بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه لرستان

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

عنوان

رسانش در گرافین دولایه

نگارش

فاطمه نیازی داود

استاد راهنما

دکتر زینب رشیدیان

پایان‌نامه جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته **فیزیک**

بهمن ماه۱۳۹۳

همه امتیازات این پایان‌نامه به دانشگاه لرستان تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب در مجلات، کنفرانس‌ها یا سخنرانی‌ها، باید نام دانشگاه لرستان (یا استاد یا اساتید راهنمای پایان‌نامه) و نام دانشجو با ذکر مأخذ و ضمن کسب مجوز کتبی از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه ثبت شود. در غیر این صورت مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت.

تقدیم به پدر بزرگوار و مادر مهربانم

قدردانی و تشکر

حمد و سپاس بی قیاس به درگاه معبودی که آدمی را به فضیلت نطق و مزیت عقل از دیگر مخلوقات جهان ممتاز گردانید . و سپاس که توفیقم داد تا سرشارترین لحظه های زندگیم را در راه دانش سپری کنم . راهی که در آن وامدار بزرگانی چون اساتید و معلمان دلسوز و دوستان یار و همراه هستم .

اکنون که به لطف حق موفق به انجام پژوهش و نگارش این رساله شده ام بر خود لازم می دانم از زحمات استاد ارجمندم سرکار خانم **دکتر زینب رشیدیان** تشکر نمایم . امیدوارم در سایه ایزد منان همیشه سلامت و موفق باشند .

همچنین از اساتید بزرگوارم ، جنای آقای **دکتر باهر** و جنای آقای **دکتر سپه وند** که زحمت داوری این پایان نامه را بر عهده گرفتند بسیار تشکر می نمایم .

پدر و مادر مهرورزم را به سپاس محبت های بی دریغشان و خواهر و برادران مهربانم را که در تمام مراحل تحصیلی دلسوزانه در کنارم بوده و از هیچ کمکی دریغ نورزیدند سپاسگزارم . به امید آنکه بتوانم ذره ای از محبت های بی پایانشان را جبران کنم .

از دوستان عزیز و مهربانم که همواره مهر و محبتشان را نثار من کرده‌اند، تشکر می‌کنم.

چکیده

نام خانوادگی: نیازی داود **نام:** فاطمه

عنوان پایان‌نامه: رسانش در گرافین دولایه

استاد راهنما: دکتر زینب رشیدیان

استاد مشاور: -

درجه تحصیلی: کارشناسی ارشد **رشته:** فیزیک **گرایش:**

محل تحصیل: دانشگاه لرستان **دانشکده:** علوم پایه

تاریخ فارغ التحصیلی: ۲۵ بهمن ماه ۱۳۹۳ **تعداد صفحه:** ۶۰

کلید واژه ها: گرافین دو لایه ، فرومغناطیس ، رسانش ، گاف انرژی

چکیده: در این رساله، ویژگی های ترابردی اتصالات گرافین دو لایه را از لحاظ نظری بررسی می کنیم، که در آن یک لایه گرافین فرومغناطیس شده بین گرافین های نرمال ساندویچ شده است. رسانش سیستم بر اساس فرمول لاندائو - بوتیکر محاسبه می شود .در این اتصالات، ما می توانیم گاف انرژی و ساختار نواری گرافین دو لایه را با استفاده از ولتاژ بایاس بین لایه ها و میدان تبادلی القا شده بر روی لایه ها کنترل کنیم. همچنین مشخص گردید هنگامی که ولتاژ بین لایه ها با میدان تبادلی تنظیم می شود، با تنظیم اختلاف پتانسیل بین لایه ها، می توان قطبش اسپینی این جریان را کنترل کرد.

فهرست مطالب

۱ آشنایی با ساختار گرافین تک لایه ۶

۱.۱ ساختار گرافین تک لایه ۷

۲.۱ پایداری گرافین دو بعدی ۱۲

۳.۱ پارادوکس کلاین ۱۳

۴.۱ لزوم ایجاد گاف در گرافین ۱۵

۵.۱ روش های ایجاد گاف انرژی در گرافین تک لایه ۱۶

۲ گرافین دولایه ۱۸

۱.۲ ساختار شبکه و طیف انرژی ۱۹

۲.۲ گاف قابل کنترل در گرافین دو لایه ۲۴

۳.۲ گرافین دولایه و تفاوت آن با گرافین تک لایه ۲۵

۳ ترابرد در گرافین دولایه ۲۷

۱.۳ رسانش ۲۸

۴ نتیجه گیری **۴۸**

فهرست تصاویر

۱.۰ نوار گرافینی با لبه زیگزاگی و صندلی شکل [۵۴] ۴

۱.۱ در بالا: الماس (سه بعدی) و در پایین از راست به چپ: گرافیت (سه بعدی)،گرافین (دوبعدی)، نانو لوله (یک بعدی)، فولرین(صفر بعدی) ۸

۲.۱ ساختار الکترونی اتم های کربن ۹

۳.۱ هیبرید SP^2از اتمهای کربن ۹

۴.۱ ساختار شبکه به همراه ناحیه اول بریلوئن و طیف انرژی آن [۵۴] ۱۱

۵.۱ شبکه دو بعدی پایدار گرافین ۱۲

۶.۱ پارادوکس کلاین ۱۴

۱.۲ دو چیدمان برتر گرافین دو لایه . (a) چیدمان برنال یا AB (b) چیدمان AA [۵۲] ۱۹

۲.۲ ساختار شبکه ای گرافین دو لایه از دید سه بعدی و دید از بالا به همراه ناحیه اول بریلوئن متناظر با آن [۵۴] ۲۱

۳.۲ طیف انرژی به ازای V=۰ [۵۴] ۲۲

۴.۲ این شکل ساختار نواری گرافین دو لایه را در نزدیکی نقطه دیراک ، K ،
برای حالتی که بین دو لایه تقارن داریم ($V = ۰$) (خط چین) و در حالت عدم تقارن
($V \neq ۰$) (خط پر) نشان می دهد [۵۷] ۲۳

۱.۳ اتصالات گرافین دولایه در صفحه xy ۲۸

۲.۳ رسانش گرافین دو لایه در حضور میدان تبادلی و اختلاف پتانسیل ۴۴

۳.۳ رسانش گرافین دو لایه در حضور میدان تبادلی و اختلاف پتانسیل ۴۴

۴.۳ رسانش گرافین دو لایه در حضور میدان تبادلی و اختلاف پتانسیل ۴۵

۵.۳ رسانش گرافین دو لایه در حضور میدان تبادلی و اختلاف پتانسیل ۴۵

۶.۳ رسانش گرافین دو لایه در حضور میدان تبادلی و اختلاف پتانسیل ۴۶

۷.۳ رسانش گرافین دو لایه در حضور میدان تبادلی و اختلاف پتانسیل ۴۶

۸.۳ رسانش گرافین دو لایه در حضور میدان تبادلی و اختلاف پتانسیل ۴۷

مقدمه

کربن یکی از مهم ترین و جالب ترین عناصر جدول تناوبی است که نقش یگانه ای در طبیعت بازی می کند [۳۲] . توانایی اتم های کربن در تشکیل شبکه های پیچیده ، اساس شیمی آلی و مبنایی برای وجود حیات در عالم است. اتم های کربن بسته به نوع پیوند هیبریداسیون که با اتم های همسایه در شبکه تشکیل می دهند آلوتروپ های گوناگون کربنی با ویژگی های کاملا متفاوت از خود نشان می دهند. الماس و گرافیت [۱] اولین آلوتروپ های کربنی [۲] شناخته شده به زمان های قدیم برمی گردند و همچنین فولرین [۳] [۳۳] و [۳۴]و [۳۵] و نانو لوله های کربنی نیز که اخیرا کشف شده اند از آلوتروپ های کربنی محسوب می شوند. گرافیت از زمان های باستان شناخته شده و از انباشته شدن صفحاتی با ضخامت یک اتم ساخته شده ، نانولوله ها [۴] که از لوله شدن این صفحات و فلورین صفر بعدی است و با حلقوی شدن این لایه درست شده است همگی از موضوعات مورد توجه فیزیکدان ها و شیمیدان ها هستند. گرچه سال ها تلاش برای سنتز کردن و جدا کردن این لایه به ضخامت یک اتم بنابر نظریه ها و آزمایشات بی نتیجه اعلام شده بود تا اینکه در سال ۲۰۰۴ آندره گایم [۵] و کنستانتین نووسلف [۶] ، از دانشگاه منچستر موفق به ساختِ این ماده شده و نشان دادند که قضیهٔ مرمین–واگنر [۷] نمی‌تواند کاملاً درست باشد [۱] و [۳] و [۲۹] [۳۰] . قضیه مرمین – واگنر در مکانیک آماری و نظریه میدان های کوانتومی ، ساخت

[۱] Graphite
[۲] Carbon Allotropes
[۳] Fullerene
[۴] Nano Tubes
[۵] Andre Geim
[۶] Konestantin Novesolov
[۷] N.D.Mermin

ماده ی دو بعدی را در حالت پایدار غیر ممکن بیان می کند [۲۵] ، [۲۶] ،[۲۷] ، [۲۸] و همین نظریه سالیان سال ، شکست در سنتز این ماده را تایید می کرد. صفحه سنتز شده از گرافیت که به ضخامت یک اتم می باشد دو بعدی محسوب می شود و گرافین [۸] نام دارد. اهمیت سنتز این آلوتروپ دو بعدی کربنی به حدی بود که جایزهٔ نوبلِ فیزیکِ ۲۰۱۰ نیز به خاطرِ ساختِ این ماده ی دوبعدی به این دو دانشمند تعلق گرفت. چنین لایه دو بعدی نه تنها پیوسته است بلکه یک بلور با کیفیت بالا است ، به طوری که حامل های بار می توانند بدون پراکندگی مسافت های بالایی در حدود هزار فاصله بین اتمی را بپیمایند. چنین ساختار بلوری دو بعدی با حذف ملایم بعد سوم به دست آمده است و شدیدا پایدار است. دلیل این همه تاخیردر شناسایی و ساخت گرافین به دو مسئله بر مي گشت. نخست آن که از دید مطالعات نظري مكانيك آماري و نظريه گذارهاي فاز ، وجود گرافين به صورت آزادانه و پايدار از نظر ترموديناميكي بسيار بعيد به نظر مي رسيد [۴] . دوم آن كه ابزار تجربي مناسبي براي شناسايي و آشكار كردن آن وجود نداشت، با این حال در نهایت، امکان مشاهده ی گرافین با میکروسکوپ های نوری با استفاده از اثر اپتيكي، كه وقتی روی زیر لایه $Sio_۲$ قرار بگیرند به وجود آمد و با دقت بالا آشکارسازی شد [۵] . یکی از دلایل پایداری این ساختار دو بعدی رشد دادن آن روی زیر لایه است به طوری که گرافین به زیر لایه چسبیده و آزاد نیست. دلیل دیگر آن این است که سطح آن کاملا هموار نیست بلکه به خاطر افت و خیزهای گرمایی ناهمواری هایی دارد. گرافین همچنین به علت داشتن خواص فوق العاده در رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی، چگالی بالا و تحرک پذیری حامل‌های بار، رسانندگی اپتیکی و خواص مکانیکی به ماده‌ای منحصربفرد تبدیل شده است. این سامانه جدید حالت جامد به واسطه این

[۸] Graphene

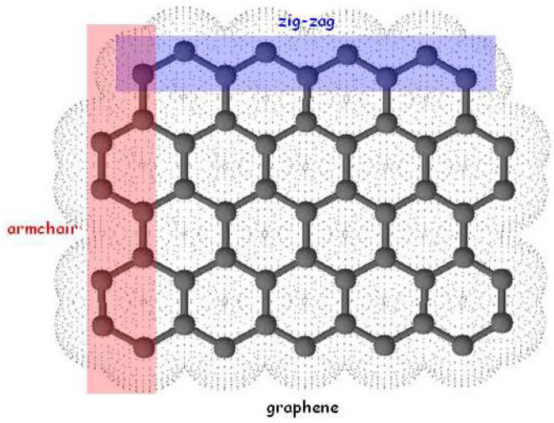
خواص فوق العاده به عنوان کاندید بسیار مناسب برای جایگزینی سیلیکون [۹] در نسل بعدی قطعه‌های فوتونیکی و الکترونیکی در نظر گرفته شده است و از این رو توجه کم سابقه‌ای را در تحقیقات بنیادی و کاربردی به خود جلب کرده است.

همچنین حاملان بار در گرافین ، مانند فرمیون های دیراک [۱۰] دارای خاصیت دستوارگی [۱۱] هستند به طوری که اسپین (شبه اسپین برای گرافین) یا در جهت حرکت ذرات (برای الکترون ها) و یا درخلاف جهت حرکت آنها (برای حفره ها) جهت گیری شده است. علاوه بر این ، گرافین تک لایه [۱۲] دارای ساختار نواری خطی می باشد که به دلیل این ساختار نواری انتظار می رود ویژگی های شبه نسبیتی در رفتار الکترونیکی گرافین ظهور یابد که سبب رفتارهای غیرعادی در گرافین می شود از جمله : اثر کوانتومی هال نیمه صحیح [۲۹] و [۳۰]، تونل زنی کلاین [۱۵] و وجود کمینه ی غیر صفر برای رسانندگی با وجود صفر شدن حامل های بار در نقاط دیراک [۹] [۱۲] [۱۵] . از ویژگی های بارز دیگر گرافین تحرک پذیری [۱۳] بسیار بالای آن است که حتی در دمای اتاق به حدود $۱۰^۵ \frac{cm^۲}{V.S}$ می رسد [۱۶] در حالی که بالاترین تحرک پذیری برای الکترون ها در مواد دیگر برای ماسفت [۱۴] $Si - Sio_۲$ در حدود $۲۵ \times ۱۰^۳ \frac{cm^۲}{V.S}$ در دمای اتاق گزارش شده است [۱۷] . از طرفی قابلیت کنترل نوع و حامل های بار توسط ولتاژ گیت [۱۵] یا آلایش شیمیایی [۱۸] و همچنین توانایی ایجاد گاف در آن به وسیله ی شکست تقارن زیر شبکه ها (رشد دادن آن روی زیر لایه ی Sic [۱۹] ، نیترید کربن [۲۰]) یا محدود کردن اندازه ی آن، گرافین را جایگزین مناسبی برای سیلیکون در ساختارهای نیم رسانا پیشنهاد کرده است .

[۹] Sillicon
[۱۰] Dirac Fermions
[۱۱] Chirality
[۱۲] Monolayer Graphene
[۱۳] Mobility
[۱۴] MOSFET (Metal Oxid Semiconductor Field Effect)
[۱۵] Gate Voltage

علاوه برتحرک پذیری ، گرافین دارای رسانندگی گرمایی بالایی است به طوری که رسانندگی گرمایی آن در حدود $۵/۳ \times ۱۰^{۳} \frac{W}{mK}$ در دمای اتاق است که از مقدار آن برای نانولوله های کربنی هم بیشتر است [۲۱] . ویژگی مهم دیگر گرافین در نانو نوارهای گرافینی بروز پیدا می کند . نانو نوارها [۱۶] در واقع نوارهایی با عرض و پهنای محدود از گرافین هستند که شکل لبه ی آنها می تواند به دو شکل متفاوت زیگزاگی [۱۷] و صندلی شکل [۱۸] باشند (شکل ۱) و خواص الکترونیکی آنها به شدت به نوع لبه بستگی دارد .

گرافین نه تنها می تواند به حالت آزاد وجود داشته باشد بلکه دو یا بیشتر از دو لایه از گرافین نیز می توانند به هم بچسبند و تشکیل گرافین چند لایه دهند. وقتی دو پوسته به هم بچسبند گرافین دو لایه تشکیل می دهند . گرافین دو لایه که ماده تحت بررسی این پایان نامه می باشد نیز مانند تک لایه نیم رسانای بدون گاف است اما با اعمال میدان الکتریکی خارجی عمود بر لایه ها می توان گافی قابل کنترل ایجاد کرد. این ویژگی منحصر به فردی است که آن را از تک لایه و سایر سیستم های دو بعدی متمایز می کند.



شکل ۱.۰: نوار گرافینی با لبه زیگزاگی و صندلی شکل [۵۴]

[۱۶] Nano Ribbons
[۱۷] Zigzag
[۱۸] Armchair

و اما ساختار این پایان نامه شامل چهار فصل می باشد. در فصل اول با ساختار گرافین تک لایه آشنا می شویم . در فصل دوم به معرفی گرافین دو لایه [۱۹] و ویژگی های خاص آن خواهیم پرداخت . گرافین دو لایه متشکل از دو لایه ی گرافین است که توسط نیروهای ضعیف وان دروالسی به هم جفت شده اند. بسته به نحوه ی قرار گرفتن دو لایه بر روی هم، برهم کنش بین لایه ها متفاوت خواهد بود . با در نظرگرفتن ساختار برنلی برای نحوه چیدمان دو لایه گرافینی و با استفاده از هامیلتونی تنگابست [۲۰] طیف انرژی آن را به دست می آوریم که همانند تک لایه طیف شبه نسبیتی دارد و بر خلاف آن طیفی سهموی است . از این رو فرمیون های دیراک در گرافین دو لایه خاصیت دستوارگی داشته و جرم دارند. در فصل سوم خواص ترابردی در گرافین دو لایه را بررسی کرده و رسانش در گرافین دو لایه را با مدل پراکندگی با استفاده از فرمول لاندائو - بوتیکر [۲۱] به دست می آوریم . و در پایان نتیجه گیری در فصل چهارم آورده شده است.

[۱۹] Bilayer Graphene
[۲۰] Tight-binding
[۲۱] Landauer-Buttiker

فصل ۱

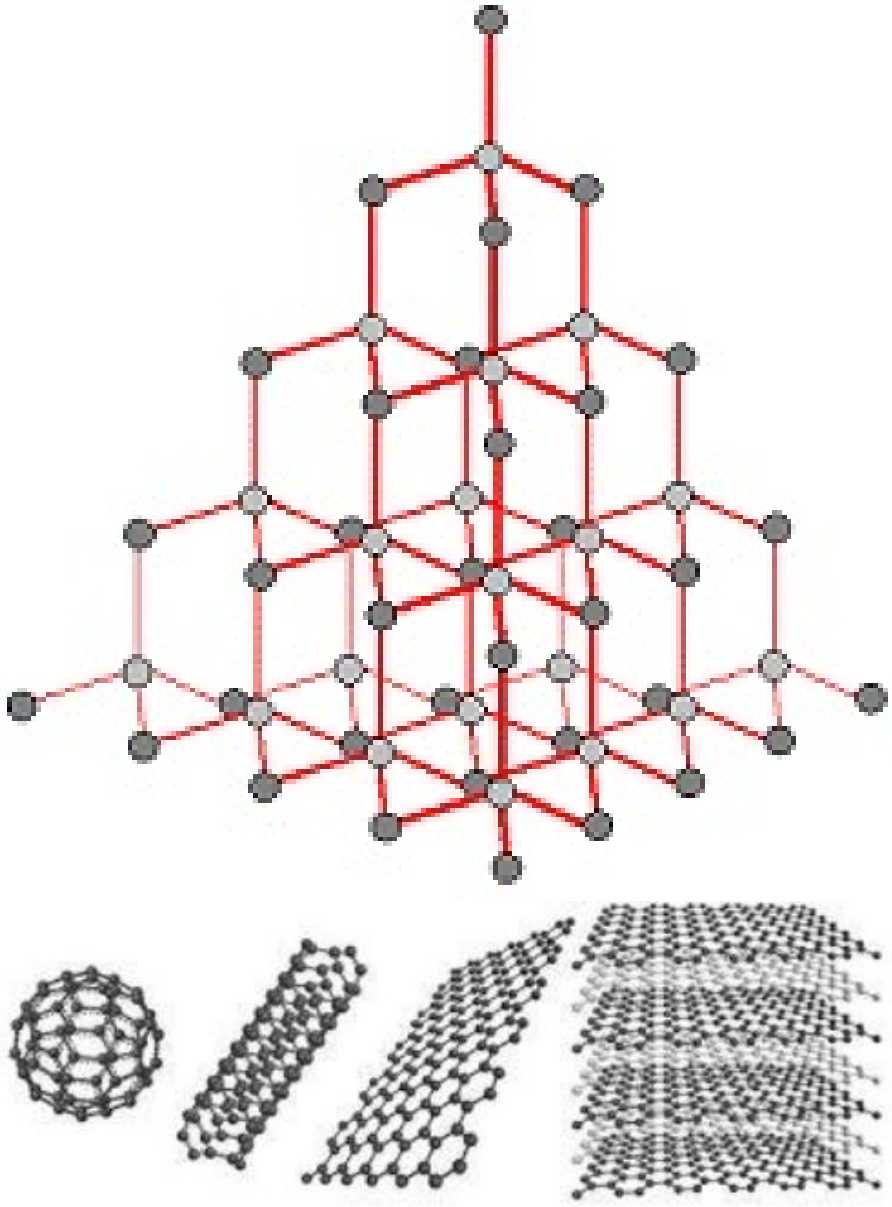
آشنایی با ساختار گرافین تک لایه

۱.۱ ساختار گرافین تک لایه

گرافین لایه ای دو بعدی از اتم های کربن است که تا حد ۱۰ لایه ، دو بعدی محسوب می شود. این ماده زیر بنایی برای ساخت نانو ساختارهای کربنی است که با انباشته شدن بر روی هم گرافیت سه بعدی را تشکیل می دهد . لایه های 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 بلورهای نازک گرافیتی ، می نامند. بر هم کنش بین این صفحات از نوع واندروالسی با فاصلهٔ بین صفحه‌ای ۰/۳۳۵ نانومتر می‌باشد. اگر تک لایه گرافینی حول محوری لوله شود نانو لوله کربنی شبه یک بعدی و اگر به صورت کروی پیچانده شود فلورین شبه صفر بعدی را شکل می‌دهد. شکل (۱.۱) انواع آلوتروپ های مختلف کربنی را نشان می دهد.

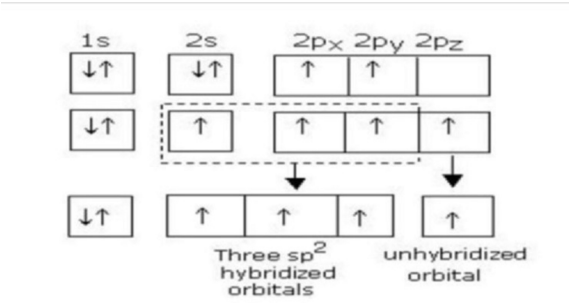
کربن با عدد اتمی ۶ یک عنصر چهار ظرفیتی پرکاربرد است. اتم های کربن از نظر ترتیب پر شدن اوربیتال ها دارای ساختار الکترونی مطابق شکل (۲.۱) هستند. اتم کربن چهار الکترون آزاد دارد که امکان تشکیل چهار پیوند را برای این اتمها مهیا می سازد. پیوندهایی که این اتمها تشکیل می دهند، در ترکیبات گوناگون به شکل های متفاوتی دیده می شوند و بنابراین خواص متفاوتی نیز ایجاد می کنند. به این صورت که هر اتم تنها با ۳ اتم دیگر پیوند می دهد [۳۷] و در نتیجه سه پیوند یگانه کوالانسی دارد. در این ساختارها ی گرافینی اتم کربن یکی از ظرفیتهای خود را مصرف نمی‌کند. این ظرفیت خالی که در واقع یک الکترون اضافی است، می تواند به صورت خارج از صفحه ای با دیگر اتمها تشکیل پیوند دهد.

همانطور که در شکل (۲.۱) مشاهده می شود سه اوربیتال P و یک اوربیتال S وجود دارد که دو



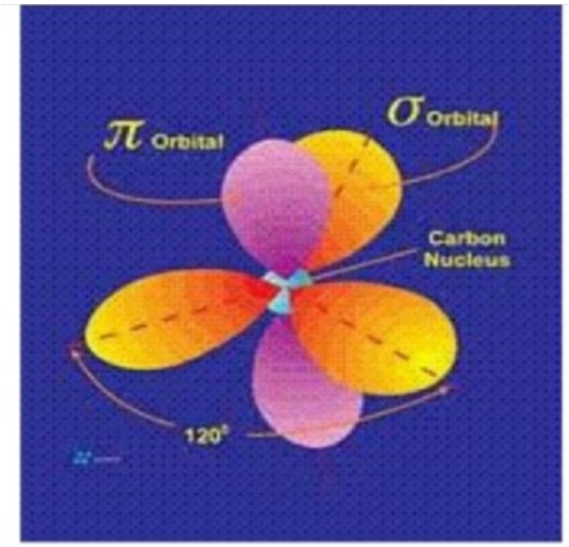
شکل ۱.۱: در بالا: الماس (سه بعدی) و در پایین از راست به چپ: گرافیت (سه بعدی)،گرافین (دوبعدی)، نانو لوله (یک بعدی)، فولرین(صفر بعدی)

تا از اوربیتال های P با اوربیتال S ترکیب شده و سه اوربیتال هیبریدی SP^2 تشکیل می دهند و در صفحه با اتم های همسایه پیوند قوی سیکما ایجاد می کنند. این پیوند باعث سختی ماده گرافین شده که



شکل ۲.۱: ساختار الکترونی اتم های کربن

حتی اگر صفحه گرافین خم شود ، پاره نمی شود . یک اوربیتال P_z باقیمانده که در هیبریداسیون شرکت نکرده و عمود بر صفحه است، مسئول رسانش در گرافین می باشد. شکل لانه زنبوری [۱] گرافین به خاطر سه اوربیتال هیبرید شده است که در صفحه با یکدیگر زاویه ی ۱۲۰ می سازند. این اوربیتال ها در ترابرد (انتقال) شرکت نمی کنند.



شکل ۳.۱: هیبرید SP^2 از اتمهای کربن

[۱] Honeycomb Lattice

بنابر نوع هیبریداسیون اتم های کربن در گرافین ، شبکه ای لانه زنبوری از اتم های کربن به وجود می آید. این شبکه براوه نیست ولی می توان آن را به صورت دو زیر شبکه مثلثی A و B که هر کدام یک شبکه براوه [۲] تشکیل می دهند در نظر گرفت. شکل (۴.۱) ساختار شبکه به همراه ناحیه اول بریلوئن و طیف انرژی آن را نشان می دهد . بردارهای پایه را می توان به صورت $a_۱ = \frac{a}{۲}(۳, \sqrt{۳})$ و $a_۲ = \frac{a}{۲}(۳, -\sqrt{۳})$ نوشت که $a \approx ۱/۴۲\mathring{A}$ فاصله بین دو اتم کربن است. بردارهای شبکه وارون [۳] متناظر هم با $b_۱ = \frac{۲\pi}{۳a}(۱, \sqrt{۳})$ و $b_۲ = \frac{۲\pi}{۳a}(۱, -\sqrt{۳})$ داده می شوند. بنابراین شبکه وارون نیز به صورت مثلثی و ناحیه بریلوئن به صورت شش ضلعی خواهد بود. محاسبات ساختار نواری گرافین با استفاده از مدل بستگی قوی برای نزدیکترین همسایه ها نشان می دهد که گرافین در حالت ذاتی یک نیم رسانای بدون گاف است. رابطه انرژی و بردار موج برای انرژی های کم نزدیک رئوس ناحیه بریلوئن خطی است که به جرم موثر صفر برای الکترون ها و حفره ها منجر می شود. به دلیل این رابطه پاشندگی خطی در انرژی های کم ،الکترون ها و حفره ها نزدیک این شش نقطه (که فقط دو تای آنها از هم متفاوتند) مانند ذرات نسبیتی ، که با معادله دیراک برای ذرات با اسپین $\frac{۱}{۲}$ توصیف می شوند، رفتار می کنند [۲۹] ، [۳۰] . چون این الکترون ها و حفره ها به فرمیونهای دیراک موسومند این شش نقطه ناحیه بریلوئن نقاط دیراک [۴] نامیده می شوند. رابطه ی $E - K$ به صورت $E \approx \hbar V_F|K|$ است که $V_f \approx ۱۰^۶ \frac{m}{s}$ سرعت فرمی است که به جای سرعت نور در معادله فرمیون های دیراک نشسته است.

اگرچه گرافین تک لایه دارای طیف خطی است اما این تنها ویژگی گرافین تک لایه نیست. گرافین تک لایه ، طول موج فرمی از مرتبه ۱۰۰ nm – ۵۰ ، چگالی حاملان در سطح $n = ۱۰^{۱۱} - ۱۰^{۱۲} cm^{-۲}$ ،

[۲] Bravais Lattice
[۳] Reciprocal Lattice
[۴] Dirac Point