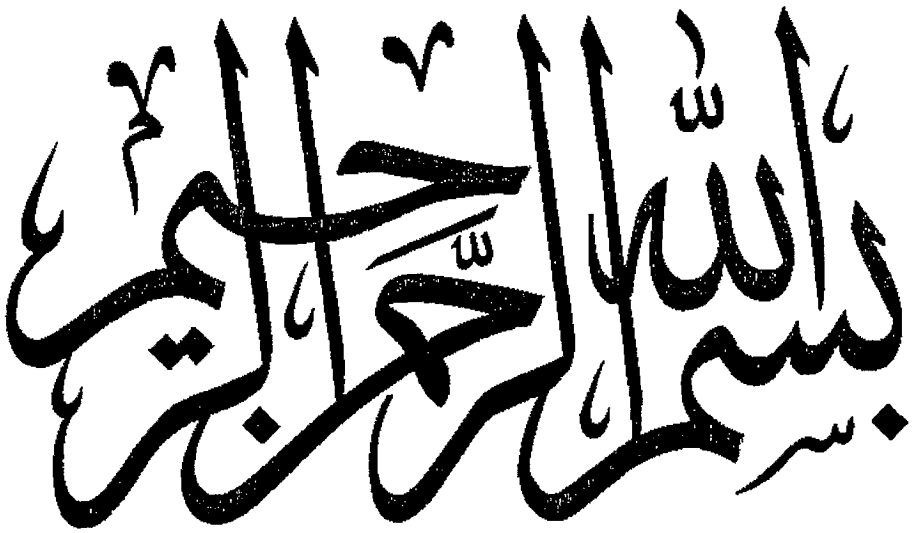


١٠٧٥٩٥

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه
گاوازنگ - زنجان

اثر مجاورت ابررسانایی در گرافین

پایان‌نامهٔ کارشناسی ارشد

لیلا مجیدی فردوطن

۱۳۸۷ /۹/ ۲۳

استاد راهنما: دکتر مالک زارعیان

مرداد ۸۷

۱۰۷۵۹۵

تقدیم به پدر و مادرم

قدردانی و تشکر

بر خود لازم می دانم که از استاد راهنمای ارجمندم جناب آقای دکتر زارعیان، به خاطر زحمات و راهنمایی‌های مفید و ارزنده‌شان سپاسگزاری کنم.

از آقای علی قربانزاده به خاطر بحث‌های علمی مفیدی که با هم داشتیم، تشکر می‌کنم. از دوستان بسیار خوبم که همواره مرا مورد لطف خود قرار داده‌اند، سپاسگزارم و آرزوی موفقیت روزافزون برایشان دارم. به خصوص از دو دوست صمیمی‌ام زهرا نعیمی و زهرا شمالی که همراهان همیشگی من بوده‌اند، ممنون و متشکرم.

از خانواده‌ی عزیزم، پدر و مادر بزرگوارم و خواهر و برادر مهربانم که در تمام مراحل زندگی یاور و پشتیبان من بوده‌اند، سپاسگزارم و برایشان بهترین آرزوها را دارم.

چکیده

در این پایان‌نامه ابتدا اثر مجاورت ابررسانایی را در یک گاز الکترونی دو بعدی بالستیک که به یک ابررسانا متصل است، بررسی می‌کنیم و با استفاده از روش معادلات بوگولیوبوف— دوژن در تقریب شبه کلاسیک (معادلات اندریف)، چگالی حالت‌های مجاورتی و دامنه‌ی جفت‌شدگی را در ناحیه‌ی نرمال با طول محدود محاسبه می‌کنیم تا در نهایت با نتایجی که برای سیستم گرافینی به دست می‌آوریم، مقایسه کنیم. سپس به بررسی اثر مجاورت ابررسانایی در سیستم گرافینی متناظر و به ویژه گرافین خالص می‌پردازیم و از معادلات دیراک— بوگولیوبوف— دوژن استفاده می‌کنیم. نشان می‌دهیم که حالت‌های مقید اندریف در سیستم گرافینی شامل حالت‌های منتشر شونده و میرا هستند، در حالی‌که در سیستم گاز الکترونی دو بعدی حالت‌های منتشر شونده سهم اصلی را دارند. ما به دست می‌آوریم که برخلاف گاز الکترونی دو بعدی بالستیک، چگالی حالت‌های مجاورتی در گرافین خالص وابسته به فاصله از محل اتصال گرافین— ابررسانا است و از این لحاظ گرافین خالص مانند یک اتصال پخشی رفتار می‌کند.

فهرست

چکیده . . . . . پنج

مقدمه . . . . . ده

۱ گرافین: فرم دوبعدی کربن

۱.۱ آلوتروپ‌های کربن و گرافین ۱

۲.۱ کشف گرافین ۲

۳.۱ مسئله‌ی پایداری در دوبعد ۴

۴.۱ ساختارشبکه‌ای گرافین ۵

۱.۴.۱ رابطه‌ی پاشندگی خطی ۶

۲.۴.۱ معادله دیراک ۱۰

۵.۱ الکترون‌های کایرال دیراک ۱۱

۶.۱ اثر کوانتومی هال در گرافین ۱۲

۱.۶.۱ ملاحظات شبه کلاسیکی فاز بری ۱۵

۷.۱ تونل‌زنی ذرات کایرال ۱۶
۱.۷.۱ تونل‌زنی کوانتومی ۱۶
۲.۷.۱ پارادوکس کلاین ۱۶
۳.۷.۱ عدم جایگزیدگی ۱۸
۸.۱ دستگاه‌های گرافینی ۱۹
۹.۱ نتیجه‌گیری ۲۱

۲ بررسی اثر مجاورت ابررسانایی در سیستم گاز الکترونی دوبعدی

۱.۲ اثر مجاورت ابررسانایی ۲۲
۲.۲ بازتاب اندریف ۲۴
۳.۲ معادله بوگولیوبوف— دوژن (BdG) ۲۷
۴.۲ تقریب شبه کلاسیک: معادله اندریف ۲۹
۵.۲ بررسی اثر مجاورت ابررسانایی در اتصال ابررسانا— نرمال (گاز الکترونی دو بعدی) . . . ۳۰
۱.۵.۲ پایه‌های حالت‌های پراکندگی در ناحیه‌ی نرمال ۳۱
۲.۵.۲ پایه‌های حالت‌های پراکندگی در ناحیه‌ی ابررسانا ۳۲
۳.۵.۲ حالت‌های مقید اندریف ۳۳
روش بدست آوردن انرژی حالت‌های مقید اندریف ۳۶
۴.۵.۲ حالت‌های پراکندگی خارج گاف ۳۹
۶.۲ محاسبه چگالی حالت‌ها در ناحیه نرمال ۴۲

۱.۶.۲ چگالی حالت‌ها برای انرژی‌های داخل گاف ($|\varepsilon| < \Delta$) ۴۳
۲.۶.۲ چگالی حالت‌ها برای انرژی‌های خارج گاف ($|\varepsilon| > \Delta$) ۴۵
۳.۶.۲ بررسی نتایج بدست آمده ۴۷
۷.۲ محاسبه دامنه‌ی جفت‌شدگی $F(r)$ در ناحیه‌ی نرمال ۵۰
۱.۷.۲ دامنه‌ی جفت‌شدگی $F(r)$ برای انرژی‌های داخل گاف ۵۰
۲.۷.۲ دامنه‌ی جفت‌شدگی $F(r)$ برای انرژی‌های خارج گاف ۵۳
۳.۷.۲ بررسی نتایج بدست آمده ۵۴

۳ بررسی اثر مجاورت ابررسانایی در گرافین

۱.۳ بازتاب اندریف در گرافین ۵۹
۲.۳ معادله‌ی دیراک— بوگولیوبوف دوژن $DBdG$ در گرافین ۶۴
۳.۳ لبه‌های گرافین ۶۶
۴.۳ بررسی اثر مجاورت ابررسانایی در اتصال SN گرافینی با لبه‌ی هموار ۶۸
۱.۴.۳ پایه‌های حالت‌های پراکندگی در ناحیه‌ی نرمال ۷۰
۲.۴.۳ پایه‌های حالت‌های پراکندگی در ناحیه‌ی ابررسانا ۷۱
۳.۴.۳ حالت‌های مقید اندریف ۷۵
۴.۴.۳ انرژی حالت‌های مقید اندریف در گرافین خالص ۷۸
۵.۴.۳ حالت‌های پراکندگی خارج گاف ۸۲
۵.۳ محاسبه‌ی چگالی حالت‌ها در ناحیه‌ی نرمال ۸۳

۱.۵.۳ روش عددی محاسبه‌ی چگالی حالت‌ها ۸۷

۲.۵.۳ بررسی نتایج بدست آمده ۸۸

۴ نتیجه‌گیری

پیوست ۱ حالت‌های پراکندگی خارج گاف ۹۹

۱.A حالت‌های پراکندگی خارج گاف برای وادی K ۹۹

۱.۱.A حالتی که شبه ذره‌ی فرودی الکترون‌گونه است ۹۹

۲.۱.A حالتی که شبه ذره‌ی فرودی حفره‌گونه باشد ۱۰۵

۲.A حالت‌های پراکندگی خارج گاف برای وادی K' ۱۰۷

۱.۲.A حالتی که شبه ذره فرودی الکترون‌گونه است ۱۰۷

۲.۲.A حالتی که شبه ذره فرودی حفره‌گونه باشد ۱۰۹

پیوست ۲ برنامه‌ی محاسبه‌ی چگالی حالت‌ها در گرافین نرمال ۱۱۱

مراجع ۱۱۸

واژه‌نامه‌ی فارسی به انگلیسی ۱۲۳

واژه‌نامه‌ی انگلیسی به فارسی ۱۲۸

مقدمه

تابع موج ماکروسکوپی یک ابررسانا می‌تواند به فلز نرمالی که در مجاورت آن قرار گرفته است نفوذ کند. در واقع جفت‌های کوپری که در حالت پایه‌ی ابررسانا قرار دارند تا طول‌هایی از مرتبه‌ی طول همدوسی ابررسانایی، که معیاری از طول همبستگی الکترون‌ها در جفت کوپر است، به درون ناحیه‌ی نرمال نفوذ می‌کنند. بنابراین مجاورت ابررسانا سبب القای همبستگی‌های ابررسانایی و بروز خواص ابررساناگونه در ماده‌ی غیر ابررسانا می‌شود. این پدیده، یعنی تأثیر ابررسانا بر سیستم‌های غیرابررسانای در تماس با آن، اثر مجاورت[۱] نام دارد. اولین گواه تجربی بر وجود چنین اثری موسوم به اثر مجاورت، در سال ۱۹۳۲ توسط مایسنر [۱] ارائه شد. سال‌ها بعد کوپر[۲] و دوژن [۳] این اثر را به طور نظری مورد بررسی قرار دادند. در همان زمان، اندریف [۴] مشاهده کرد که حامل‌های بار در فصل مشترک یک اتصال ابررسانا– نرمال (NS) طی فرآیند خاصی نقل و انتقال می‌یابند. در این فرآیند دو الکترون (یکی با انرژی کمتر از انرژی فرمی و دیگری با انرژی بیشتر نسبت به آن) هم زمان وارد ابررسانا شده و با هم یک جفت کوپر می‌سازند. انتقال این دو الکترون به داخل ابررسانا، معادل با بازتابیدن یک حفره (جای خالی الکترونی با انرژی کمتر از انرژی فرمی) به داخل فلز نرمال است. این بازتاب، بازتاب اندریف[۲] نام گرفت. حفره‌ی بازتابیده با الکترون فرودی همبسته بوده و نیز حامل اطلاعاتی مربوط به فاز پارامتر نظم ابررسانایی می‌باشد. وجود جفت‌های الکترون و حفره‌ی همبسته در فلز نرمال معادل با یک پارامتر نظم القایی (دامنه‌ی جفت شدگی[۳] $F(r)$) غیر صفر است. در واقع دامنه‌ی جفت‌شدگی را می‌توانیم به صورت چگالی جفت‌های همبسته‌ی الکترون– حفره در ناحیه‌ی نرمال به خاطر بازتاب اندریف، در نظر بگیریم. این همبستگی‌ها خواص فلز نرمالی را که در مجاورت ابررسانا قرار گرفته است، به شدت تغییر می‌دهد. برای مثال دامنه‌ی جفت‌شدگی، فلز نرمال را قادر می‌سازد که ابرجریان حمل کند، یک گاف در طیف آن ایجاد می‌شود و یا رسانندگی توسط فرآیند بازتاب اندریف تغییر می‌کند. به ویژه اینکه چگالی حالت‌های الکترونی[۴] در فلز نرمال، ویژگی‌هایی پیدا می‌کند که مشخصه‌ی حالت‌های ابررسانایی است. بررسی چگالی حالت‌های الکترونی در

[۱] Proximity effect

[۲] Andreev Reflection

[۳] Pair Amplitude Function

[۴] Density of States

سیستم نرمال محدودی که در تماس با ابررسانا است، برای سیستم‌های تمیز [۵، ۶، ۷، ۸، ۹، ۱۰] و سیستم‌های پخشی [۱۱، ۱۲، ۱۳، ۱۴، ۱۵، ۱۶، ۱۷] بررسی شده است.

روش‌های مختلفی برای مطالعه‌ی تجربی اثر مجاورت ابررسانایی وجود دارد. یکی از این روش‌ها که از همان روزهای نخستین کشف این اثر مورد توجه قرار گرفته است، بررسی چگالی حالت‌های الکترونی است. چگالی حالت‌های الکترونی فلز نرمال در اتصال NIS، اولین بار توسط مک میلان [5] اندازه‌گیری شد [۱۲]. او با استفاده از روش طیف سنجی تونلی، چگالی حالت‌های الکترونی فلز نرمالی را که به واسطه‌ی لایه‌ی عایق به یک ابررسانای معمولی متصل شده بود، اندازه‌گیری کرد.

امروزه در فناوری نانوالکترونیک و در ساخت رایانه‌های کوانتومی، ساختارهای دو بعدی و یک بعدی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار هستند. تا چند سال پیش سیستم‌های الکترونی دو بعدی با استفاده از اتصالات نامتجانس نیمرساناها به وجود می‌آمدند [۱۸]. در این نوع اتصالات الکترون‌ها در یک ناحیه‌ی دو بعدی میان دو لایه‌ی نیمرسانا و با اعمال ولتاژ محصور می‌شدند و یک سیستم الکترونی دو بعدی را به وجود می‌آوردند. با این حال ساختارهای بلوری دو بعدی که از یک یا چند لایه‌ی اتمی ساخته شده باشند، وجود نداشتند. در واقع تصور می‌شد که کریستال‌های دو بعدی از لحاظ ترمودینامیکی پایدار نیستند و نمی‌توانند وجود داشته باشند [۱۹، ۲۰، ۲۱، ۲۲، ۲۳]. تا اینکه در سال ۲۰۰۴ یک گروه از فیزیکدان‌ها در دانشگاه منچستر به سرپرستی آندره گایم [6]، با جدا کردن تک لایه‌ی گرافین از گرافیت، به این فرض پایان دادند [۲۴، ۲۵]. گرافین که یک لایه‌ی دو بعدی از اتم‌های کربن در ساختار شبکه‌ای لانه زنبوری است، از جهات بسیاری مورد توجه فیزیکدان‌ها قرار گرفته است که عمده‌ترین آن ساختار نواری خاص گرافین است. گرافین یک نیمرسانای بدون گاف است که برانگیختگی‌های آن در انرژی‌های پایین رابطه‌ی پاشندگی خطی دارند. از لحاظ نظری و تجربی نشان داده شده است که برانگیختگی‌ها در گرافین مانند فرمیون‌های دیراک بدون جرم رفتار می‌کنند [۲۶، ۲۷]. بنابراین گرافین کاملاً با بقیه‌ی سیستم‌های ماده چگال تفاوت دارد. ترابرد الکترونی در آن ویژگی‌های منحصر به فردی دارد که از جمله‌ی آنها می‌توان به اثر کوانتومی هال [۲۶، ۲۷] و پارادوکس کلاین [۲۸] اشاره کرد. همین‌طور ساختار نواری خاص گرافین باعث می‌شود تا علاوه بر اسپین، یک درجه‌ی آزادی داخلی دیگر نیز برای برانگیختگی‌ها در گرافین وجود داشته باشد. این درجه‌ی آزادی که موسوم به وادی [7] است باعث می‌شود تا

[5] Mc Millan

[6] Andre Giem

[7] Valley

نانوساختارهای گرافینی با مرزهای مختلف ویژگی‌های ممتازی داشته باشند که از جمله‌ی این ویژگی‌ها می‌توان به کوانتش نیمه‌صحیح ابرجریان بحرانی در اتصال جوزفسون گرافینی با لبه‌ی زیگزاگ اشاره کرد [۲۹، ۳۰]. در حالیکه نوارهای گرافینی با لبه‌ی صندلی شکل و هموار در این نوع اتصال، دارای چنین ویژگی‌ای نیستند.

ویژگی‌های ممتازی که در گرافین وجود دارد باعث می‌شود تا به ساختارهای کنونی الکترونیکی مانند سیلیکون و گالیم آرسنایدترجیح داده شود که از جمله‌ی این ویژگی‌ها تحرک پذیری بالا در گرافین است. از طرفی به خاطر جفت شدگی ضعیف اسپین— مدار در گرافین، امکان مشاهده‌ی اثر تزریق اسپینی و سوپاپ اسپینی [۳۱] در آن ممکن است. چراکه قطبیدگی اسپینی می‌تواند تا فواصل زیر میکرون در آن حفظ شود. همین‌طور جایگزین مناسبی برای نانولوله‌های کربنی خواهد بود. از آن جهت که نانولوله‌ها در اتصال به سیم‌های فلزی مقاومت الکتریکی بالایی دارند چیدن آنها روی تراشه‌ها مشکل خواهد بود، در حالیکه گرافین این مشکلات را نخواهد داشت. همین‌طور می‌توان ابررسانایی را از طریق اثر مجاورت در گرافین القا کرد [۳۲].

در سیستم‌های متداول ابررسانا— فلز نرمال (NS)، بازتاب اندریف از نوع رجعی[۸] است. به طوریکه حفره‌ی منعکس شده در همان مسیر الکترون فرودی برمی‌گردد. در حالیکه در گرافین علاوه بر بازتاب رجعی، نوع دیگری از بازتاب نیز وجود دارد که برای گرافین خالص[۹] اتفاق می‌افتد و آن بازتاب اندریف از نوع آینه‌ای[۱۰] است [۳۳]. این امکان منحصر به فرد در گرافین به واسطه‌ی ساختار نواری خاص آن و امکان دسترسی به انرژی‌های فرمی کم ممکن است. به طوریکه در نانولوله‌ها در حالیکه رفتار برانگیختگی‌ها مشابه گرافین است طبیعت یک بعدی آنها مانع از مشاهده‌ی اثرات مربوط به بازتاب اندریف آینه‌ای می‌گردد. چراکه این پدیده یک اثردوبعدی است. این نوع بازتاب اندریف باعث می‌شود تا رسانندگی در گرافین با افزایش ولتاژ از ۲ به ۴/۳ برسد درحالیکه در انعکاس اندریف رجعی عکس این اتفاق می‌افتد [۳۳]. همچنین بازتاب اندریف آینه‌ای در یک کانال گرافینی با مرزهای ابررسانا، باعث به وجود آمدن نوعی مدهای منتشر شونده در امتداد کانال می شود که در اتصالات مرسوم SNS وجود ندارند. این مدها می‌توانند در کانال انرژی حمل کنند، به طوریکه رسانش گرمایی وابسته به اختلاف فاز دو ابررساناست و انتقال بار صورت نمی‌گیرد. بنابراین این امکان خاص در گرافین باعث پدیده‌های جالبی می‌شود که در سیستم‌های مرسوم وجود ندارند [۳۴].

ما در این پایان‌نامه ابتدا به بررسی اثر مجاورت ابررسانایی در سیستم گاز الکترونی دو بعدی (اتصال ابررسانا—

---

[۸] Retro

[۹] Undoped

[۱۰] Specular

نرمال) می‌پردازیم و با استفاده از روش معادلات بوگولیوبوف— دوژن [۳۵] در تقریب شبه کلاسیک [۳۶]، به محاسبه‌ی چگالی حالت‌های مجاورتی و دامنه‌ی جفت شدگی در ناحیه‌ی نرمال محدود می‌پردازیم تا در نهایت با نتایجی که برای سیستم گرافینی بدست می آوریم، مقایسه کنیم. سپس به بررسی اثر مجاورت ابررسانایی در سیستم گرافینی و به ویژه گرافین خالص می‌پردازیم و با استفاده از معادلات دیراک— بوگولیوبوف— دوژن [۳۳] که تعمیم یافته‌ی معادلات بوگولیوبوف— دوژن برای گرافین هستند، چگالی حالت‌ها را در ناحیه‌ی نرمال گرافین خالص محاسبه می‌کنیم. چگالی حالت‌های مجاورتی در گرافین خالص وابستگی به مکان پیدا می‌کند، در حالی‌که در سیستم گاز الکترونی دو بعدی مستقل از مکان است. بنابراین با وجود اینکه ترابرد در گرافین بالستیک است، گرافین خالص در اتصالات SN، مانند سیستم‌های پخشی رفتار می‌کند.

بنابراین در فصل اول به معرفی گرافین و فیزیک آن به ویژه ساختار نواری و رفتار برانگیختگی‌ها و مرور ترابرد الکترونی در لایه‌های گرافین و اثرات مهم مربوط به آن خواهیم پرداخت. در فصل دوم به بررسی اثر مجاورت ابررسانایی در سیستم گاز الکترونی دو بعدی که در اتصال دو لایه‌ی نیمرسانا بوجود می آید، می‌پردازیم: مدلی که در نظر می‌گیریم به صورت یک اتصال ابررسانا— نرمال است به طوریکه ناحیه‌ی نرمال آن محدود باشد. از روش بوگولیوبوف— دوژن (BdG)، که همان روش توابع موج است، در تقریب شبه کلاسیک استفاده می‌کنیم و چگالی حالت‌های مجاورتی و دامنه‌ی جفت‌شدگی (دامنه‌ی احتمال یافتن یک جفت کوپر در مکان r) را در ناحیه‌ی نرمال محاسبه می‌کنیم. چگالی حالت‌ها در ناحیه‌ی نرمال با طول کوچک نسبت به طول همدوسی ابررسانایی، همانند چگالی حالت‌های الکترونی در ابررساناست که با افزایش طول ناحیه‌ی نرمال، در طول‌های بزرگ به مقدار ثابت N_0 که چگالی حالت‌های یک سیستم گاز الکترونی دو بعدی نرمال است، میل می‌کند. بررسی دامنه‌ی جفت شدگی نیز نفوذ جفت‌های کوپر به داخل ناحیه‌ی نرمال را نشان می‌دهد به طوریکه در طول‌های خیلی کوچک ناحیه‌ی نرمال، نسبت به مکان تقریباً ثابت است و با افزایش طول رفتار کاهشی دارد تا اینکه در فواصل به اندازه‌ی کافی دور از فصل مشترک SN، به صفر می رسد.

در فصل سوم به بررسی اثر مجاورت ابررسانایی در اتصال ابررسانا— نرمال گرافینی می پردازیم که ناحیه‌ی نرمال آن طول محدودی دارد و لبه‌اش از نوع هموار است. برای بررسی این سیستم از معادله‌ی دیراک— بوگولیوبوف— دوژن ($DBdG$) استفاده می‌کنیم که تعمیم یافته‌ی معادله‌ی بوگولیوبوف— دوژن برای گرافین است و چگالی حالت‌های الکترونی را برای گرافین خالص [۱۱](حالت انعکاس اندریف آینه‌ای) محاسبه می‌کنیم. بررسی‌ها

[۱۱] undoped

نشان می‌دهد که حالت‌های مقید اندریف در ناحیه‌ی نرمال، شامل حالت‌های منتشر شونده و میرا هستند در حالیکه در سیستم گاز الکترونی دو بعدی، تنها حالت‌های منتشرشونده با تکانه‌ی طولی حقیقی داریم. همین‌طور چگالی حالت‌های الکترونی در گرافین نرمال وابسته به مکان است که این رفتار ویژگی سیستم‌های پخشی است. همچنین با بررسی رفتار چگالی حالت‌ها برحسب مکان در انرژی مربوط به قله‌های اندریف، می‌توان به نوع حالت‌های متناظر با آن انرژی‌ها پی برد و در نهایت در فصل چهارم به نتیجه‌گیری کلی از آنچه که در فصل‌های دوم و سوم انجام داده‌ایم، خواهیم پرداخت.

فصل اول

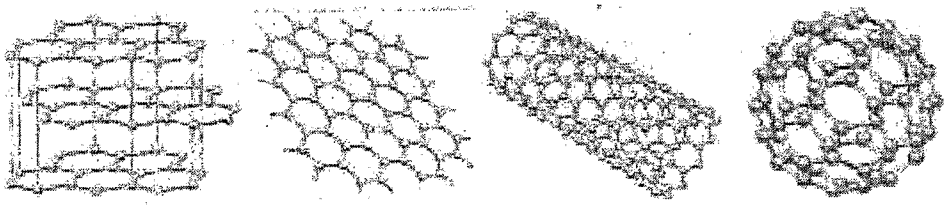
گرافین: فرم دوبعدی کربن

۱.۱ آلوتروپ‌های کربن و گرافین

کربن یکی از پر هیاهوترین عناصر درجدول تناوبی است که نقش منحصر به فردی در طبیعت دارد و پایه وجود حیات است [۳۸]. در واقع شکل‌گیری کربن در ستاره‌ها که نتیجه‌ای از ترکیب سه ذره آلفا در یک فرآیند قطعی است، باعث به وجود آمدن عناصرشیمیایی نسبتاً سنگین در جهان می‌شود. کربن تنها عنصر جدول تناوبی است که دارای ایزومرهایی از ابعاد صفر (فولرن) تا سه (گرافیت) است. در شکل ۱—۱ ساختار کریستالی آلوتروپ‌های مختلف کربن آمده است.

ساختارهای سه بعدی گرافیت و الماس، از زمان‌های بسیار قدیم شناخته شده‌اند. ساختار صفر بعدی فولرن [۱] (۱۹۸۵)[۴۲، ۴۱، ۴۰] و ساختار یک بعدی نانولوله (تک لایه ۱۹۹۳ و دو لایه ۱۹۹۱) [۴۳] چند دهه پیش کشف شده‌اند. گرافیت، از صفحات تخت از اتم‌های کربن که در شبکه‌ی لانه زنبوری قرار گرفته‌اند، تشکیل شده است . به طوریکه برهم کنش ضعیف واندروالس بین لایه‌ها وجود دارد. نانولوله‌ها، از پیچیده شدن این صفحات

[۱] bucky balls



شکل ۱—۱: ساختار کریستالی آلوتروپ‌های مختلف کربن: از چپ به راست، گرافیت (سه بعدی)، گرافین (دو بعدی)، نانولوله (یک بعدی) و فولرن (صفر بعدی) [۳۹].

تخت ایجاد می‌شوند که بسته به جهت پیچش، می‌توانند خواص الکتریکی فلز و یا نیمه فلز داشته باشند و فولرن‌ها که با ایجاد یک نقص توپولوژیکی از این لایه‌های دو بعدی به دست می‌آیند. الماس نیز با تبدیل پیوند دو بعدی sp^2 به پیوند سه بعدی sp^3 تحت فشار و دمای خیلی زیاد به دست می‌آید. بنابراین تمامی این ساختارها به نحوی از لایه‌ی دو بعدی کربن به وجود آمده‌اند که نقطه شروع محاسبات در این ساختارها است . این لایه‌ی دو بعدی، گرافین نام دارد. گرافین، تک لایه‌ای از اتم‌های کربن است که در شبکه‌ی لانه زنبوری قرار گرفته‌اند. تا سالیان دراز این فرم دو بعدی کربن به حالت آزاد غایب بود و تلاش‌های تجربی برای تولید آن با شکست همراه بود [۴۴]. در واقع بیشتر فیزیکدانان معتقد بودند که یک کریستال دو بعدی مثل گرافین از لحاظ تئوری پایدار نیست و نمی‌تواند به صورت یک صفحه تخت وجود داشته باشد و احتمالاً به دوده تبدیل خواهد شد [۲۳، ۲۲، ۲۱، ۲۰، ۱۹] در واقع مشکل اساسی آزمایش‌ها این بود که نسبت محیط به سطح مراکز هسته‌زایی گرافینی در شروع رشد بزرگ بوده و این باعث تشکیل ساختارهای کربنی دیگری که از لحاظ ترمودینامیکی پایدارترند، می‌شد.

۲.۱ کشف گرافین

با وجود اینکه تصور می‌شد لایه‌های دوبعدی کربن نمی‌توانند وجود داشته باشند، در سال ۲۰۰۴ یک گروه از فیزیکدان‌ها در دانشگاه منچستر به سرپرستی آندره گایم[۲] به این فرض پایان دادند. آنها توانستند با استفاده از یک روش کاملاً متفاوت و در نگاه اول ساده‌انگارانه این کار را انجام دهند و تک لایه گرافین را جدا کنند و با این

[۲] Andre Geim

کار تحول عظیمی در این زمینه بوجود آورند. آنها از گرافیت سه بعدی آغاز کردند و یک تک لایه از اتم‌ها را با تکنیکی به نام شکاف میکرومکانیکی[۳] جدا کردند [۲۵، ۲۴]. در واقع همان‌طور که قبلاً هم اشاره شد، گرافیت ساختار لایه‌ای دارد و شامل تعدادی از کریستال‌های دو بعدی گرافین است که به صورت ضعیفی به هم جفت شده‌اند. ضعیف بودن پیوند بین لایه‌ها نسبت به پیوند اتم‌های کربن در هر لایه موجب می‌شود که جدا سازی لایه‌ها به راحتی صورت گیرد (در هنگام نوشتن با مداد مدام این کار صورت می‌گیرد) و آن خصوصیتی است که توسط تیم دانشگاه منچستر مورد استفاده قرار گرفت. همین‌طور با استفاده از روش بالا و با شروع از کریستال‌های سه بعدی بزرگ، از تمامی مسائلی که در مورد پایداری کریستال‌های کوچک در ابتدای رشد وجود داشت، اجتناب می‌شود. این گروه از این روش برای ساخت کریستال‌های دو بعدی از موادی چون بورونیترید و بعضی مواد دیکالکوژنید [۴] و ابررساناهای دمای بالا BiSrCaCuO نیز استفاده کردند [۲۴]. روش گروه گایم به این صورت بود که از نوارهای چسبنده برای جدا کردن لایه‌هایی که در گرافیت به صورت ضعیفی به هم متصل‌اند، استفاده کردند و سپس آن لایه‌های تازه را روی سطح اکسید سیلیکون مالیدند. همین‌طور با استفاده از تکنیک نوشتن با مداد، کریستال‌های گرافینی کوچک را روی یک سطح سخت کشیدند و نمونه‌هایی با کیفیت بالا ساختند.

این تک لایه‌ها کاملاً نور مرئی را عبور می‌دهند، بنابراین نمی‌توان از میکروسکوپ اپتیکی استفاده کرد. AFM،[۵] تنها روشی است که برای مشخص کردن کریستال تک لایه‌ای استفاده می‌شود. مدتی بعد یک گروه به سرپرستی فیلیپ کیم،[۶] در دانشگاه کلمبیای آمریکا این روش (نوشتن با مداد) را تأیید کردند. در حالیکه گروه دیگری [۴۵] در دانشگاه جرجیا[۷] یک روش دیگری به نام روش رشد هم‌بافته [۸] را به کار بردند که در استفاده صنعتی (تولید انبوه) مناسب است.

این یافته‌ها یک پیغام مهم دارد و آن اینکه کریستال‌های دو بعدی وجود دارند و در دمای اتاق و در هوای محیط

---

[۳] micromechanical cleavage

[۴] dichalcogenide

[۵] Atomic Force Microscopy

[۶] Philip Kim

[۷] Walt de Heer, Claire Berger

[۸] epitaxial growth process

پایدار هستند. این روش اجازه تولید آسان و با کیفیت بالا را می‌دهد و کریستال‌های بزرگ گرافین تا ۱۰ میکرومتر هم ساخته شده‌اند [۲۶، ۲۷]. کیفیت نمونه‌های تولید شده به اندازه‌ای خوب است که ترابرد بالستیک [۲۵] و اثر کوانتومی هال [۲۶، ۲۷] به راحتی درگرافین قابل مشاهده است و این ویژگی‌ها باعث شده تا گرافین کاندیدای ایده‌آلی برای کاربردهای آینده در نانوالکتریک باشد.

۳.۱ مسئله‌ی پایداری در دوبعد

وجود کریستال‌های دو بعدی پایدار تحت شرایط مناسب [۲۴] (دمای اتاق و هوای محیط) به تنهایی عجیب به نظر می‌رسد. به این دلیل که طبق قضیه مرمین— وگنر [۲۳][۹]، نباید هیچ نظم بلندبردی در دو بعد وجود داشته باشد و باید ناجابجایی‌ها[۱۰] در هر دمایی در این کریستال‌های دو بعدی ظاهر شوند.

طبق یک توصیف استاندارد [۴۶] از حرکت اتم‌ها در جامدات، دامنه ارتعاشات اتمی $\bar{u}$ حول نقطه‌ی تعادل خیلی کوچکتر از فاصله بین اتمی d فرض می‌شود، طوری که نقطه ذوب کریستال طبق شرط لیدمن[۱۱] در $\bar{u} \simeq 0.1d$ است. به خاطر این کوچکی، جامد را می‌توان به صورت یک گاز فونونی ایده‌آل در نظر گرفت. در واقع در سیستم‌های سه بعدی به خاطر افت و خیزهای اتمی در تقریب هارمونیک و برای دماهای پایین، این نظریه خودسازگار است. اما در مقابل، در کریستال‌های دو بعدی، تعداد فونون‌ها با طول موج بلند در دماهای پایین نامتناهی است. بنابراین دامنه جابجایی‌های اتمی در تقریب هارمونیک واگرا می‌شود [۱۹، ۲۰، ۲۱]. با توجه به بحث‌های مشابه نشان می‌دهند که به خاطر افت و خیزهای خمشی بلندبرد، یک غشا (پوسته) انعطاف پذیر معلق در فضای سه بعدی مچاله می‌شود [۴۷].

با این حال فیزیکدانان ماده چگال نرم در طول ۲۰ سال گذشته نشان داده‌اند [۴۷، ۴۸، ۴۹] که جفت شدگی غیر هارمونیک (غیر خطی) بین مدهای خمشی و کششی این افت و خیزهای خطرناک را از بین می‌برد و در نتیجه غشاهای تک بلوری (کریستالی) می‌توانند وجود داشته باشند، اگرچه چروکیده خواهند بود.

[۹] Mermin-Wagner

[۱۰] dislocation

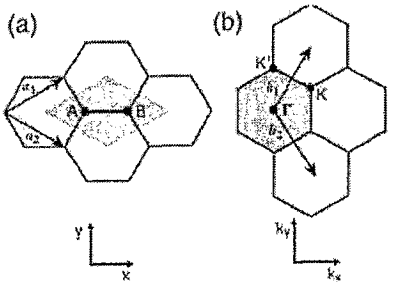
[۱۱] Empirical Lindeman Criterion

در واقع افت و خیزهای ناهمواری [۱۲] برای یک نمونه به طول L، به صورت L^{ξ}، $\xi \simeq 0.6$، است که این چین و چروک‌ها در گرافین معلق مشاهده شده و نقش مهمی در خواص الکترونی آن دارد [۵۰].

موضوع دیگر نقش نقیصه‌ها[۱۳] مانند ناجابجایی‌ها[۱۴] و ناهم‌خطی‌ها [۱۵]، در پایداری ترمودینامیکی کریستال‌های دوبعدی است. که البته یک تحلیل دقیق نشان می‌دهد که برای کریستال‌های دو بعدی مانند گرافین که دارای یک برهمکنش پیوندی قوی هستند چندان مشکل‌ساز نیست [۴۷].

۴.۱ ساختارشبکه‌ای گرافین

گرافین از اتم‌های کربن که در ساختار ٦ وجهی قرار گرفته‌اند تشکیل شده است. شبکه ٦ ضلعی براوه نیست ولی می‌توان آن را به صورت دو زیر شبکه مثلثی براوه A و B توضیح داد (و یا اینکه می توان آن را به صورت یک شبکه مثلثی با پایه دو اتمی و یا یک لوزی در نظر گرفت). بنابراین سلول واحد دارای دو اتم A و B خواهد بود و مجموعه سلول‌های واحد یک شبکه مثلثی درست می‌کنند که با دو بردار شبکه‌ی اولیه $a_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}, 0)$ و $a_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}, 0)$ شکل ۱—۲ ساخته می‌شوند. بدین معنی که هر بردار شبکه ترکیبی خطی از این دو بردار با ضرایب صحیح خواهد بود.



شکل ۱—۲: a) شبکه‌ی گرافین در فضای مستقیم b) فضای معکوس. سلول واحد در شبکه‌ی گرافین که شامل دو اتم A و B است با لوزی سایه‌دار و اولین $B.Z.$ با ٦ ضلعی سایه‌دار مشخص شده‌اند. بردارهای پایه‌ی شبکه‌ی مستقیم و شبکه‌ی معکوس a_i و b_i، $i = (1, 2)$، هستند [۵۱].

[۱۲] roughness
[۱۳] defect
[۱۴] dislocation
[۱۵] disclination

شبکه معکوس [16] این شبکه مثلثی، یک شبکه مثلثی است که با بردارهای $b_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}, 0)$ و $b_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}, 0)$ توصیف می‌شود. در ساختار شبکه‌ای لانه زنبوری هر اتم کربن از طریق پیوند قوی σ به سه اتم همسایه متصل است [۵۱]. پیوند σ نتیجه‌ی هیبریداسیون sp^2 برای اوربیتال‌های $2P_y, 2P_x, 2S$ سه الکترون ظرفیتی (والانس) است. چهارمین الکترون ظرفیتی در هر اتم در اوربیتال $2P_z$ که عمود بر صفحه گرافین است، می‌باشد. هم پوشانی اوربیتال‌های $2P_z$ موجب تشکیل پیوندهای اضافی π میان اتم‌های مجاور می‌شود. هم‌پوشانی اوربیتال‌ها در پیوند π عموماً کم است و در نتیجه این پیوند ضعیف می‌شود. به همین دلیل در حالیکه الکترون‌های دیگر اتم شدیداً تحت تاثیر هسته‌های مجاور و کاملاً جایگزیده‌اند، الکترون اوربیتال $2P_z$ به واسطه جهش[17] میان اتم‌ها به حالت‌های گسترده و یک نوار انرژی منجر می‌شود و خواص ترابردی گرافین هم توسط همین الکترون‌های π غیر جایگزیده مشخص می‌شود و با توجه به اینکه دو الکترون در هر سلول واحد داریم، باید دو باند π که π^*, π هستند، وجود داشته باشند که π مربوط به باند ظرفیت و π^* مربوط به باند رسانش است.

۱.۴.۱ رابطه‌ی پاشندگی خطی

برای به دست آوردن رابطه‌ی پاشندگی الکترون‌های π در گرافین از تقریب تنگابست[18] [۳۷] استفاده می‌کنیم که برای اولین بار در سال ۱۹۴۷ توسط والاس [19] بدست آمد و هامیلتونی آن به این صورت است :

$$H_{t.b.} = -t \sum_{<i,j>,\ \sigma} (a^{\dagger}_{i,\sigma} b_{i,\sigma} + H.C.) - t' \sum_{\ll i,j \gg,\ \sigma} (a^{\dagger}_{i,\sigma} a_{j,\sigma} + b^{\dagger}_{i,\sigma} b_{j,\sigma} + H.C.) \qquad (۱.۱)$$

که $a^{\dagger}_{i,\sigma}(a_{i,\sigma})$، یک الکترون با اسپین σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) را در مکان R_i از زیر شبکه A ایجاد می‌کند (نابود می‌کند) و $b^{\dagger}_{i,\sigma}(b_{i,\sigma})$ یک الکترون با اسپین σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) را در مکان R_i از زیر شبکه B ایجاد می‌کند (نابود می‌کند). $t \sim 2.7eV$ انرژی جهشی بین همسایه‌های نزدیک ($< i, j >$) و $t'/t \sim 0.1$ انرژی جهشی بین همسایه‌های نزدیک بعدی $\ll i, j \gg$ است.

[16] reciprocal lattice
[17] hopping
[18] Tight Binding
[19] Wallace