۲۶].
- اثر کوانتومی غیر عادی هال[10] در گرافین یک لایه (برای الکترون های بدون جرم دیراک تراز انرژی صفر لاندائو دارای نصف تبهگنی ترازهای دیگر است) [۲۷-۳۰،۲۰،۲۱] و دو لایه (تعداد حالت‌های با انرژی صفر دو برابر گرافین تک لایه است . درنتیجه QHE برای گرافین دو لایه با نیم رساناهای متداول و گرافین تک لایه متفاوت است) [۳۱-۳۴].
- رابطه انتشاری انرژی – اندازه حرکت که در تک لایه خطی و در دو لایه سهمی‌وار است [۳۴،۳۶].

یکی از مهم‌ترین عواملی که بر خواص الکترونی گرافین تاثیر می‌گذارد، بی‌نظمی‌های ساختاری است [۳۵،۳۷،۳۸]. بی‌نظمی ساختاری در گرافین می‌تواند افت و خیزهای دمایی آن نسبت به شبکه‌ی ایده‌آل، ناخالصی‌هایی از جنس اتم دیگر در شبکه، ناجایگاهی شبکه[11]، تهی‌گاهی شبکه[12] و غیره می‌باشد. بسیاری از این بی‌نظمی‌های ساختاری همیشه در نمونه‌های تجربی وجود دارند. بنابراین در نظر گرفتن این بی‌نظمی‌ها در بررسی نتایج تجربی و همچنین در مهندسی حائز اهمیت است. جدا از تاثیر بی‌نظمی‌های ساختاری برخواص الکترونی گرافین، برخی از محققان معتقدند که بی‌نظمی‌های ساختاری همچون افت و خیز دمایی بر پایداری چنین بلورهای دو بعدی‌ای موثراند [۳۹]. از این رو

[10] -Quantum Hall Effect
[11]- Dislocation
[12]- Vacancy

این پژوهش به بررسی چند نمونه از بی‌نظمی‌های ساختاری و تاثیر برخی از آنها بر خواص الکترونی گرافین می‌پردازد.

۱-۱ ناپایداری بلور دوبعدی

لاندائو[۱۳] و پایلز[۱۴] اولین کسانی بودند که نشان دادند بلور دوبعدی از نظر ترمودینامیکی پایدار نیست و نمی‌تواند وجود داشته باشد [۴۰،۴۱]. تئوری آنها بر این پایه استوار بود که در دمای محدود در بلورهای کم بعدی(۱بعدی و ۲بعدی) جابجایی گرمایی اتم‌ها با فاصله‌ی بین شبکه‌ای قابل مقایسه است [۴۲]. مرمین[۱۵] پس از آنها نتیجه‌گیری را گسترش داد [۴۳] و تمامی تلاش‌های تجربی در راستای ساخت بلور دو بعدی نیز این موضوع را تأیید می‌کرد.

فونون‌ها، کوآنتوم های جابجایی امواج اتمی هستند (تقریب هارمونیک). در سیستم‌های سه بعدی، این ایده به نوعی خودسازگار است، این گونه که نوسانات اتمی محاسبه شده در تقریب هارمونیک، حداقل در دماهای به قدر کافی پایین، کوچک است.

ولی در مسئله بلور دو بعدی تعداد فونون‌های با طول موج بلند در دماهای پایین واگرا می‌شود و بنابراین دامنه‌های فواصل بین اتمی محاسبه شده در تقریب هارمونیک واگرا می‌شوند [۴۴،۴۵]. با توجه به دلایل مشابهی پوستهٔ انعطاف پذیر واقع در فضای سه بعدی مچاله می‌شود، این به دلیل افت و خیزهای نامتعادل با طول موج بلند است [۳۹].

در سال ۲۰۰۴ به روش ورقه سازی میکرومکانیکی[۱۶] گرافین به عنوان اولین بلور دوبعدی ساخته شد. وجود این ساختار دوبعدی به ظاهر با تئوری در تناقض است. جدا از این که این مواد در واقع از درون یک ساختار ۳ بعدی پایدار بیرون کشیده شده‌اند [۴۶،۴۷]، به این پرسش که چرا وجود دارند اینگونه می‌توان پاسخ داد که این ساختارها به خاطر افت و خیز در بعد سوم (که در آزمایش تا

[13] -Landau
[14] -Peierls
[15] -Mermin
[16] -Micromechanical cleavage

حدود $10nm$ گزارش شده‌اند [۴۸،۴۹]) به زیاد شدن انرژی الاستیک می‌انجامد ولی افت و خیزهای گرمایی را کاهش می‌دهند. این فرایند انرژی آزاد کل را کاهش می‌دهد [۳۹]. این امر دلیل پایداری چنین ساختارهای دوبعدی است. به عبارت دیگر فرض پتانسیل هارمونیک درون صفحه‌ای[۱۷] برای گرافین درست نیست که قضیه‌ی ناپایداری برای آنها صادق باشد و به طور عملی وقتی که یک برهم کنش پیوندی قوی در بلورهای دوبعدی مثل گرافین وجود داشته باشد، این محدودیت چندان مشکل ساز نیست.

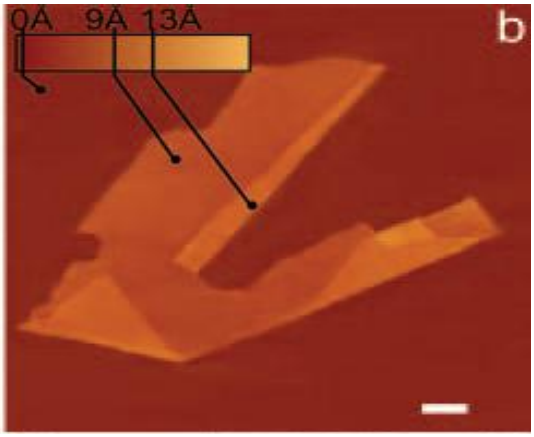
ازطرف دیگرنظریه پردازان نشان دادند که افت و خیزهای یاد شده می‌توانند با یک اندرکنش غیر هارمونیکی (غیر خطی) بین انرژی خمیدگی و کششی از بین بروند [۳۹،۵۰،۵۱]. در نتیجه پوسته‌های بلورین دوبعدی با یک سطح موج‌دار می‌توانند وجود داشته باشند. این به خودی خود باعث نوسانات یا زبری سطح دوبعدی می‌شود.

این امواج درگرافین تک‌لایه و دولایه مشاهده شده‌اند و در خواص الکترونیکی نقش مهمی بازی می‌کنند [۵۲]. این بررسی‌ها تازه شروع شده و هنوز جنبه‌های مختلف فونون‌های دوبعدی کم درک شده است. (کارهای کمی روی اسپکتروسکوپی رامان[۱۸] سطح گرافین وجود دارد) [۵۳،۵۴].

۱-۲ ساخت گرافین تک لایه و دو لایه

اولین بار گرافین با روش ورقه‌سازی میکرومکانیکی از توده‌ی گرافیت به دست آمد [۱۲،۱۳]. (شکل ۱-۲). با بهبود این روش توانستند بلورهای گرافین با کیفیت نزدیک به ۱۰۰ میکرومتر تهیه کنند [۱۳]. پیش از این، روش‌های مشابهی به کار گرفته شده بود ولی فقط قطعه‌های گرافیت ۲۰ تا ۱۰۰ لایه به دست آمده بودند [۵۵]. مشکل اساسی این بود که اگر گرافین هم بین نمونه‌های ساخته شده ایجاد می‌شد به سادگی قابل شناسایی نبود.

[17] - In-plane
[18] -Raman Spectroscopy



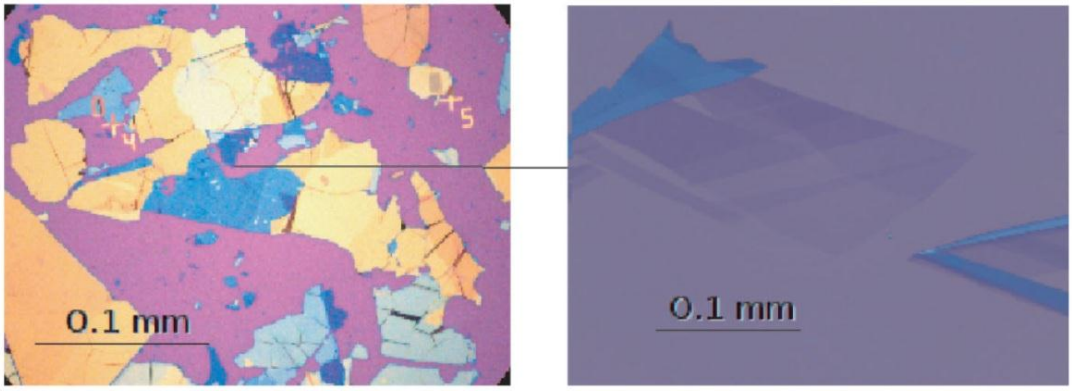
شکل(۱-۶): اولین عکس چاپ شده از گرافین . عکس به روش AFM. میله‌ی مقیاس، یک میکرومتر است. ارتفاع‌های مختلف نشان داده شده بر روی شکل ، نشاندهنده‌ی تعداد لایه‌های اتمی متفاوت از کربن است [۱۳].

اتفاق مهم در راستای ساخت گرافین زمانی رخ داد که معلوم شد گرافین در زیر میکروسکوپ نوری وقتی که بر روی یک لایه‌ی Si قرار بگیرد قابل مشاهده است به شرطی که نازکی لایه‌ی SiO_2 با دقت انتخاب شود (شکل ۱-۶). حتی اگر روش انجام این کار را به درستی و با جزئیات بدانیم [۱۳]، باز هم به دقت آزمایشگاهی و پشتکار زیادی برای بدست آوردن گرافین نیاز داریم. برای نمونه ۵ درصد تفاوت در نازکی لایه‌ی SiO_2 (315nm به جای 300nm مورد استفاده)، می‌تواند تک لایه‌ی گرافین را کاملا ناآشکار کند. لازم است گفته شود که بعدها کشف شد که گرافین در آشکارساز رامان[۱۹]، یک نشانه‌ی بسیار آشکار دارد (یک قله اضافه نسبت به نمونه‌ی چندلایه، بسته به جنس زیر لایه [۵۶]) که این روش برای تشخیص سریع نازکی لایه به کار می‌رود با این وجود هنوز هم برای دیدن اندازه و یکنواختی بلور به میکروسکوپ اپتیکی نیاز است.

پس از کشف گرافین، روش‌های دیگری نیز برای ساخت آن پیشنهاد شد (روش اپیتکسی[۲۰] [۵۷]، روش‌های شیمیایی [۶۰-۵۸] و روش‌های لایه نشانی بخار شیمیایی[۲۱] [۶۱،۶۲]) که هر یک از نظر

[19]- Raman microscopy
[20]- Epitaxial Growth
[21]- Chemical vapor deposition

هزینه‌ی ساخت و قابلیت انجام آزمایش، تفاوت‌هایی با یکدیگر دارند. ساخت گرافین در ابعاد بزرگ می‌تواند قدمی در راستای کاربردی کردن آن داشته باشد [۶۱].



شکل(۱-۷) : گرافین درزیرمیکروسکوپ نوری. چپ : گرافین یک یاچند لایه روی اکسید سیلیکون که کاملا در زیرمیکروسکوپ نوری متفاوت هستند . راست : گرافین تک لایه و چندلایه که مشخص است [۱۱].

جیمز تور[۲۲] و همکارانش از دانشگاه رایس[۲۳] علم ساخت گرافین دولایه‌ای باکیفیت را پیشرفت داده‌اند. آنها توانسته‌اند گرافین دولایه‌ای نیمه‌رسانا را با استفاده از کاتالیست نیکل گرم بصورت مستقیم روی بستر عایق رشد دهند.

گرافین معمولا روی یک کاتالیست فلزی، اغلب مس، رشد می‌یابد و آن را قبل از آنکه بتوان در یک مدار استفاده کرد، باید به یک بستر عایق الکتریکی مانند دی‌اکسید سیلیکون انتقال داد. این فرآیند انتقال زمان‌بر و پرزحمت است. اکنون محققان دانشگاه رایس نشان داده‌اند که می‌توان مقادیر بزرگی از گرافین دولایه‌ای را بطور مستقیم روی بسترهای عایق متنوع رشد داد. آنها فرآیند انتقال گرافین را حذف کرده‌اند و رشد صفحه‌های بزرگی از گرافین نیمه‌رسانا که برای یکپارچه‌سازی داخل ترانزیستورهای الگوداده شده[۲۴] آماده هستند، را تسهیل کرده‌اند.

[22] -James Tour
[23] -Rice University
[24] -Patterned