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

اثر کشش بر رسانش و نوفه‌ی شلیکی نانونوارهای گرافینی

پایان‌نامهٔ کارشناسی ارشد

رسول فتاحی

استاد راهنما: **دکتر مالک زارعیان**

استاد مشاور: **دکتر علی قربان‌زاده مقدم**

مهر ۱۳۹۱

بسم الله الرحمن الرحیم

تقدیم به پدر و مادر عزیزم

تشکر و قدردانی

در ابتدا خداوند متعال را به خاطر فرصتی که به من داد تا بتوانم در این مدت تحصیل علم کنم، سپاسگزارم. همچنین از پدر و مادر مهربانم و دیگر اعضای خانواده که در این سالها به من کمک کردند، تشکر می‌کنم. بر خود لازم می‌دانم که از استاد راهنمای بزرگوارم جناب آقای دکتر زارعیان و همچنین استاد مشاور گرانقدر جناب آقای دکتر قربان‌زاده که در این مدت از راهنمایی‌ها و مشاوره‌ها و پیشنهادات این عزیزان استفاده کردم تشکر و قدردانی کنم. از همه‌ی اساتید عزیزی که با آنها درس داشته‌ام، استاد ثبوتی، دکتر عابدین‌پور، دکتر نیری، دکتر ندایی، دکتر فضلی، دکتر کلاه‌چی و همچنین دکتر زارعیان بابت تمام چیزهایی که از آنها یاد گرفته‌ام، کمال تشکر را دارم. از داوران عزیزی که زحمت داوری پایان‌نامه را بر عهده گرفتند، دکتر چراغچی، دکتر ابویی و دکتر عابدین‌پور متشکرم. در پایان از تمام هم اتاقی‌هایم درمدت این دو سال، آقایان سجاد احمدی، بهزاد صدری، حسن اصغر زاده، مصطفی رجبی، میثم محمود آبادی و مهدی ماهری، دوستانم در اتاق ۳۰۵ آقایان علیرضا طالب نژاد، محمدرضا فقیهی، فاضل شجاعی و غلامحسین توسلی، اعضای گروه نانو فیزیک ، دانشجویان فیزیک ورودی ۸۹ و همچنین از آقایان بابک زارع، مجتبی رحیمی، آرمان جوادی و سید محمدرضا طاهری تشکر می‌کنم و امیدوارم که از من راضی باشند.

چکیده

گرافین، تک لایه‌ی اتمی از کربن با ساختار شبکه‌ای لانه‌زنبوری است که دارای ساختار نواری شبه نسبیتی می‌باشد. به همین علت ترابرد کوانتومی در ساختارهای گرافینی با رساناهای معمولی به طور اساسی متفاوت است. در اتصالات بالستیک گرافینی پهن، رسانش و ضریب فانو در نقطه‌ی خنثایی بار، مستقل از نوع لبه‌ها، به ترتیب به مقادیر جهانی $\frac{4e^2}{\pi h}$ و $\frac{1}{3}$ می‌رسند.

به تازگی اثر کشش در گرافین توجه زیادی را به خود جلب کرده است. در گرافین کشیده شده، یک میدان شبه مغناطیسی ایجاد می‌شود که ترابرد الکترونی را تحت تأثیر قرار می‌دهد. ما در این پایان نامه اثر کشش را بر عبور الکترون‌ها از یک نانونوار گرافینی بررسی می‌کنیم. محاسبات ما نشان می‌دهد که برای نانونوار گرافینی با لبه‌های نرم، کشش موجب افزایش رسانش و کاهش ضریب فانو می‌شود اما برای نانونوار گرافینی با لبه‌های صندلی شکل فلزی، کشش موجب کاهش رسانش و افزایش ضریب فانو می‌شود. از نتایج ما مشهود است که به ازای برخی پهناهای خاص از نانونوار گرافینی، حالت‌های تشدیدی در سیستم ایجاد می‌شود که ترابرد الکترونی را در نوارهای باریک تحت تأثیر قرار می‌دهد. ما همچنین دریافتیم که کشش و فشردگی اثر یکسانی بر رسانش و نوفه‌ی شلیکی دارند. کشش هیچ تأثیری بر نانونوارهای گرافینی پهن ندارد و رسانش و ضریب فانو به مقادیر جهانی خود می‌رسند.

فهرست

چکیده . . . . . پنج

پیش‌گفتار ۱

۱ آشنایی با گرافین **۵**

۱.۱ بلور دو بعدی ۵

۲.۱ ساختار هندسی ۶

۳.۱ ساختار نواری ۸

۱.۳.۱ برانگیختگی‌های با انرژی کم و معادله‌ی دیراک ۱۱

۲.۳.۱ ویژه توابع معادله‌ی دیراک ۱۴

۴.۱ ترازهای لاندائو ۱۵

۵.۱ تونل زنی کلاین ۱۷

۶.۱ نانونوارهای گرافینی ۲۰

۱.۶.۱ نانونوارهای با لبه‌ی زیگزاگ ۲۰

۲.۶.۱ حالت‌های لبه‌ای ۲۳

۳.۶.۱ نانونوارهای با لبه‌ی صندلی شکل ۲۴

۷.۱ نانو نوارهای با لبه‌ی نرم ۲۶

۸.۱ نوفه‌ی شلیکی و رسانش در اتصالات گرافینی ۲۷

۲ کشش در گرافین ۳۳

۱.۲ ظهور میدان پیمانه‌ای در اثر کشش ۳۳

۲.۲ میدان شبه مغناطیسی ۳۵

۳.۲ ایجاد گاف در گرافین با اعمال کشش ۳۸

۴.۲ کشش تک محوری در گرافین ۳۹

۱.۴.۲ ایجاد گاف ۳۹

۲.۴.۲ جابه‌جایی نقاط دیراک ۴۱

۵.۲ تأثیر کشش موضعی روی ساختار الکترونی گرافین ۴۲

۱.۵.۲ تنظیم باریکه ۴۲

۲.۵.۲ محدودیت ۴۴

۳.۵.۲ حالت‌های سطحی ۴۵

۴.۵.۲ حد باریک ۴۶

۶.۲ کشش خارج از صفحه ۴۷

۷.۲ تداخل کشش با میدان مغناطیسی واقعی ۴۸

۸.۲ ایجاد محدودیت کوانتومی در گرافین با استفاده از کشش ۴۹

۹.۲ مدل دیراک-کرونیگ- پنی برای گرافین کشیده ۵۱

۳ رسانش و نوفه‌ی شلیکی یک نانونوار گرافینی کشیده شده با لبه‌های نرم و صندلی شکل فلزی ۵۶

۱.۳ مدل ۵۷

۲.۳ محاسبه‌ی ویژه مقادیر و ویژه توابع ناحیه‌ی گرافینی کشیده شده ۵۸

۳.۳ رسانش و ضریب فانو ۶۲

۱.۳.۳ نتایج مربوط به لبه‌ی نرم ۶۳
۲.۳.۳ نتایج مربوط به لبه‌ی صندلی شکل فلزی ۶۹
۴.۳ نتیجه گیری ۷۵

آ محاسبه‌ی احتمال عبور الکترون‌ها ازباریکه‌ی گرافینی کشیده شده با لبه‌ی نرم ۷۶

ب محاسبه‌ی احتمال عبور الکترون‌ها از باریکه‌ی گرافینی کشیده شده با لبه‌ی صندلی شکل فلزی ۸۰

لیست تصاویر

۱ بالا سمت راست: گرافیت. بالا سمت چپ: گرافین. پایین سمت راست : فولرین. پایین سمت چپ: نانو لوله ۱

۱.۱ چپ: ساختار گرافین در فضای واقعی را نشان می‌دهد، نقاط Aو B بیانگر دو زیر شبکه‌ی مثلثی براوه هستند، بردارهای a_1 و a_2 معرف بردارهای سلول واحد می‌باشند و بردارهای δ_1 و δ_2 و δ_3 بردارهای همسایه‌ی اول هستند. راست: ساختار گرافین در فضای وارون را نشان می‌دهد. نقاط k'وk به نقاط دیراک معروفند که سطح فرمی در این نقاط قرار دارد. بردارهای b_1 و b_2، بردارهای شبکه‌ی وارون می‌باشند. نقطه‌ی M در لبه‌های منطقه‌ی اول بریلوئن قرار دارد و نقطه‌ی مرکزی Γ متناظر با مرکز منطقه‌ی اول بریلوئن می‌باشد [۱]. ۷

۲.۱ چپ: طیف انرژی گرافین در تقریب تنگ بست با در نظر گرفتن انرژی جهش همسایه های اول و دوم. راست: بزرگنمایی طیف انرژی در نزدیکی نقاط دیراک [۱]. ۱۳

۳.۱ بالا: چگالی ترازهای انرژی در گاز اکترون دو بعدی. پایین: چگالی ترازهای انرژی در گرافین [۲]. ۱۷

۴.۱ بالا: تونل زنی در گرافین. پایین: تونل زنی در نیمرساناهای معمولی. دامنه‌ی تابع موج الکترون با فرود عمودی در گرافین ثابت می ماند در صورتی که در نیمرساناهای معمولی به صورت نمایی کاهش می‌یابد. اندازه‌ی کره دامنه‌ی تابع موج ورودی و عبوری را نشان می‌دهد [۳]. ۱۸

۵.۱ چپ: احتمال عبور برای سدهای پتانسیل با شدت‌های $V_0 = 0.05t, 0.1t$ و پهنای $L = 150a$. راست: احتمال عبور برای سدهای پتانسیل با شدت‌های $V_0 = 0.05t, 0.1t$ و پهنای $L = 300a$. a ثابت شبکه است [۴] ۱۹

۶.۱ نانونوارهای با لبه های زیگزاگ و صندلی شکل [۵]. ۲۰

۷.۱ (a) ساختار نواری نانونوار زیگزاگ. (b) ساختار نواری نانونوار صندلی شکل نیمرسانا. (c) ساختار نواری نانونوار صندلی شکل فلزی [۵]. ۲۳

۸.۱ یک باریکه‌ی گرافینی با پهنای W که بین دو الکترود که در فاصله‌ی L از هم قرار دارند، واقع شده است. با ولتاژ منبع جریان درون باریکه ایجاد می‌شود. با ولتاژ درگاهی که در شکل نشان داده نشده است، تمرکز حاملین بار در اطراف نقطه‌ی خنثایی بار تنظیم می‌شود [۶]. ۳۰

۹.۱ وابستگی رسانش و ضریب فانو به پتانسیل شیمیایی باریکه‌ی گرافینی. منحنی‌های خط چین مربوط به لبه‌ی صندلی شکل فلزی و منحنی‌های شامل خط مربوط به لبه‌ی نرم است [۶]. ۳۱

۱۰.۱ بالا: وابستگی رسانش و ضریب فانو به نسبت عرض به طول باریکه‌ی گرافینی. منحنی‌های خط چین با دایره‌های توخالی مربوط به لبه‌ی صندلی شکل فلزی و منحنی‌های شامل خط مربوط به لبه‌ی نرم است [۶]. ۳۲

۱.۲ کشش طراحی شده می‌تواند میدان شبه مغناطیسی یکنواخت در گرافین ایجاد کند. (a) انحراف یک دیسک گرافینی که میدان شبه مغناطیسی یکنواخت تولید می‌کند. (b) جهت گیری شبکه‌ی بلوری گرافین نسبت به کشش. گرافین در امتداد سه جهت بلور شناسی معادل کشیده یا فشرده می‌شود. (c) پیکان‌ها، توزیع نیروهای اعمال شده بر محیط دیسک را نشان می‌دهند که کشش مورد نظر را ایجاد خواهند کرد. رنگ یکنواخت درون دیسک یکنواخت بودن B_s را نشان می‌دهد. (d) ایجاد B_s یکنواخت را با اعمال نیروهای عمود بر محیط نمونه نشان می‌دهد. طول پیکان‌ها کشش موضعی مورد نیاز را نشان می‌دهد [۷]. ۳۶

۲.۲ کشش گرافین در جهت $< 100 >$ یک میدان شبه مغناطیسی ایجاد می‌کند که در مرکز نسبتاً یکنواخت است. (a) توزیع B_s برای یک شش گوشی منتظم کشیده شده در امتداد $< 100 >$. (b) چگالی حالات به هنجار شده برای شش گوشی منتظم واقع در (a) با $L = 30nm$ و $\Delta_m = 1\%$. منحنی خط چین مربوط به مورد بدون کشش و بدون میدان مغناطیسی خارجی است. منحنی خطی بالایی، کوانتش لاندائو القا شده به وسیله‌ی $B = 10T$ را نشان می‌دهد. میدان شبه مغناطیسی با $B_s \approx 7T$ نزدیک مرکز شش گوشی، کوانتش نشان داده شده به وسیله‌ی منحنی خطی پایینی را نشان می‌دهد. مقایسه بین منحنی‌ها نشان می‌دهد که چگالی حالات محدود بین ترازهای شبه لاندائو ناشی از اندازه‌ی کوچک نمونه در محاسبات تنگ-بست می‌باشد [۷]. ۳۸

۳.۲ (a) کشش با تقارن مثلثی می‌تواند با قراردادن گرافین بر روی سطوح برجسته ایجاد شود. امواج نشان داده شده در (a) منجر به توزیع میدان شبه مغناطیسی رسم شده در (b) می‌شود. B_s بین $\pm 0.5T$ با تناوب دو مرتبه کمتر نسبت به (a) تغییر می‌کند. (c) نوارهای کم انرژی القا شده به وسیله‌ی کشش متناوب [۷]. ۳۹

۴.۲ هندسه‌ی تنش. جهت زیگزاگ شبکه‌ی لانه زنبوری همواره موازی با محور x است [۸]. ۳۹

۵.۲ چپ: رسم $\frac{t_1}{t_2}$ و $\frac{t_3}{t_2}$ به عنوان تابعی از کشش (ε) و θ . خطوط بسته منحنی‌های کشش همسانگرد و خطوط دارای پیکان متناظر با، مسیر نقطه‌ای ($\frac{t_1}{t_2}, \frac{t_3}{t_2}$) در یک زاویه‌ی ثابت نسبت به محور x هنگامی که کشش افزایش می‌یابد، هستند. در ناحیه‌ی سایه خورده طیف بدون گاف است. $\varepsilon \approx 0.23$ متناظر با گاف آستانه است. راست: وابستگی زاویه‌ای پارامترهای جهش برای $\varepsilon = 0.05$ و $\varepsilon = 0.23$ [۸]. ۴۰

۶.۲ ساختار نواری گرافین کشیده شده درجهت زیگزاگ به مقدار $\varepsilon = 0.2$ در (a) و به مقدار $\varepsilon = 0.23$ در (b). توجه کنید چگونه با افزایش کشش، نقطه‌ی زینی به انرژی صفر نزدیک می‌شود. در شکل (b) دقیقاً در مقدار بحرانی کشش، مخروطهای دیراک به یکدیگر رسیده‌اند. (c) مشاهده‌ی ساختار نواری به ترتیب از نماهای k_x و k_y [۸]. ۴۲

۷.۲ چپ: احتمال عبور برای $L = 10,300$ و $\delta t = 0.1$ و $E = 0.2$ با (پایین) و بدون (بالا) پتانسیل الکتروستاتیک . راست: فضای فاز به ترتیب برای سد پتانسیل برداری محض، سد الکتروستاتیک محض و ترکیبی از هر دو نوع. مقاطع سایه زده شده، ناحیه‌ای از زوایای فرودی که به وسیله‌ی سد فیلتر نمی‌شوند را نشان می‌دهد [۹]. ۴۴

۸.۲ (a) پراکندگی حل‌های محدود $E_n(k_x)$ برای $\delta t = 0.1$ و $L = 200$. (b) رسم چگالی عبور متناظر با شکل (a). (c) نواحی ۱و۲و۳ بحث شده در متن . (d) پراکندگی خطی مدها برای سد باریک [۹] ۴۵

۹.۲ ورقه‌ی گرافینی مستطیل شکل معلق [۱۰] ۴۷

۱۰.۲ احتمال عبور از طریق یک ورقه‌ی گرافینی معلق مستطیلی شکل به صورت تابعی از زاویه‌ی فرودی. طول ورقه $L = 100nm$ ، چگالی حاملین بار $\rho = 1012cm^{-2}$ و میزان تغییر شکل در راستای z برابر با $h = 3nm$ است. دو نمودار متناظر با دو وادی ناحیه‌ی بریلوئن هستند [۱۰]. ۴۸

۱۱.۲ طرح اثر مورد انتظار در حضور کشش و میدان مغناطیسی ثابت. هندسه همان چیزی است که در شکل (۹.۲) در نظر گرفته شده است. کشش، جریان‌هایی ایجاد می‌کند که منجر به پراکندگی رو به عقب بین حالت‌های لبه‌ای دستواره می‌شود. تمرکز کمی ناخالصی این اثر را کاهش می‌دهد [۱۰]. ۴۹

۱۲.۲ بالا: کشش اعمال شده بر ورقه‌ی گرافینی به وسیله‌ی نوک سوزنی STM با فرض صفر بودن ولتاژ درگاهی ناشی از زیر لایه‌ی سیلیکونی. پایین: میدان شبه مغناطیسی ایجاد شده در ورقه‌ی گرافینی در اثر اعمال کشش مذکور [۱۱]. ۵۱

۱۳.۲ طرح گرافین ذکر شده در متن که بین دو الکترود فلزی قرار گرفته است. زاویه‌ی θ جهت گیری شبکه‌ی لانه زنبوری نسبت به جهت ترابردی x را معلوم می‌کند [۱۲]. ۵۲

۱۴.۲ رسانندگی و ضریب فانو بر حسب انرژی [۱۲]. ۵۳

۱۵.۲ رسم چگالی انرژی بر حسب تکانه‌ی عرضی در مدولاسیون‌های مختلف کشش $(r_{\theta x})$ و میدان الکتروستاتیک (r_0) [۱۲]. ۵۴

۱۶.۲ رسانندگی و ضریب فانو میانگین گیری شده برای مدولاسیون‌های مختلف کشش و میدان الکتروستاتیک [۱۲]. ۵۴

۱.۳ نانونوار گرافینی کشیده در راستای لبه‌ی زیگزاگ که بین دو الکترود قرار گرفته است. لبه‌ی نرم با رنگ مشکی کشیده شده است. ۵۷

۲.۳ نمودارهای ضریب فانو و رسانش بر حسب نسبت عرض به طول نانونوار گرافینی کشیده با لبه‌ی نرم به ازای Sهای مختلف و در حالتی که پتانسیل شیمیایی آن برابر صفر است. ۶۴

۳.۳ نمودارهای ضریب فانو و رسانش برحسب میزان تغییر یافته‌ی پارامتر جهش در اثر کشش نانونوار گرافینی با لبه‌ی نرم به ازای پهناهای مختلف و در حالتی که پتانسیل شیمیایی آن برابر صفر است. ۶۷

۴.۳ نمودارهای ضریب فانو و رسانش بر حسب پتانسیل شیمیایی نانونوار گرافینی کشیده شده با لبه‌ی نرم به ازای Sهای مختلف و پهناهای خاص از نانونوار گرافینی. ۶۸

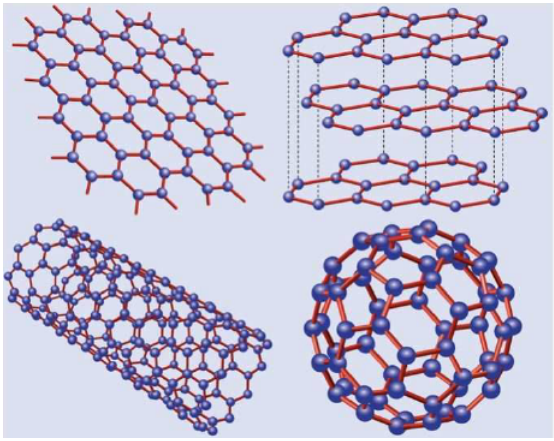
۵.۳ نمودارهای ضریب فانو و رسانش بر حسب نسبت عرض به طول نانونوار گرافینی کشیده با لبه‌ی صندلی شکل فلزی به ازای Sهای مختلف و در حالتی که پتانسیل شیمیایی آن برابر صفر است. . ۷۰

۶.۳ نمودارهای ضریب فانو و رسانش برحسب میزان تغییر یافته‌ی پارامتر جهش در اثر کشش نانونوار گرافینی با لبه‌ی صندلی شکل فلزی به ازای پهناهای خاص از آن و در حالتی که پتانسیل شیمیایی‌اش برابر صفر است. ۷۲

۷.۳ نمودارهای ضریب فانو و رسانش بر حسب پتانسیل شیمیایی نانونوار گرافینی کشیده شده با لبه‌ی صندلی شکل فلزی به ازای Sهای مختلف و پهناهای خاص از نانونوار گرافینی. ۷۳

پیش‌گفتار

کربن یکی از پر هیاهوترین عناصر در جدول تناوبی است. توانایی اتم‌های کربن در تشکیل شبکه‌های پیچیده [۱۳] اساس شیمی آلی و مبنایی برای وجود حیات در عالم است. کربن ساختارهای هندسی مختلفی را به خود می‌گیرد، که برخی از آنها مانند الماس و گرافیت از زمان‌های قدیم شناخته شده‌اند و بعضی دیگر مانند فولرین [۱۴—۱۶] و نانو لوله‌های کربنی [۱۷] اخیراً کشف شده‌اند. آلوتروپ‌های مختلف کربن عبارتند از: الماس و گرافیت در سه بعد، نانو لوله‌ها در یک بعد و فولرین‌ها در صفر بعد. جالب است که آلوتروپ دوبعدی آن، گرافین، در سال ۲۰۰۴ توسط Geim و Novoselov به صورت تجربی ساخته شد [۱۸] و به سرعت توجه زیادی را به خود جلب کرد.



شکل ۱: بالا سمت راست: گرافیت. بالا سمت چپ: گرافین. پایین سمت راست : فولرین. پایین سمت چپ: نانو لوله

یکی از ویژگی‌های منحصر به فرد در گرافین، طبیعت خاص حاملین بار است. در فیزیک ماده چگال، معمولاً معادله‌ی شرودینگر در توصیف خواص الکترونی مواد موفق است. در گرافین، هر چند که هیچ مشخصه‌ی نسبیتی برای الکترون وجود ندارد، برهم‌کنش آنها در حضور شبکه‌ی لانه زنبوری گرافین، شبه ذرات جدیدی را که در حد انرژی‌های کم با دقت خوبی از معادله‌ی دیراک پیروی می‌کنند، ارائه

می‌دهد که سرعت متوسط آنها حدود $10^6\frac{m}{s}$ است. چنین شبه ذراتی را فرمیون‌های نسبیتی بدون جرم دیراک می‌گویند که الکترون‌هایی با جرم سکون صفر هستند. از خصوصیات مهم گرافین اثر کوانتومی نیمه صحیح هال و امکان مشاهده‌ی این اثر در دمای اتاق است. در گرافین فضای بین ترازهای انرژی متناسب با $\frac{B}{E}$ است که B میدان مغناطیسی و E انرژی فرمیون‌های بدون جرم دیراک است. در حد انرژی کم فضای بین ترازهای انرژی بسیار بزرگ شده و مشاهده‌ی اثر کوانتومی هال در دمای اتاق امکان‌پذیر می‌شود. در گرافین حالت‌های الکترونی نزدیک انرژی صفر ترکیبی همدوس از دو ویژه حالت شبه اسپینی است که فاز نسبی دو ویژه حالت با جهت بردار موج الکترون داده می‌شود. خواص ترابردی الکترون‌ها در گرافین به خاطر رفتار دیراک گونه‌ای که از خود نشان می‌دهند اخیراً مورد توجه قرار گرفته است [۱۹—۲۱]. در اتصالات بالستیک گرافینی با پهنای بزرگ توان افت و خیز جریان در دماهای پایین که به نوفه‌ی شلیکی معروف است همان مقداری به‌دست می‌آید که در سیستم‌های فلزی مختل شده، که ترابرد الکترونی در آنها به صورت پخشی است، به‌دست آمده بود و این تفاوت اساسی بین گرافین و رساناهای معمولی به خاطر دینامیک کوانتوم نسبیتی فرمیون‌های دیراک در گرافین می‌باشد که یک حرکت کتره‌ای به نام "Zitterbewegung" [۲۲] انجام می‌دهند. همچنین در این اتصالات به ازای پهناهای بزرگ از نوار گرافینی رسانش به یک مقدار کمینه می‌رسد [۶].

اخیراً دیده شده است که اعمال کشش به گرافین می‌تواند تغییری اساسی بر ساختار الکترونی این ماده ایجاد کند. کشش در گرافین می‌تواند سبب ایجاد میدان شبه مغناطیسی شود که تفاوت اصلی این میدان با میدان مغناطیسی واقعی در این است که در اثر ظهور این میدان شبه مغناطیسی تقارن وارونی زمانی درست بر خلاف میدان مغناطیسی واقعی شکسته نمی‌شود. از جمله کارهای انجام گرفته در این زمینه می‌توان به ظهور ترازهای لاندائو در اثر کشش غیر یکنواخت گرافین و تشابه نسبی آن با ترازهای لاندائو ناشی از میدان مغناطیسی واقعی اشاره کرد [۷]. همچنین نشان داده شده است که با استفاده از کشش می‌توان گرافین را گاف‌دار کرد، به طوری که اگر گرافین در جهت زیگزاگ از یک مقدار آستانه بیشتر کشیده شود، طیف انرژی آن گاف‌دار خواهد شد [۸].

از جمله کارهای دیگری که در زمینه‌ی کشش انجام شده است، مربوط به تنظیم باریکه‌ی الکترونی است. به این معنا که با افزایش طول ناحیه‌ی گرافینی کشیده شده می‌توان باریکه‌ی الکترونی را طوری تنظیم کرد که تنها در ناحیه‌ی خاصی از زوایای فرودی الکترون، احتمال عبور از ناحیه‌ی گرافینی کشیده شده وجود داشته باشد [۹]. از جدیدترین کارهای انجام شده در زمینه‌ی کشش می‌توان به ایجاد محدودیت کوانتومی در گرافین با استفاده از کشش اشاره کرد. در حقیقت در این کار نشان داده اند با استفاده از میدان شبه مغناطیسی ناشی از کشش می‌توان در حرکت فرمیون‌های دیراک محدودیت ایجاد کرد چرا که در این صورت آنها شروع به حرکت دایره‌ای می‌کنند [۱۱].

در این پایان‌نامه، اثر کشش بر رسانش و نوفه‌ی شلیکی نانونوارهای گرافینی با لبه‌های نرم و صندلی شکل فلزی بررسی شده است. روش کار به این صورت است که یک نانونوار گرافینی را بین دو الکترود فلزی با پتانسیل شیمیایی فوق العاده زیاد قرار می‌دهیم سپس با استفاده از شرط پیوستگی توابع موج احتمال عبور را محاسبه می‌کنیم و از طریق فرمول بندی لاندائور-بوتیکر به محاسبه‌ی رسانش و نوفه‌ی شلیکی برای لبه‌های مختلف از قبیل: لبه‌ی نرم و لبه‌ی صندلی شکل فلزی می‌پردازیم.

در فصل اول به معرفی گرافین و سپس به محاسبه‌ی هامیلتونی گرافین با استفاده از تقریب تنگ بست همسایه‌ی اول مشغول خواهیم شد. در ادامه به محاسبه‌ی ویژه توابع و ویژه مقادیر که از هامیلتونی دیراک به دست می‌آیند، خواهیم پرداخت و به طیف انرژی در حد برانگیختگی‌های کم انرژی توجه خواهیم کرد. سپس در مورد برخی ویژگی‌های گرافین مانند تونل‌زنی کلاین، ترازهای لاندائو، نانو نوارهای گرافینی و رسانش و ضریب فانو در اتصالات بالستیک گرافینی صحبت شده است. در فصل دوم در مورد اثر کشش در گرافین و ظهور میدان پیمانه‌ای و میدان شبه مغناطیسی در گرافین کشیده شده بحث خواهیم کرد. در ادامه به کارهای انجام گرفته شده در زمینه‌ی کشش گرافین از قبیل: گاف‌دار کردن گرافین با استفاده از کشش، کشش خارج از صفحه، ایجاد محدودیت کوانتومی در گرافین با استفاده از کشش، تداخل میدان مغناطیسی واقعی با کشش و مدل دیراک-کرونیگ-پنی برای گرافین کشیده شده به صورت متناوب، اشاره خواهیم کرد.

در فصل سوم در مورد کشش نانونوارهای گرافینی با لبه‌های مختلف و اثر آن بر رسانش و نوفه‌ی شلیکی بحث کرده و نتایج آن را ذکر کرده‌ایم.

فصل اول

آشنایی با گرافین

۱.۱ بلور دو بعدی

نزدیک به هفتاد سال پیش دو فیزیکدان معروف به نام‌های لاندائو [۲۳] و پایرلز [۲۴] استدلال کردند که شبکه‌ی دوبعدی به لحاظ ترمودینامیکی ناپایدار است و نمی‌تواند وجود داشته باشد. نظریه‌ی آنها به این نکته اشاره داشت که سهم افت و خیزهای گرمایی در بلور با ابعاد کم، هم مرتبه و قابل مقایسه با فاصله‌ی ذرات در نقاط شبکه‌ای است. این بحث توسط مرمین توسعه داده شد و توسط مشاهدات تجربی دیگران تأیید گردید، به این ترتیب که دمای ذوب یک فیلم نازک با کاهش ضخامت آن شدیداً کاهش یافت و هنگامی که ضخامت آن به حدود ۱۲ لایه رسید، ناپایدار شد.

یک ورقه‌ی منعطف که در فضای سه بعدی قرار دارد به علت وجود افت و خیزهای خمشی خطرناک با طول موج بلند، باید دچار چین خوردگی شود [۲۵]. بنابراین بلور دو بعدی می‌تواند به شکل موجدار وجود داشته باشد.

منظور از موجدار بودن، وجود افت و خیزهای ناهمواری[۱] با ارتفاع نوعی $L^{0.6}$ است که L اندازه‌ی نمونه می‌باشد. علاوه بر این ناهمواریها، نقصها[۲] نیز نقش مهمی در پایداری ترمودینامیکی بلورهای دو بعدی دارند [۲۶]. در سال ۲۰۰۴ میلادی بلور دوبعدی پایدار از اتم کربن به نام گرافین در آزمایشگاه گروه Geim ساخته شد [۱۸]. چنین لایه‌ی دو بعدی که از گرافیت به دست آمده، شدیداً پایدار است. علت پایداری گرافین وجود ناهمواریها و نقصها در آن می‌باشد که نقش مهمی در ویژگیهای الکترونی آن بازی می‌کنند [۲۷]. در این بلور دوبعدی حاملین بار می‌توانند بدون پراکندگی مسافت حدود هزار فاصله‌ی بین اتمی را بپیمایند که این بیانگر آن است که حاملین بار در گرافین تحرک پذیری[۳] بالایی دارند.

۲.۱ ساختار هندسی

کربن چهار الکترون ظرفیت دارد و ترجیح می‌دهد با همسایه‌های اولش پیوند تشکیل دهد. شکل‌های رایج پیوندزنی، تتراهدرال[۴] در الماس و مثلثی[۵] در گرافین می‌باشند. پیوند مثلثی قوی‌تر است و در طبیعت بیشتر یافت می‌شود. در گرافین سه همسایه از کربن در صفحه قرار دارند و پیوندهای سه گانه در صفحه با سه همسایه‌ی اول، پیوندهای σ نامیده می‌شوند. این پیوندها به دلیل اینکه انرژی پیوندی بزرگی دارند، قوی هستند و همچنین نوارهای الکترونی پر شده در گرافیت می‌باشند. الکترون چهارم برای هر کربن در اربیتال p_z قرار دارد که عمود بر صفحه می‌باشد. این نوار نیمه پر است و نوارهای ظرفیت و رسانش که نزدیک به سطح فرمی می‌باشند را فراهم می‌کنند.

---

۱ Roughness fluctuations

۲ Defects

۳ Mobility

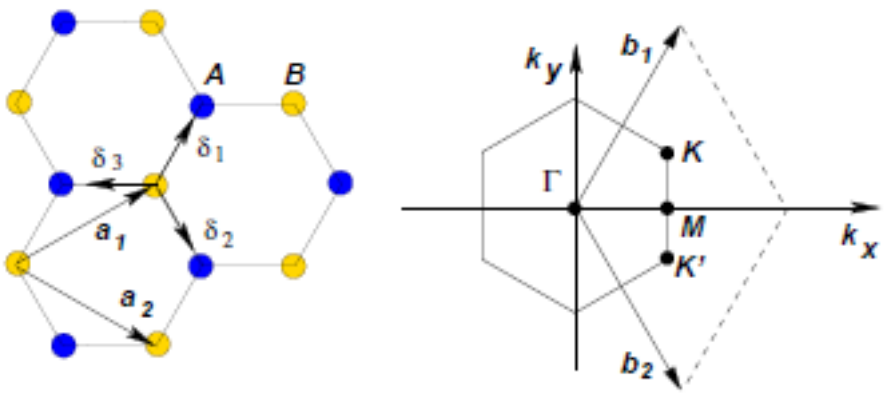
۴ Tetrahedral

۵ Trigonal

این پیوندها، به پیوند π معروفند [۲۸]. با این توضیح، گرافین تک لایه‌ای از اتم‌های کربن است که به صورت شش ضلعی در کنار هم قرار گرفته‌اند و تشکیل یک شبکه‌ی لانه زنبوری را می‌دهند. با توجه به اینکه شبکه‌ی لانه زنبوری، یک شبکه‌ی براوه[۱] نیست می‌توان هر شش گوشی را به دو زیر شبکه‌ی مثلثی براوه تقسیم کرد. بردارهای شبکه‌ی واقعی و شبکه‌ی وارون به صورت زیر می‌باشند:

$$a_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), a_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}) \tag{۱.۱}$$

$$b_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), b_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}) \tag{۲.۱}$$



شکل ۱.۱: چپ: ساختار گرافین در فضای واقعی را نشان می‌دهد، نقاط A و B بیانگر دو زیر شبکه‌ی مثلثی براوه هستند، بردارهای a_1 و a_2 معرف بردارهای سلول واحد می‌باشند و بردارهای δ_1 و δ_2 و δ_3 بردارهای همسایه‌ی اول هستند. راست: ساختار گرافین در فضای وارون را نشان می‌دهد. نقاط k و k' به نقاط دیراک معروفند که سطح فرمی در این نقاط قرار دارد. بردارهای b_1 و b_2، بردارهای شبکه‌ی وارون می‌باشند. نقطه‌ی M در لبه‌های منطقه‌ی اول بریلوئن قرار دارد و نقطه‌ی مرکزی Γ متناظر با مرکز منطقه‌ی اول بریلوئن می‌باشد [۱].

[۱] Bravais lattice