

اللَّهُمَّ اللَّهُمَّ اللَّهُمَّ

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



دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته فیزیک

گرایش حالت جامد

عنوان پایان نامه

بررسی چگالی حالت ها و ظرفیت گرمایی نانو نوار های زیگزاگ در مدل تنگ بست

استاد راهنما:

دکتر حمزه موسوی

نگارش:

حسنا شرافتی زنگنه

شهریور ماه ۱۳۹۲



دانشگاه رازی

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک گرایش حالت جامد

نگارش:

حسنا شرافتی زنگنه

عنوان پایان نامه

بررسی چگالی حالت ها و ظرفیت گرمایی نانو نوار های زیگزاگ در مدل تنگ بست

در تاریخ ۹۲/۰۶/۲۰ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه به تصویب نهایی رسید.

- | | | |
|-------|--------------------------|--|
| امضاء | با مرتبه ی علمی استادیار | ۱- استاد راهنما دکتر حمزه موسوی |
| امضاء | با مرتبه ی علمی استادیار | ۲- استاد داور داخل گروه دکتر علی فتحعلیان |
| امضاء | با مرتبه ی علمی استادیار | ۳- استاد داور داخل گروه دکتر شاهدخت سهرابی |

حمد و سپاس خدای را که جز به یاری او اتمام این تحقیق میسر نبود. شایسته است که مراتب حق شناسی خود را از استاد گرانقدر و

ارجمند، جناب آقای دکتر حمزه موسوی که زحمات راهشانی من را در انجام این پایان نامه بر عهده گرفتند و در تمام مراحل کار مرا

از راهشانی‌های دلسوزانه‌شان بی نصیب نگذاشتند ابراز دارم. و دوستانم که هر کدام به نحوی من را تا پایان کاریاری کردند نیز

سپاس گزارم.

از خانواده‌ی گرامی و همسر مهربانم که همواره مشوق و یاور من بوده‌اند و این فرصت را در اختیارم گذاشتند، کمال تشکر و

قدردانی را دارم.

تقدیم بہ

مادر مہربانم کہ ترانہ محبت رادو وجودم ز فرمہ کردو

پدر بزرگوارم کہ چکونہ زیستن را بہ من آموخت

و ہمسر عزیزم بہ خاطر تمام خوبی ہائش

چکیده :

ویژگی های الکترونیکی نانو مواد با تغییر هندسه و نوع اتم های آنها تغییر می کند. در این پایان نامه به بررسی ویژگی های الکترونیکی نانو نوارهای زیگزاگ گرافینی، سیلیکون کربن، بورون نیتراید و بریلیوم اکساید در مدل تنگ بست و در رهیافت تابع گرین می پردازیم. چگالی حالتها و ظرفیت گرمایی الکترونی نانو نوارهای ذکر شده برای عرض های مختلف بدست می آیند و نتایج با یکدیگر مقایسه می شود.

برای این کار ابتدا با استفاده از تقریب تنگ بست هامیلتونی سیستم را در کوانتس دوم محاسبه می کنیم و سپس به کمک رهیافت تابع گرین، معادله ظرفیت گرمایی را بدست می آوریم و با استفاده از نرم افزار متلب نمودارها را رسم کرده و نتایج را مورد بررسی و مقایسه قرار می دهیم.

در مرحله بعد به لبه ی نانو نوار های زیگزاگ ذکر شده گاز هیدروژن اضافه می کنیم و اثرات حضور این گاز را بر روی نانو نوارها از طریق اثراتی که بر نمودارهای چگالی حالت و ظرفیت گرمایی می گذارند بررسی می کنیم.

کلید واژه ها : نانو نوار , چگالی حالت , مدل تنگ بست , گرافین , سیلیکون کربن , بریلیوم اکساید , بورون نیتراید و ظرفیت گرمایی .

فصل اول: فناوری نانو و مقدمه ای بر مفهوم نانو نوار

| | |
|----|--|
| ۲ | ۱-۱- فناوری نانو |
| ۲ | ۱-۱-۱- تاریخچه فناوری نانو |
| ۳ | ۲-۱- کربن |
| ۵ | ۳-۱- هیبریداسیون |
| ۸ | ۱-۳-۱- اوربیتال مولکولی δ, δ^* |
| ۸ | ۲-۳-۱- اوربیتال مولکولی π و π^* |
| ۹ | ۴-۱- گرافین |
| ۱۲ | ۱-۴-۱- روشهای تولید گرافین |
| ۱۳ | ۵-۱- بورون نیتراید |
| ۱۴ | ۶-۱- اکسید برلیوم |
| ۱۵ | ۷-۱- سیلیکون کربن |
| ۱۶ | ۸-۱- نانو نوارها |

فصل دوم: مدل تنگ بست

| | |
|----|--|
| ۱۹ | ۱-۲- مقدمه |
| ۱۹ | ۲-۲- جملات هامیلتونی در بلور یک جسم جامد |
| ۲۱ | ۳-۲- نظریه بلاخ |
| ۲۲ | ۴-۲- اثبات قضیه بلاخ |
| ۲۴ | ۵-۲- نمایش بلاخ برای هامیلتونی |
| ۲۵ | ۶-۲- مدل تنگ بست |
| ۲۷ | ۷-۲- هامیلتونی تنگ بست در کوانتس دوم |

فصل سوم: تابع گرین

| | |
|----|----------------------------------|
| ۳۰ | ۱-۳- مقدمه ای بر مفهوم تابع گرین |
| ۳۱ | ۲-۳- نظریه پاسخ خطی |
| ۳۶ | ۳-۳- معادله حرکت تابع گرین |

فصل چهارم: ظرفیت گرمایی و چگالی حالت نان نوارها

| | |
|----|-------------------------------------|
| ۴۴ | ۱-۴- مقدمه |
| ۴۴ | ۲-۴- معرفی ساختار هندسی نانو نوارها |
| ۴۵ | ۳-۴- ظرفیت گرمایی |
| ۴۸ | ۴-۴- چگالی حالت های کل |

- ۴-۵- محاسبه چگالی حالت ها با استفاده از تابع گرین..... ۴۹
- ۴-۶- محاسبه هامیلتونی، تابع گرین و چگالی حالت های یک شبکه خطی با یک اتم و یک اوربیتال در
یاخته آن ۵۰
- ۴-۷- محاسبه هامیلتونی دستگاه نانو نوارهای گرافینی، بورون نیتراید، سیلیکون کربن و اکسید بریلیوم..... ۵۳
- ۴-۸- محاسبه هامیلتونی نانو نوارها در حضور یک گاز (هیدروژن)..... ۵۶

فصل پنجم : نمودار ها و نتایج

- ۵-۱- نمودار چگالی حالت و ظرفیت گرمایی نانو نوارهای گرافینی، بورون نیتراید، سیلیکون کربن و اکسید
بریلیوم..... ۶۰
- ۵-۲- نمودارهای چگالی حالات نانو نوارهای گرافینی، بورون نیتراید، سیلیکون کربن و اکسید بریلیوم..... ۶۴
- ۵-۳- نمودارهای ظرفیت گرمایی نانو نوارهای گرافینی، بورون نیتراید، سیلیکون کربن و اکسید بریلیوم..... ۶۶
- ۵-۴- نمودارهای چگالی حالات نانو نوارهای گرافینی، بورون نیتراید، سیلیکون کربن و اکسید بریلیوم در
حضور اتم هیدروژن..... ۶۸
- ۵-۵- نمودارهای ظرفیت گرمایی نانو نوارهای گرافینی، بورون نیتراید، سیلیکون کربن و اکسید بریلیوم در
حضور اتم هیدروژن..... ۷۰
- ۵-۶- نمودارهای چگالی حالات و ظرفیت گرمایی نانو نوارهای گرافینی، بورون نیتراید، سیلیکون کربن
و اکسید بریلیوم با عرض ثابت..... ۷۲
- ۵-۷- نمودار های چگالی حالات و ظرفیت گرمایی نانو نوار های مختلف با اتم هیدروژن و بدون اتم
هیدروژن..... ۷۴
- منابع..... ۸۵

فهرست اشکال

| صفحه | عنوان |
|---------|--|
| ۴..... | شکل ۱-۱- اوربیتال s و اوربیتال p..... |
| ۶..... | شکل ۱-۲- هیبریداسیون sp قسمت ها تاریک سرهای مثبت تابع موج و قسمت‌های روشن سر منفی تابع موج را نشان می دهند |
| ۶..... | شکل ۱-۳- هیبریداسیون sp^2 |
| ۷..... | شکل ۱-۴- هیبریداسیون..... |
| ۹..... | شکل ۱-۵- نحوه تشکیل اوربیتال δ و δ^* و π و π^* |
| ۱۰..... | شکل ۱-۶- گرافین..... |
| ۱۰..... | شکل ۱-۷- نمودار ساختار نواری گرافین نوار رسانش در نقاط K و K' با نوار ظرفیت تلاقی دارد..... |
| ۱۳..... | شکل ۱-۸- بورون نیتراید شش گوشه..... |
| ۱۳..... | شکل ۱-۹- سه لایه بورون نیتراید که مشابه صفحات گرافیت بر روی هم قرار گرفته اند..... |
| ۱۵..... | شکل ۱-۱۰- اکسید برلیوم..... |
| ۱۵..... | شکل ۱-۱۱- سیلیکون کربن $(\beta)3C$ |
| ۱۶..... | شکل ۱-۱۲: نمایش ساختار هندسی نانو نوارهای گرافینی و سلول پایه آنها الف)آرمچیر وب)زیگزاگ..... |
| ۱۷..... | شکل ۱-۱۳: نمایش شماتیک مراحل تبدیل شدن نانو لوله کربنی به نانو نوار گرافینی(زیگزاگ) طی یک فرایند شیمیایی..... |
| ۴۴..... | شکل ۱-۴: نمایش ساختار هندسی نانو نوارهای گرافینی و سلول پایه آنها الف)آرمچیر وب)زیگزاگ..... |
| ۵۶..... | شکل ۲-۴-نمایش نانو نوار زیگزاگ در حالتی که به لبه ها گاز اضافه شده است..... |
| ۶۰..... | شکل ۱-۵- نمودار چگالی حالت نانو نوار گرافینی برای عرض $W= ۵$ |
| ۶۰..... | شکل ۲-۵- نمودار چگالی حالت نانو نوار بورون نیتراید برای عرض $W= ۸$ |
| ۶۱..... | شکل ۳-۵- نمودار چگالی حالت نانو نوار اکسید برلیوم برای عرض $W= ۱۳$ |
| ۶۱..... | شکل ۴-۵- نمودار چگالی حالت نانو نوار سیلیکون کربن برای عرض $W= ۱۷$ |
| ۶۲..... | شکل ۵-۵- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوار گرافینی برای عرض $W= ۵$ |
| ۶۲..... | شکل ۶-۵- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوار بورون نیتراید برای عرض $W= ۱۰$ |
| ۶۳..... | شکل ۷-۵- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوار اکسید برلیوم برای عرض $W= ۱۳$ |
| ۶۳..... | شکل ۸-۵- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوار سیلیکون کربن برای عرض $W= ۱۷$ |
| ۶۴..... | شکل ۹-۵- نمودار چگالی حالت های نانو نوار گرافینی برای ۴ عرض مختلف..... |
| ۶۴..... | شکل ۱۰-۵- نمودار چگالی حالات نانو نوار بورون نیتراید برای ۴ عرض مختلف..... |
| ۶۵..... | شکل ۱۱-۵- نمودار چگالی حالات نانو نوار اکسید برلیوم برای ۴ عرض مختلف..... |
| ۶۵..... | شکل ۱۲-۵- نمودار چگالی حالات نانو نوار سیلیکون کربن برای ۴ عرض مختلف..... |
| ۶۶..... | شکل ۱۳-۵- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوار گرافینی برای ۴ عرض مختلف..... |
| ۶۶..... | شکل ۱۴-۵- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوار بورون نیتراید برای ۴ عرض مختلف..... |

- شکل ۵-۱۵- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوار اکسید برلیوم برای ۴ عرض مختلف.....۶۷
- شکل ۵-۱۶- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوار سیلیکون کربن برای ۴ عرض مختلف.....۶۷
- شکل ۵-۱۷- نمودار چگالی حالت های نانو نوار گرافینی در حضور اتم هیدروژن برای ۴ عرض مختلف.....۶۸
- شکل ۵-۱۸- نمودار چگالی حالت های نانو نوار بورون نیتراید در حضور اتم هیدروژن برای ۴ عرض مختلف.....۶۸
- شکل ۵-۱۹- نمودار چگالی حالت های نانو نوار سیلیکون کربن در حضور اتم هیدروژن برای ۴ عرض مختلف.....۶۹
- شکل ۵-۲۰- نمودار چگالی حالت های نانو نوار اکسید برلیوم در حضور اتم هیدروژن برای ۴ عرض مختلف.....۶۹
- شکل ۵-۲۱- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوار گرافینی در حضور اتم هیدروژن برای ۴ عرض مختلف.....۷۰
- شکل ۵-۲۲- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوار بورون نیتراید در حضور اتم هیدروژن برای ۴ عرض مختلف.....۷۰
- شکل ۵-۲۳- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوار سیلیکون کربن در حضور اتم هیدروژن برای ۴ عرض مختلف.....۷۱
- شکل ۵-۲۴- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوار اکسید برلیوم در حضور اتم هیدروژن برای ۴ عرض مختلف.....۷۱
- شکل ۵-۲۵- نمودار چگالی حالات با عرض $W=8$۷۲
- شکل ۵-۲۶- نمودار چگالی حالات با عرض $W=13$۷۲
- شکل ۵-۲۷- نمودار ظرفیت گرمایی با عرض $W=8$۷۳
- شکل ۵-۲۸- نمودار ظرفیت گرمایی با عرض $W=8$۷۳
- شکل ۵-۲۹- نمودار چگالی حالات گرافینی با عرض $W=5$۷۴
- شکل ۵-۳۰- نمودار چگالی حالات گرافینی با عرض $W=17$۷۴
- شکل ۵-۳۱- نمودار چگالی حالات بورون نیتراید با عرض $W=5$۷۵
- شکل ۵-۳۲- نمودار چگالی حالات بورون نیتراید با عرض $W=17$۷۵
- شکل ۵-۳۳- نمودار چگالی حالات سیلیکون کربن با عرض $W=5$۷۶
- شکل ۵-۳۴- نمودار چگالی حالات سیلیکون کربن با عرض $W=17$۷۶
- شکل ۵-۳۵- نمودار چگالی حالات اکسید برلیوم با عرض $W=5$۷۷
- شکل ۵-۳۶- نمودار چگالی حالات اکسید برلیوم با عرض $W=17$۷۷
- شکل ۵-۳۷- نمودار ظرفیت گرمایی گرافین با عرض $W=5$۷۸
- شکل ۵-۳۸- نمودار ظرفیت گرمایی گرافین با عرض $W=17$۷۸
- شکل ۵-۳۹- نمودار ظرفیت گرمایی بورون نیتراید با عرض $W=5$۷۹
- شکل ۵-۴۰- نمودار ظرفیت گرمایی بورون نیتراید با عرض $W=17$۷۹
- شکل ۵-۴۱- نمودار ظرفیت گرمایی سیلیکون کربن با عرض $W=5$۸۰
- شکل ۵-۴۲- نمودار ظرفیت گرمایی سیلیکون کربن با عرض $W=17$۸۰
- شکل ۵-۴۳- نمودار ظرفیت گرمایی سیلیکون کربن با عرض $W=5$۸۶
- شکل ۵-۴۴- نمودار ظرفیت گرمایی سیلیکون کربن با عرض $W=17$۸۶

فصل اول

فناوری نانو و مقدمه ای بر مفهوم نانو نوار

۱-۱- فناوری نانو

فناوری نانو، یا نانو تکنولوژی، رشته‌ای از دانش کاربردی و فناوری است که جستارهای گسترده‌ای را پوشش می‌دهد. موضوع اصلی آن مهار ماده یا دستگاه‌ها در ابعاد کمتر از میکرومتر، معمولاً حدود ۱ تا ۱۰۰ نانومتر است. در واقع نانو تکنولوژی فهم و بکارگیری خواص جدیدی از مواد و سیستم‌هایی در این ابعاد است که اثرات فیزیکی جدیدی - عمدتاً متأثر از غلبه خواص کوانتومی برخلاف خواص کلاسیک - از خود نشان می‌دهند.

فناوری نانو یک دانش میان رشته‌ای است و به رشته‌هایی چون پزشکی، داروسازی و طراحی دارو، دامپزشکی، زیست‌شناسی، فیزیک کاربردی، مهندسی مواد، ابزارهای نیمه رسانا، شیمی ابرمولکول و حتی مهندسی مکانیک، مهندسی برق و مهندسی شیمی نیز مربوط می‌شود.

تحلیل‌گران بر این باورند که فناوری نانو، فناوری زیستی و فناوری اطلاعات سه قلمرو علمی هستند که انقلاب سوم صنعتی را تشکیل می‌دهند [1].

جذابیت مقیاس نانو مربوط به خواص مواد در این ابعاد است. یافته‌های دانشمندان نشان می‌دهد که خواص مواد در مقیاس نانو بسیار متفاوت از مقیاس میکرو است، به عبارت دیگر اگر ذرات یک ماده‌ی خاص را در حد چند نانومتر کوچک کنیم، این ذرات ویژگی‌های متفاوتی با ذرات بزرگ اولیه خواهند داشت و این در حالی است که کوچک کردن ابعاد ذرات یک تغییر فیزیکی است و ما انتظار نداریم ویژگی‌های اصلی ماده تغییر کند و این امر باعث شده که مقیاس نانو بیش از سایر موارد مورد توجه قرار گیرد.

تحقیقات نشان می‌دهد که این فناوری به میزان گسترده و در محدوده‌ی متنوعی از زمینه‌های فنی، ظرفیت فوق‌العاده‌ای را برای تأثیر در پیشرفت‌های چشمگیر آینده از تولید مواد مستحکم‌تر و سبک‌تر تا کوتاه کردن زمان رساندن داروهای نانو ساختار به جریان گردش خون بدن، افزایش ظرفیت ذخیره‌ی نوارهای مغناطیسی و یا فراهم کردن سوئیچ‌های سریع‌تر در رایانه‌ها دارا می‌باشد [2].

۱-۱-۱- تاریخچه فناوری نانو

در حدود ۴۰۰ سال پیش از میلاد مسیح، دموکریتوس فیلسوف یونانی، برای اولین بار واژه‌ی اتم را که در زبان یونانیبه معنی تقسیم نشدنی است، برای توصیف ذرات سازنده مواد به کار برد، از این رو شاید بتوان او را پدر فناوری و علوم نانو دانست.

ریچارد فاینمن^۱، متخصص فیزیک نظری، در سال ۱۹۵۹ مقاله‌ای تحت عنوان فعالیت‌های نانو در آینده منتشر ساخت و به عنوان پایه گذار این علم شناخته شد. او بعدها جایزه نوبل را در فیزیک دریافت کرد. در سال ۲۰۰۴، امکان جداسازی لایه‌های منفرد گرافیک با ضخامت یک اتم که به آن گرافین گفته می‌شود به صورت آزمایشگاهی توسط آندره گیم^۲ و کونستانتین نواسیلوف^۳ فراهم شد. این دو دانشمند، موفق به دریافت جایزه نوبل فیزیک ۲۰۱۰ برای آزمایش‌های ارزشمندشان و نقش آنها در معرفی این ماده دو بعدی شدند [3,4].

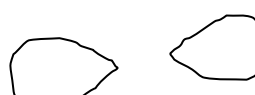
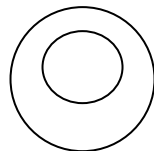
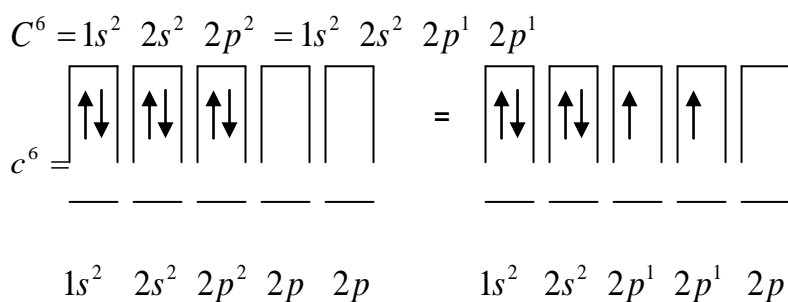
این کشف نقطه عطفی در فناوری نانو از آغاز تا کنون بود که مفهوم اجزای تک اتمی را به واقعیت نزدیک‌تر کرد.

۱-۲- کربن

کربن عنصر شیمیایی با عدد اتمی ۶ و نشان C، عنصری غیر فلزی بوده و به فراوانی در طبیعت یافت می‌شود. کربن عنصری ۴ ظرفیتی است که در همه‌ی بافتهای زنده وجود دارد، هم‌چنین این عنصر در ساختارهای گوناگونی مانند گرافیت، الماس و کربن ۶۰ که اغلب از آنها به عنوان ساختارهای کربنی^۴ نام برده می‌شود یافت می‌شود.

شکل الکترونی آن به صورت $1s^2 2s^2 2p^2$ می‌باشد که از دو الکترون در لایه‌ی K و چهار الکترون در لایه‌ی L تشکیل شده است.

در بررسی اتم کربن در دید اول بنظر می‌رسد که این اتم تنها دو الکترون پیوندی دارد.

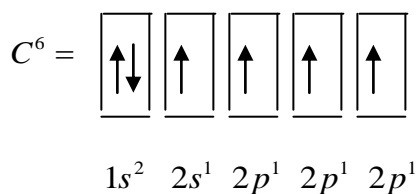


2p

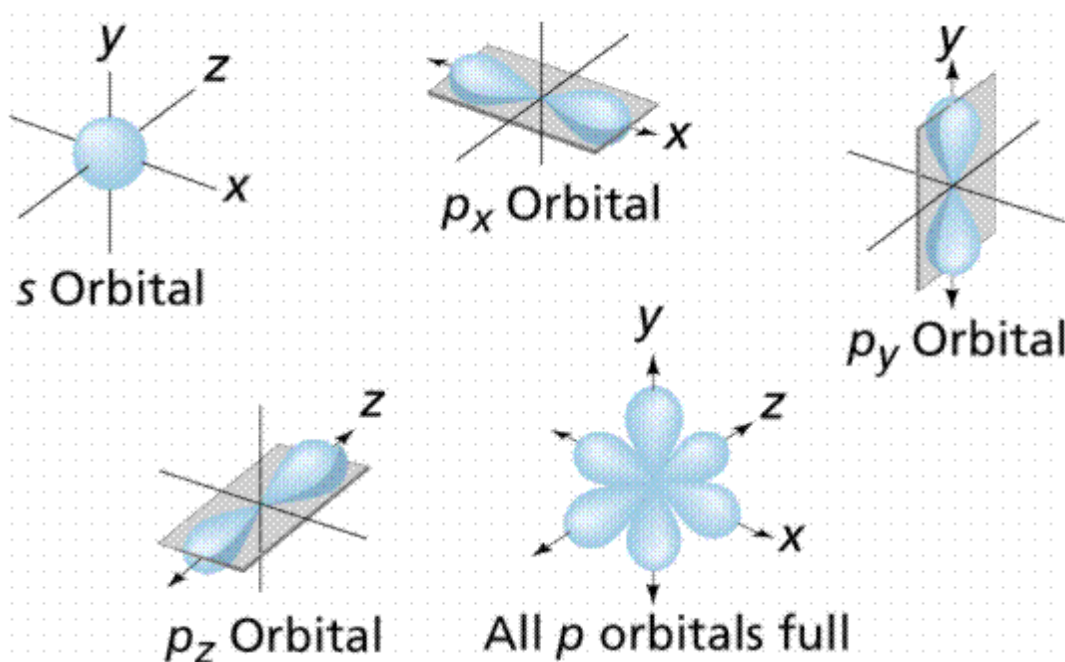
1. Feynman
 2. Andre Geim
 3. Konstantin Novoselov
 4. Carbon allotropes

ولی در واقع اتم کربن زمانی که در پیوند قرار می‌گیرد در یک حالت برانگیخته است. که در آن یک اتم از اوربیتال 2s به اوربیتال خالی 2p می‌رود، بدین ترتیب اتم کربن دارای چهار الکترون پیوندی می‌شود و ساختار اوربیتالی آن به صورت زیر می‌باشد.

$$C^6 = 1s^2 2s^1 2p^1 2p^1 2p^1$$



از اینرو در حالت برانگیخته چهار معادله $|2p_z\rangle, |2p_y\rangle, |2p_x\rangle, |2s\rangle$ وجود خواهد داشت. در حالت پایه اوربیتال S اتم کربن تقارن کروی دارد و اوربیتال P به صورت دمبلی شکل است که حول محور تقارن دارد.



شکل ۱-۱: اوربیتال s و اوربیتال p

دو الکترون اوربیتال‌های 2P ی اتم کربن، الکترون‌های ظرفیت هستند. آرایش حالت‌های الکترونی باید به گونه‌ای تغییر کند تا بیش از دو الکترون به صورت الکترون لایه‌ی ظرفیت قابل استفاده باشند، این تغییر آرایش الکترونی بوسیله‌ی فرایند هیبریداسیون صورت می‌گیرد.

۱-۳- هیبریداسیون^۱

ترکیب اوربیتال‌های اتمی 2S و 2P هیبریداسیون نامیده می‌شود.

در نتیجه‌ی هیبریداسیون یکی از دو الکترون اوربیتال 2S جدا می‌شود و اوربیتال هیبریدی که ترکیبی از اوربیتال 2S و 2P می‌باشد را به وجود می‌آورد. این هیبریداسیون تعداد الکترون‌های ظرفیت را از ۲ به ۴ تغییر می‌دهد. ترکیب یک اوربیتال 2S با N اوربیتال 2P، (۳ و ۳ و ۱) n هیبریداسیون sp^n نامیده می‌شود [5]. اگر اوربیتال هیبریدی از یک اوربیتال 2s و یک اوربیتال 2p تشکیل شده باشد، اوربیتال sp تشکیل خواهد شد. اوربیتال‌های sp خطی است، در این حالت چهار الکترون ظرفیت بوسیله‌ی دو الکترون آزاد که در اوربیتال 2p قرار دارد و دو اوربیتال هیبریدی sp ایجاد می‌شود. اوربیتال‌های sp ایجاد شده را با $|sp_a\rangle, |sp_b\rangle$ نشان می‌دهیم.

این اوربیتال‌های ایجاد شده را می‌توان به صورت ترکیب خطی از تابع موجهای $|2p_x\rangle, |2s\rangle$ اتم کربن نوشت:

$$|sp_a\rangle = c_1|2s\rangle + c_2|2p_x\rangle \quad 1-3-1$$

$$|sp_b\rangle = c_3|2s\rangle + c_4$$

c_i ها در رابطه‌ی بالا ضرایب هستند که باید تعیین شوند.

با استفاده از شرایط تعامد و نرمال به یک بودن:

$$2-3-1$$

$$\langle sp_a | sp_b \rangle = 0$$

$$\langle sp_a | sp_a \rangle = 1 \quad \langle sp_b | sp_b \rangle = 1$$

می‌توان رابطه‌ی بین ضرایب را بدست آورد.

$$3-3-1$$

$$c_1c_3 + c_2c_4 = 0 \quad c_1^2 + c_2^2 = 1$$

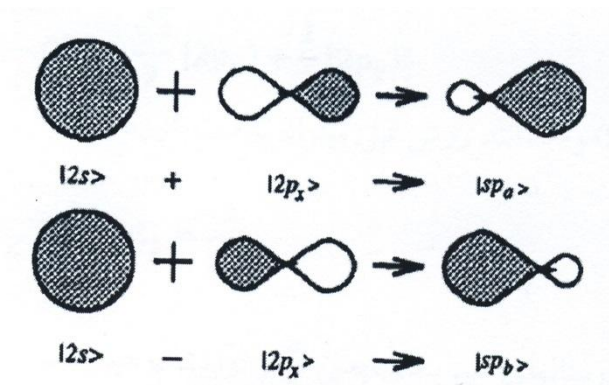
$$c_3^2 + c_4^2 = 1 \quad c_1^2 + c_2^2 = 1$$

رابطه‌ی (۱-۳-۳) با استفاده از این حقیقت که جمع روی مؤلفه‌های $|2s\rangle$ برابر واحد است، بدست آمده است. با استفاده از رابطه‌های بالا می‌توان نتیجه گرفت:

¹. Hybridization

$$|sp_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle + |2p_x\rangle)$$

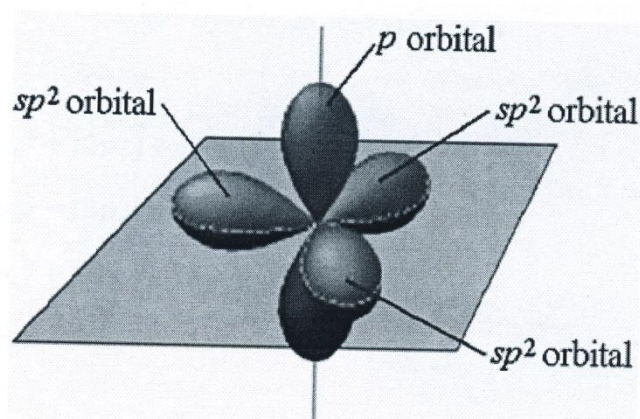
$$|sp_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle - |2p_x\rangle)$$



شکل ۱-۲- هیبریداسیون sp قسمت‌ها تاریک سرهای مثبت تابع موج و قسمت‌های روشن سر منفی تابع موج را نشان می‌دهند [6].

اگر اوربیتال هیبریدی از یک اوربیتال 2s و دو اوربیتال 2p تشکیل شده باشد، آنگاه سه اوربیتال هیبریدی sp^2 خواهیم داشت، در این حالت آرایش الکترونی کربن که شامل آرایش الکترونی پوسته‌ی k است، بدون تغییر باقی می‌ماند و به جای پوسته‌ی L که قبلاً داشتیم، سه اوربیتال هیبریدی sp^2 و یک الکترون آزاد و غیر هیبریدی، که در اوربیتال 2p باقی می‌ماند، خواهیم داشت.

در این حالت هر کدام از سه الکترون اوربیتال هیبریدی sp^2 یک آرایش مثلثی دارند که در یک صفحه‌ی دو بعدی قرار می‌گیرد و جز در راستای گسترش با هم تفاوتی ندارند.



شکل ۱-۳: هیبریداسیون sp^2

$$|sp_a^2\rangle = c_1|2s\rangle - \sqrt{1-c_1^2}2p_y$$

$$|sp_b^2\rangle = c_2|2s\rangle + \sqrt{1-c_2^2}\left\{\frac{\sqrt{3}}{2}|2p_x\rangle + \frac{1}{2}|2p_y\rangle\right\}$$

$$|sp_c^2\rangle = c_3|2s\rangle + \sqrt{1-c_3^2}\left\{-\frac{\sqrt{3}}{2}|2p_x\rangle + \frac{1}{2}|2p_y\rangle\right\}$$

ضرایب در رابطه‌ی (۵-۳-۱) را همانند روش مقابل می‌توان بدست آورد:

$$c_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}, c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad ۶-۳-۱$$

هم‌چنین نوع سومی از اوربیتال‌های هیبریدی، یعنی اگر اوربیتال هیبریدی از یک اوربیتال 2s و سه اوربیتال 2p تشکیل شده باشد، آنگاه چهار اوربیتال هیبریدی sp^3 ایجاد می‌شود. در این حالت آرایش الکترونی کربن شامل آرایش الکترونی پوسته‌ی k است که بدون تغییر باقی مانده و به جای پوسته‌ی اصلی L که قبلاً داشتیم، چهار اوربیتال هیبریدی $2sp^3$ خواهیم داشت.

هر اوربیتال هیبریدی $2sp^3$ در چهار گوشه‌ی یک چهار وجهی قرار می‌گیرد [6].



شکل ۱-۴: هیبریداسیون

$$|SP_a^3\rangle = \frac{1}{2} \{ |2s\rangle + |2p_x\rangle + |2p_y\rangle + |2p_z\rangle \}$$

$$|SP_b^3\rangle = \frac{1}{2} \{ |2s\rangle - |2p_x\rangle - |2p_y\rangle + |2p_z\rangle \}$$

$$|SP_c^3\rangle = \frac{1}{2} \{ |2s\rangle - |2p_x\rangle + |2p_y\rangle - |2p_z\rangle \}$$

$$|SP_d^3\rangle = \frac{1}{2} \{ |2s\rangle + |2p_x\rangle - |2p_y\rangle - |2p_z\rangle \}$$

در طرح‌های پیوندی، زمانی که همپوشانی صورت می‌گیرد، بسته به نحوه‌ی نزدیک شدن اوربیتال‌های اتمی، اوربیتال‌های مولکولی مختلفی تشکیل می‌شود که مهمترین آنها عبارتند از:

۱-۳-۱- اوربیتال مولکولی δ, δ^* :

اگر در تشکیل یک مولکول دو اتمی، دو اوربیتال اتمی از روبرو (دو سر) به هم نزدیک شوند و همپوشانی مثبت (اگر اوربیتال‌های دو اتم از طریق لب‌های هم‌نام با یکدیگر همپوشانی کنند، همپوشانی مثبت است.) داشته باشند، اوربیتال مولکولی بوجود آمده از نوع δ می‌باشد.

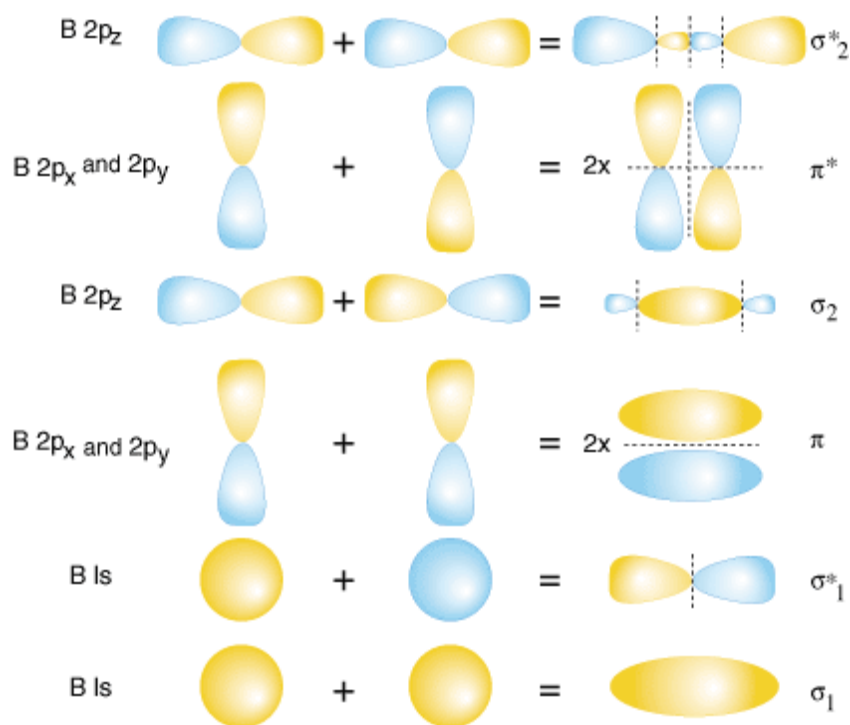
اگر در تشکیل یک مولکول دو اتمی، دو اوربیتال اتمی از روبرو (دو سر) بهم نزدیک شوند و همپوشانی منفی (اگر اوربیتال‌های دو اتم از طریق لب‌های نا هم‌نام با یکدیگر همپوشانی کنند، همپوشانی منفی است.) داشته باشند، اوربیتال مولکولی بوجود آمده از نوع δ^* می‌باشد.

۱-۳-۲- اوربیتال مولکولی π و π^* :

اگر در تشکیل یک مولکول دو اتمی، دو اوربیتال اتمی از پهلو به هم نزدیک شوند و همپوشانی مثبت داشته باشند، اوربیتال مولکولی بوجود آمده از نوع π می‌باشد.

اگر در تشکیل یک مولکول دو اتمی، دو اوربیتال اتمی از پهلو به هم نزدیک شوند و همپوشانی منفی داشته باشند، اوربیتال مولکولی بوجود آمده از نوع π^* می‌باشد.

در کل می‌توان گفت: در هیبریداسیون sp^n ، $n+1$ الکترون اتم کربن، اوربیتال δ و $4-(n+1)$ الکترون هم اوربیتال π را اشغال می‌کنند [6].



شکل ۱-۵: نحوه تشکیل اوربیتال δ و δ^* و π و π^*

۱-۴- گرافین^۱

در سال ۲۰۰۴، آندره گایم و کنستانتین نووسلف، از دانشگاه منچستر موفق به ساخت ماده‌ای به نام گرافین شدند، هرچند به صورت نظری برای اولین بار توسط فیلیپ والاس^۲ در سال ۱۹۴۷ بیان شد. گرافین یکی از آلوتروپهای کربن می‌باشد که تنها ماده‌ی دو بعدی موجود در جهان است [9]. در حقیقت گرافین، یک شبکه لانه‌ی زنبوری دو بعدی است که از پیوند کوالانسی اتم‌های کربن بوجود آمده است و ضخامتش تنها یک اتم کربن است. میتوان گفت که گرافین یک لایه‌ی گرافیت با ضخامت اتمی می‌باشد. به همین علت است که با روی هم قرار گرفتن گرافین‌ها، گرافیت بدست می‌آید. به عبارت دیگر گرافیت از گرافین‌هایی تشکیل شده است که به وسیله‌ی نیروهای جاذبه‌ی ضعیف بین مولکولی روی هم قرار گرفته‌اند.

¹. Graphen

². Philip Valas