



دانشگاه زنجان

دانشکده علوم - گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

عنوان:

# جریان جوزفسون در گرافین بالستیک با ساختار قرص کاربینو

نگارش:

مینا خلیل زاده

اساتید راهنما:

دکتر رامین محمدخانی

دکتر بابک عبداللہی پور

زمستان ۱۳۹۱

الله الرحمن الرحيم

# قدردانی

اعتراف که نه زبان سپاس تو را دارم، نه زبان سپاس از بندگان تو. پس به احترام،  
از راهنمایی‌های اساتید بزرگووارم آقایان دکتر بابک عبداللهی پور و دکتر رامین محمدخانی در انجام این پروژه،  
تشکر می‌کنم.  
از همه‌ی دوستان و هم‌کلاسی‌هایم در دانشگاه زنجان که از همراهی و دلگرمی ایشان بهره‌مند بوده‌ام؛ و بسیار،  
از خانواده‌ی بزرگووارم، پدر و مادر عزیزم به‌خاطر سال‌ها محبت بی‌دریغ، و برادر عزیزم برای حضور دلگرمش  
سپاسگزارم.

# چکیده

گرافین یک ساختار دو بعدی تک لایه از اتم‌های کربن است که در آرایش لانه زنبوری چیده شده‌اند. حامل‌های بار در این ساختار به صورت فرمیون‌های دیراک بدون جرم رفتار می‌کنند و اثرات جالب توجهی مانند پارادوکس کلاین و رفتار شبه پخشی از خود نشان می‌دهند. یک لایه از گرافین که در تماس با ابررسانا است به واسطه اثر مجاورت خاصیت ابررسانایی پیدا می‌کند. بازتاب اندریف در گرافین به دو شکل معمولی و ویژه صورت می‌گیرد که از ساختار خاص گرافین نتیجه می‌شود. ما در این پایان‌نامه، یک اتصال جوزفسون گرافینی با ساختار قرص کاربینو را در نظر می‌گیریم که در آن ابررسانای داخلی قرصی به شعاع  $R_1$  و گرافین ناحیه‌ای به پهنای  $L$  بین شعاع  $R_1$  و  $R_2$  و ابررسانای بیرونی باقی فضا را اشغال کرده است. برانگیختگی‌های الکترون و حفره در گرافین در حالت ابررسانایی از معادله دیراک-بوگولیوبوف-دژن تبعیت می‌کنند. ما با استفاده از حل این معادله و استفاده از روش پراکندگی، انرژی ترازهای مقید اندریف را به دست آورده و جریان جوزفسون عبوری از اتصال را مطالعه می‌کنیم. نتایج ما نشان می‌دهند جریان بحرانی در نقطه دیراک که در آن چگالی حامل‌های بار صفر است دارای مقدار غیر صفر است، و کمینه جریان بحرانی در نقطه دیراک برای ساختار قرص کاربینو وابسته به هندسه سیستم بوده و با افزایش نسبت  $R_1/L$  افزایش می‌یابد.

واژه‌های کلیدی: گرافین، جریان جوزفسون، قرص کاربینو

# فهرست مطالب

یک	فهرست مطالب
سه	فهرست شکل ها
شش	پیشگفتار
۱	۱ گرافین و ویژگی های آن
۱	۱.۱ اشکال مختلف کربن
۳	۲.۱ جداسازی گرافین
۴	۳.۱ ساختار هندسی و نواری گرافین
۶	۱.۳.۱ رابطه پاشندگی خطی
۱۰	۲.۳.۱ معادله ی دیراک
۱۱	۴.۱ اثر هال
۱۲	۱.۴.۱ اثر هال کلاسیکی
۱۳	۲.۴.۱ اثر هال کوانتومی
۱۴	۳.۴.۱ اثر هال کوانتومی در گرافین
۱۷	۵.۱ اثر میدان الکتریکی
۱۸	۶.۱ الکترون های کایرال دیراک
۱۹	۱.۶.۱ تونل زنی کوانتومی
۲۰	۲.۶.۱ پارادوکس کلاین
۲۱	۷.۱ ترابرد شبه پخشی
۲۳	۸.۱ کاربردهای گرافین
۲۵	۲ اتصالات جوزفسون نرمال و گرافینی
۲۵	۱.۲ اتصال نرمال- ابرسانا(SN)
۲۶	۱.۱.۲ بازتاب اندریف
۲۸	۲.۲ معادله ی بوگولیوبوف- دژن و تقریب شبه کلاسیک
۳۰	۳.۲ اتصال جوزفسون نرمال SNS

۳۱	حالت‌های مقید اندریف	۱.۳.۲
۳۴	برانگیختگی‌های شبه ذرات در گرافین در حضور ابرسانا	۴.۲
۳۷	اتصال تمیز گرافین و ابرسانا (اتصال $SN$ گرافینی)	۵.۲
۳۸	پایه‌های حالت‌های پراکندگی داخل نرمال	۱.۵.۲
۴۰	پایه‌های حالت‌های پراکندگی داخل ابرسانا	۲.۵.۲
۴۴	بازتاب اندریف در گرافین	۶.۲
۴۷	اتصال جوزفسون ( $SNS$ ) گرافینی عریض	۷.۲
۵۲	۳ اتصال جوزفسون گرافینی با ساختار قرص کاربینو	
۵۳	معادله‌ی $DBdG$ در مختصات قطبی	۱.۳
۵۵	پایه‌های حالت‌های پراکندگی داخل نرمال	۲.۳
۵۷	پایه‌های حالت‌های پراکندگی داخل ابرسانا	۳.۳
۶۱	اتصال جوزفسون ( $SNS$ ) گرافینی با ساختار قرص کاربینو	۴.۳
۶۶	۴ نتیجه‌گیری	
۶۷	مراجع	

# فهرست شکل‌ها

- ۱.۱ ساختار دوبعدی که نشان دهنده هیبرید  $sp^2$  است. . . . . ۲
- ۲.۱ ساختار بلوری گرافیت (سه بعدی) و گرافین (دو بعدی) [۱۱]. . . . . ۲
- ۳.۱ ساختار نانولوله کربنی و فولرین (مولکول  $C_{60}$ ) [۱۱]. . . . . ۳
- ۴.۱ در این شکل دو بردار پایه‌ی صفحه‌ی گرافین و دو نوع کربن  $a$  و  $b$  و چهار همسایه اول برای اتم  $a$  نیز نشان داده شده است. . . . . ۴
- ۵.۱ (راست) ساختار شبکه‌ی گرافین با دو زیرشبکه مثلثی. (چپ) ناحیه بریلوئن همراه نقاط پرتقارن. . . . . ۵
- ۶.۱ طیف انرژی گرافین به همراه بزرگنمایی آن در یکی از نقاط دیراک [۲۰]. . . . . ۸
- ۷.۱ اثر هال: (بالا) آرایش وسایل آزمایش اثر هال؛ میدان الکتریکی و مغناطیسی اعمال شده بر هم عمودند؛ (میانی) حرکت الکترون‌ها در یک رسانا یا نیم‌رسانای نوع  $n$ ؛ (پایین) حرکت الکترون‌ها در یک نیم‌رسانای نوع  $p$ . پیکان‌های پر جهت حرکت حامل‌ها را در میدان الکتریکی و پیکان‌های خط چین جهت حرکت آن‌ها را پس از اعمال میدان مغناطیسی نشان می‌دهد. [۲۵]. . . . . ۱۲
- ۸.۱ (بالا) ترازهای لانداؤ برای الکترون‌های شرو دینگر با دو باند سهمی‌گون که در انرژی صفر به هم می‌رسند، (پایین) ترازهای لانداؤ برای فرمیون‌های دیراک. مشاهده می‌شود که در حالت  $m = 0$  گاف انرژی در گرافین وجود ندارد. فشردگی ترازها در انرژی‌های بالا را در گرافین می‌توان مشاهده کرد در حالی که در سیستم‌های معمولی فاصله‌ی ترازهای انرژی یکنواخت باقی می‌ماند [۲۵]. . . . . ۱۵
- ۹.۱ مقاومت و رسانندگی هال به عنوان تابعی از چگالی حامل‌ها در گرافین [۱۵]. . . . . ۱۶
- ۱۰.۱ اثر میدان الکتریکی در گرافین چند لایه‌ای،  $A$  بستگی مقاومت ویژه به ولتاژ گیت در دماهای ۷۰، ۳۰۰ و ۷۰۰ کلوین،  $B$  نمونه‌ای از تغییرات رسانندگی الکتریکی با ولتاژ درگاهی،  $C$  تغییرات ضریب هال با ولتاژ درگاهی،  $D$  وابستگی حامل‌ها به دما [۴]. . . . . ۱۷

۱۱.۱	(بالا) تونل زنی در گرافین، (پایین) نیم رسانای معمولی. دامنه‌ی تابع موج الکترون در گرافین ثابت می‌ماند، در حالیکه در تونل زنی معمولی به صورت نمایی کاهش می‌یابد. اندازه‌ی کره دامنه موج ورودی و خروجی را نشان می‌دهد [۲۵].	۱۹
۱۲.۱	احتمال عبور از سد پتانسیل‌های با دو ارتفاع $V_0 = 0.05, 0.10$ بر حسب زاویه و برای دو پهنای متفاوت پتانسیل [۳۵].	۲۱
۱.۲	(راست) بازتاب اندریف در فصل مشترک اتصال $SN$ ، (چپ) بازتاب عادی از سطح عایق	۲۷
۲.۲	بازتاب اندریف در فصل مشترک اتصال $SN$	۲۷
۳.۲	ساختار $SNS$ ، متشکل از یک قطعه نرمال و دو ابررسانا	۳۰
۴.۲	شمای بازتاب اندریف در سیستم $SN$ برای حالت‌های با انرژی $\Delta < \epsilon$ ، همراه با مسیر شبه کلاسیک ذرات برای بیان حالت‌های مقید	۳۱
۵.۲	حالت‌های مقید اندریف در یک اتصال $SNS$ [۸]	۳۲
۶.۲	رابطه‌ی پاشندگی در ناحیه ابررسانا	۴۲
۷.۲	برانگیختگی‌های الکترون و حفره در ساختار نواری مخروطی گرافین (حالت‌های پر و خالی انرژی‌های $E_F \pm \epsilon$ ) که توسط بازتاب اندریف در مرز ابررسانا به هم تبدیل می‌شوند [۵۲]	۴۴
۸.۲	بازتاب اندریف معمولی (چپ) و بازتاب اندریف آینه‌ای (راست) در فصل مشترک فلز نرمال-ابررسانا. پیکان‌ها نشان‌دهنده‌ی جهت سرعت هستند [۵۲].	۴۵
۹.۲	طیف برانگیختگی‌ها در گرافین برای دو مقدار انرژی فرمی $E_F = \hbar v k_F$ . خطوط تیره (آبی) نشان‌دهنده‌ی الکترون‌ها (حالت‌های پر بالای تراز فرمی از یک وادی) هستند، در حالیکه خطوط قرمز (روشن) مربوط به حفره‌ها (حالت‌های خالی پایین تراز فرمی از وادی دیگر) هستند. خطوط پر و بریده برای تمایز نوار رسانش و نوار ظرفیت هستند. تبدیل الکترون-حفره در بازتاب از ابررسانا با پیکان‌ها مشخص شده است. بازتاب اندریف آینه‌ای (راست) زمانی رخ می‌دهد که الکترونی از نوار رسانش به حفره‌ای از نوار ظرفیت پراکنده شود. در حالیکه در بازتاب اندریف معمولی (چپ) الکترون و حفره هر دو از نوار رسانش هستند [۵۲].	۴۶
۱۰.۲	شمای یک لایه گرافین که با دو الکتروود ابررسانا پوشیده شده است. بسته به اختلاف فاز بین ابررساناها یک ابرجریان بدون اتلاف از ناحیه‌ی نرمال عبور می‌کند.	۴۸
۱۱.۲	جریان بحرانی $I_c$ و حاصل ضرب $I_c R_N$ برای اتصال جوزفسون بالستیک گرافینی به صورت تابعی از انرژی فرمی ناحیه‌ی نرمال یا همان اتصال.	۵۱



۵۲	شمایی از ساختار کاربینوی مورد مطالعه	۱.۳
۶۴	تغییرات جریان بحرانی بر حسب پتانسیل شیمیایی در نقطه‌ی دیراک	۲.۳
	جریان بحرانی بر حسب پتانسیل شیمیایی برای اتصال جوزفسون گرافینی با ساختار قرص کاربینو	۳.۳
۶۵	برای نسبت‌های مختلف $R_1/L$	
	جریان بحرانی بر حسب پتانسیل شیمیایی برای اتصال جوزفسون گرافینی با ساختار قرص کاربینو	۴.۳
۶۵	برای نسبت‌های مختلف $R_1/L$	

## پیشگفتار

یکی از پدیده‌های کوانتومی ماکروسکوپی ابررسانایی، اثر جوزفسون است [۱]. این اثر زمانی اتفاق می‌افتد که دو ابررسانا از طریق یک عایق (فلز) در اتصال ابررسانا-عایق (فلز)- ابررسانا (SNS) در تماس قرار بگیرند. در سال ۱۹۶۲ جوزفسون بیان کرد که اگر دو ابررسانا دارای اختلاف فاز  $\phi$  باشند و عایق بین آن‌ها به اندازه‌ی کافی -  $10^\circ A$  - نازک باشد، توابع موج ابررسانا می‌توانند از عایق عبور کنند. در این حالت، الکترون‌های جفت شده قادر هستند در غیاب ولتاژ و بدون اتلاف از یک ابررسانا به ابررسانای دیگر تونل بزنند و یک ابرجریان موسوم به جریان جوزفسون مستقیم (DC)،  $I = I_c \sin \phi$ ، را در عرض اتصال به وجود آورند. در این رابطه  $I_c$  جریان بحرانی یا بیشینه‌ی جریان جوزفسون است. بعدها مطالعات بیشتر نشان داد که در اتصال‌هایی که ابررسانا پیوند ضعیفی با فلز نرمال، نیمه رسانا و ... تشکیل می‌دهد، اثر جوزفسون باز هم می‌تواند وجود داشته باشد [۲].

بازتاب اندریف فرآیند اساسی در توصیف اثر جوزفسون در ساختارهای با پیوند ضعیف مانند اتصال ابررسانا-فلز نرمال- ابررسانا (SNS) ، است. یک الکترون با تکانه‌ی  $\vec{k}$  به یکی از سطوح مشترک برخورد می‌کند و به صورت یک حفره در راستای معکوس با همان سرعت الکترون برمی‌گردد، بنابراین یک جفت کوپر را در ابررسانا خلق می‌کند. حفره‌ی بازتابیده در فصل مشترک دوم بازتاب اندریف انجام داده و به صورت یک الکترون منعکس می‌شود که نتیجه‌ی این فرآیند نابودی یک جفت کوپر در ابررسانا است. به خاطر این چرخه، یک جفت الکترون همبسته شده از یک ابررسانا به ابررسانای دیگر انتقال می‌یابد، که این امر دلیل شارش ابرجریان جوزفسون در عرض اتصال است. نفوذ جفت‌های کوپر از ابررسانا به داخل فلز نرمال رفتار ابررسانایی را تا طول  $\xi_n$ ، طول همدوسی نرمال، از فصل مشترک در سیستم نرمال القا می‌کند. طبق اثر مجاورت معکوس، نفوذ برانگیختگی‌های الکترونی فلز نرمال داخل ابررسانا با تضعیف خاصیت ابررسانایی تا فاصله  $\xi$ ، طول همدوسی ابررسانایی، از سطح مشترک در داخل ابررسانا همراه خواهد بود [۳]. در واقع بازتاب اندریف پراکندگی میان برانگیختگی‌های الکترون و حفره نزدیک فصل مشترک در داخل فلز نرمال را توضیح می‌دهد. بازتاب اندریف بر این اساس است که اگر انرژی الکترون یا حفره‌ی فرودی از سمت نرمال کوچک‌تر از گاف ابررسانایی باشد، الکترون (حفره) نمی‌تواند داخل ابررسانا نفوذ کند. اما این الکترون در فصل مشترک می‌تواند با یک الکترون دیگر در سمت ابررسانا تشکیل جفت کوپر دهد و نتیجه‌ی این جفت‌شدگی با الکترون دوم، بازتاب یک حفره در ناحیه‌ی نرمال است.

با جداسازی و تولید گرافین در سال ۲۰۰۴ توسط فیزیکدانان دانشگاه منچستر به سرپرستی آندره گایم، تحول عظیمی در فیزیک ماده چگال ایجاد شد [۴]. خصوصیات جالب گرافین سبب توجه بسیاری به آن شد. اصلی‌ترین عامل در جلب توجه فیزیکدانان، ساختار نواری خاص گرافین است. گرافین یک شبه فلز است و رابطه‌ی پاشندگی خطی دارد. به صورت نظری و تجربی نشان داده شده است که برانگیختگی‌ها در گرافین مانند فرمیون‌های دیراک بدون جرم رفتار می‌کنند [۵، ۴]. بنابراین گرافین کاملاً از فلزات و نیم‌رساناهای معمول، متمایز است. شبه نسبیتی بودن برانگیختگی‌ها در گرافین باعث می‌شود که پدیده‌هایی مانند عبور بدون بازتاب از سدهای پتانسیل (پارادوکس کلاین) در آن اتفاق بیفتد [۶]. از این رو محدود کردن الکترون‌ها صرفاً با اعمال پتانسیل ممکن نیست. بنابراین آنچه که برای کاربردهای الکترونیکی مناسب به نظر می‌رسد، نانو ساختارهایی با عرض محدود از گرافین است. در خصوص برانگیختگی‌ها در گرافین علاوه بر اسپین، یک درجه‌ی آزادی داخلی موسوم به وادی<sup>۱</sup> وجود دارد که از ساختار نواری آن ناشی می‌شود. که با دست‌کاری و کنترل آن می‌توان از گرافین به عنوان اتصالات کنترلی در دستگاه‌های محاسبات کوانتومی در آینده استفاده کرد [۷].

همانند دیگر اتصالات ضعیف، در اتصال ابررسانا- گرافین نیز پدیده‌ی بازتاب اندریف باعث جفت‌شدگی الکترون و حفره شده و در نتیجه خاصیت ابررسانایی در گرافین نفوذ می‌کند. بازتاب اندریف در گرافین دارای ویژگی‌های منحصر به فردی است که مهم‌ترین آن امکان بازتاب اندریف آینه‌ای علاوه بر بازتاب معمولی است که در سیستم‌های معمولی رخ می‌دهد. انرژی فرمی گرافین می‌تواند قابل مقایسه با گاف ابررسانایی باشد، در حالی که در فلزات معمولی، انرژی فرمی بسیار بزرگ‌تر از گاف ابررسانایی نوعی است، که به پایستگی تکانه و بازتاب معمولی (رجعی) اندریف منجر می‌شود. در گرافین زمانی که انرژی فرمی از مرتبه گاف ابررسانایی و نزدیک نقطه‌ی دیراک است، ساختار نواری آن در چگونگی بازتاب اندریف نقش مهمی ایفا می‌کند [۸]. برای به دست آوردن حالت‌های مقید اندریف، تمرکز روی برانگیختگی‌های  $\Delta$  با  $\varepsilon \lesssim \Delta$  (انرژی برانگیختگی‌ها در گرافین و  $\Delta$  گاف ابررسانایی) است. با توجه به ساختار نواری گرافین، بسته به انرژی  $\varepsilon$  الکترون فرودی به فصل مشترک گرافین- ابررسانا در مقایسه با انرژی فرمی  $E_f$ ، حفره‌ی بازتابی می‌تواند به نوار رسانش یا نوار ظرفیت متعلق باشد. بنابراین در گرافین علاوه بر بازتاب اندریف درون نواری، امکان بازتاب اندریف بین نواری هم وجود دارد که در سیستم‌های معمول رخ نمی‌دهد. برای انرژی‌های  $|\mu| < |\varepsilon|$  الکترون و حفره متعلق به نوار یکسانی بوده و بازتاب اندریف درون نواری اتفاق می‌افتد. برای انرژی‌های بزرگ‌تر،  $|\mu| > |\varepsilon|$ ، نوار حفره‌ی بازتابی با الکترون فرودی فرق خواهد کرد. در گرافین غیرآلاییده که در آن  $\mu = 0$  است، بازتاب اندریف بین نواری رخ می‌دهد.

---

<sup>۱</sup>valley

نکته‌ی مهم دیگر در مورد بازتاب اندرریف در گرافین این است که، الکترون و حفره باید وادی مخالف هم- $K$  و  $K'$  در دو گوشه‌ی ناحیه‌ی بریلوئن- داشته باشند تا تکانه‌ی کل یک جفت کوپر صفر شود. بنابراین درجه‌ی آزادی وادی تحت بازتاب اندرریف تغییر می‌کند. تفاوت بازتاب اندرریف در اتصالات گرافینی وقتی نمایان می‌شود که گرافین غیرآلاییده و انرژی نزدیک نقطه‌ی دیراک است. در این حالت بازتاب اندرریف به صورت کاملاً آینه‌ای و مانند بازتاب معمولی الکترون در مجاورت یک اتصال غیرابرسانا است. بازتاب اندرریف آینه‌ای دارای این ویژگی است که تکانه را به موازات فصل مشترک انتقال می‌دهد. بنابراین در اتصال گرافینی غیرآلاییده بین دو ابررسانا مدهای انتشاری به موازات فصل مشترک، موسوم به مدهای اندرریف وجود دارد که باری حمل نمی‌کنند و تنها تکانه را در این راستا انتقال می‌دهند. در حالی که بازتاب اندرریف معمولی حالت‌های مقید اندرریف را تشکیل می‌دهد که در همه‌ی جهت‌های فضایی، ایستا هستند. مدهای اندرریف منتشر شونده در کانال گرافینی بین دو ابررسانا با انتقال تکانه و انرژی می‌توانند در ترابرد گرمایی شرکت کنند، که سهم آن‌ها به اختلاف فاز بین دو ابررسانا حساس است [۹].

در فصل اول به معرفی گرافین و بیان ویژگی‌های عمومی آن می‌پردازیم. با توجه به اینکه بیشتر ویژگی‌های منحصر بفرد گرافین ناشی از ساختار نواری آن است، به هامیلتونی تنگابست و طیف نواری آن می‌پردازیم. اشاره‌ای بر دو اثر مهم تونل‌زنی کلاین و اثر هال کوانتومی خواهیم داشت. در فصل دوم اتصال ابررسانا- گرافین و بازتاب اندرریف که اساس ساختار جوزفسون است را معرفی می‌کنیم. با بررسی ساختار تخت نشان می‌دهیم که در نقطه‌ی دیراک که چگالی حامل‌ها به صفر می‌رسد، جریان بحرانی دارای مقداری غیر صفر است.

در فصل سوم یک اتصال جوزفسون گرافینی با ساختار قرص کاربینو را در نظر می‌گیریم و با استفاده از روش بیان شده در فصل ۲ توابع موج را به دست آورده، انرژی حالت‌های مقید اندرریف را محاسبه کرده و به محاسبه‌ی ابرجریان بحرانی در ساختار مورد نظر می‌پردازیم. ابرجریان بحرانی را بر حسب پتانسیل شیمیایی مطالعه می‌کنیم.

در پایان بیان می‌کنیم که جریان بحرانی در نقطه دیراک، که در آن چگالی حامل‌های بار صفر است به یک مقدار غیر صفر میل می‌کند، و کمینه جریان بحرانی در نقطه دیراک برای ساختار قرص کاربینو وابسته به هندسه سیستم بوده و با افزایش نسبت  $R_1/L$  افزایش می‌یابد که  $R_1$  شعاع ابررسانای داخلی و  $L$  پهنای ناحیه‌ی گرافین است.

# فصل ۱

## گرافین و ویژگی‌های آن

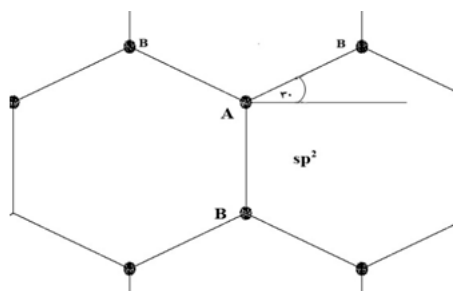
### ۱.۱ اشکال مختلف کربن

کربن چهارمین عنصر از نظر فراوانی در جهان، جالب‌ترین عنصر جدول تناوبی با عدد اتمی ۶، عنصری غیر فلز است. عنصر کربن در طبیعت ساختارهای مختلفی دارد که الماس و گرافیت از ساختارهای معروف آن هستند. آلوتروپ‌های کربن ویژگی‌های فیزیکی متفاوتی با یکدیگر دارند. کربن از یک سو سازنده‌ی سخت‌ترین ماده‌ی شناخته شده در جهان، الماس، و از سوی دیگر عنصر تشکیل دهنده‌ی یکی از نرم‌ترین ساختارها، گرافیت<sup>۱</sup>، است. برای بدست آوردن نوارهای انرژی گرافین ابتدا باید درک روشنی از انرژی‌های پیوندی و ماهیت پیوندها داشت. از این رو باید ابتدا به بررسی اوربیتال‌های کربن و سپس به بررسی انواع هیبریدهایی که کربن در پیوند با اتم‌های کربن دیگر به وجود می‌آورد پرداخت. تجزیه شدن اوربیتال  $2p$  در مولکولها و جامدات کربنی منشأ پیدایش هیبریدهای گوناگون این عنصر می‌شود. چون فاصله تراز بالاتر  $2p$  از تراز پایین تر  $2s$  چندان زیاد نیست بنابراین توابع موج این دو اوربیتال می‌توانند با هم به صورت خطی ترکیب شوند [۱۰]. از نحوه‌ی ترکیب شدن اوربیتال  $2s$  با سه مؤلفه‌ی اوربیتال  $2p$  هیبریدهای گوناگونی به وجود می‌آیند. به طور مثال اگر یک مؤلفه‌ی اوربیتال  $2p$  با اوربیتال  $2s$  ترکیب شود تابع جدید را هیبرید  $sp$  می‌گویند. استیلن با فرمول شیمیایی  $C_2H_2$  دارای هیبرید  $sp$  است. به همین ترتیب اگر دو مؤلفه از اوربیتال  $2p$  با اوربیتال  $2s$  ترکیب شود هیبرید  $sp^2$  و اگر سه مؤلفه‌ی اوربیتال  $2p$  با اوربیتال  $2s$  ترکیب شود هیبرید  $sp^3$  خواهیم داشت.

در الماس هر اتم کربن با ۴ اتم دیگر پیوند برقرار می‌کند. هیبریداسیون اتم‌های کربن در این نوع ساختارها به

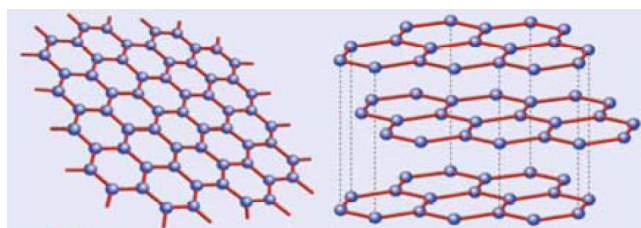
---

<sup>۱</sup>Graphite



شکل ۱.۱: ساختار دوبعدی که نشان دهنده هیبرید  $sp^2$  است.

صورت  $sp^3$  است لذا این ماده به عنوان سخت‌ترین ماده‌ی جهان شناخته می‌شود چون هر اتم کربن با چهار پیوند کووالانسی که قوی‌ترین پیوندهای موجود در طبیعت هستند، به اتم‌های همسایه متصل می‌شود. گرافیت از صفحات تختی که در آن‌ها، اتم‌های کربن در یک شبکه‌ی لانه زنبوری قرار گرفته‌اند، تشکیل شده است. اتم‌های کربنی که در لایه‌های مجاور هم گرافیت قرار دارند با هم پیوند واندروالس برقرار می‌کنند. هرکدام از لایه‌های موجود در گرافیت را گرافین می‌نامند که هیبریداسیون اتم‌های کربن در گرافیت به شکل  $sp^2$  است. ساختمان دو بعدی گرافیت منجر به ناهمسانی شدید در خواص فیزیکی می‌شود. مثلاً رسانایی درون صفحه‌ای گرافیت خوب است ولی در جهت عمودی گرافیت نسبتاً عایق است. ساختارهای جدید کربن شامل فولرین‌ها



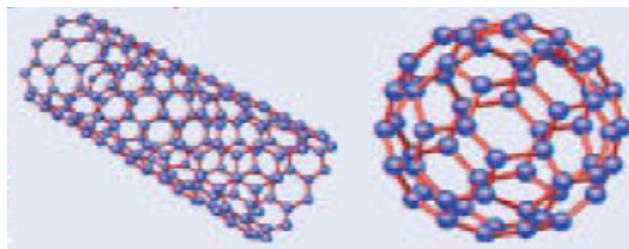
شکل ۲.۱: ساختار بلوری گرافیت (سه بعدی) و گرافین (دو بعدی) [۱۱]

و نانو لوله‌های کربنی و نانوفوم‌ها می‌باشند. معروفترین فولرین<sup>۱</sup>،  $C_{60}$  است که از ۶۰ اتم کربن با نوع پیوند  $sp^2$  تشکیل شده است. سطح فولرین یک شکل بسته کروی است که دارای ۲۰ حلقه‌ی شش ضلعی و ۱۲ حلقه پنج ضلعی می‌باشد که به طور منظم روی سطح پراکنده شده‌اند [۱۲]. نانو لوله‌های کربنی گونه‌هایی از کربن با ابعاد نانو هستند که نسبت طول به قطر بیش از یک میلیون برابر دارند. ایجیما میکروسکوپ<sup>۳</sup> TEM با توان تفکیک بالا را برای بررسی دوده تولید شده به روش تبخیر گرافیت در اتمسفری از هلیوم بکار برد و متوجه شد که قسمت مرکزی این لایه شامل لوله‌های کربنی می‌باشد که از استوانه‌های گرافینی هم مرکز عموماً

<sup>۱</sup> Fullerene

<sup>۲</sup> nanotubes

<sup>۳</sup> Transmission Electron Microscopy



شکل ۳.۱: ساختار نانولوله کربنی و فولرین (مولکول  $C_{60}$ ) [۱۱]

با قطر ۱۰ نانومتر تشکیل شده‌اند و در انتهای آن‌ها کلاهک‌هایی مثل فولرین قرار دارد [۱۳]. ایجیما در ابتدا این ساختار را نوعی فولرین تصور کرد که در یک جهت کشیده شده است اما بعدها متوجه شد که این ساختار خواص متفاوتی با فولرین دارد و به دلیل ساختار سوزن مانند، اندازه نانومتری و شکل لوله‌ای آن را نانولوله‌ی کربنی نامید. پس از کشف نانولوله‌های کربنی توسط ایجیما و همکارانش بررسی‌های بسیار زیادی بر روی این ساختارها از جنبه‌های مختلف انجام شده است. این ساختارها به دلیل خواص منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی که از خود نشان داده‌اند جایگزین مناسبی برای سیلیکون و ترکیبات آن در قطعات الکترونیکی خواهند شد. نانولوله‌ها از پیچیده شدن صفحات گرافین ایجاد می‌شوند و بسته به جهت پیچش، می‌توانند خواص الکتریکی فلز و یا نیمه فلز داشته باشند.

تمامی ساختارهای کربن به نحوی از لایه‌ی دو بعدی کربن به وجود آمده‌اند، که نقطه شروع محاسبات در این ساختارها است، به همین دلیل با وجود عدم مشاهده آن به صورت تجربی، بیشترین مطالعات نظری را به خود اختصاص داده بود. این ساختار دو بعدی، گرافین نام دارد. برای سال‌ها تلاش‌های تجربی برای سنتز گرافین با روش‌های رشد ناکام بود. فیزیکدانان بر این باور بودند که بلور دو بعدی وجود ندارد و گرافین از نظر تئوری پایدار نیست و نمی‌تواند به صورت تخت وجود داشته باشد. در واقع مشکل اساسی آزمایش‌ها این بود که در شروع رشد نسبت محیط به سطح مراکز هسته زایی گرافینی بزرگ بوده و این امر به تشکیل دیگر ساختارهای کربن که از لحاظ ترمودینامیکی پایدارترند، منجر می‌شد [۱۴].

## ۲.۱ جداسازی گرافین

در سال ۲۰۰۴ یک گروه از فیزیکدانان در دانشگاه منچستر به سرپرستی آندره گایم<sup>۱</sup> تک لایه گرافین را با تکنیکی به نام جداسازی میکرومکانیکی<sup>۲</sup> و با شروع از گرافیت سه بعدی، جدا کردند و به لایه‌ی اتمی تخت رسیدند. کیفیت بسیار بالا و ابعاد بزرگ نمونه‌های تولید شده، آزمایش‌های بسیاری را پایه گذاری کرده

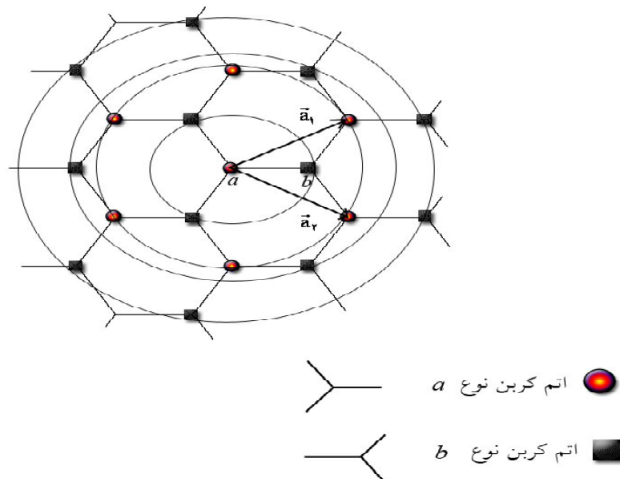
<sup>۱</sup> Andre Geim

<sup>۲</sup> micromechanical cleavage

است، بویژه ترابرد بالستیک<sup>۱</sup> [۴] و اثر کوانتومی هال<sup>۲</sup> [۵، ۱۵] در گرافین مشاهده شده است. بنابراین گرافین کاندید مناسبی برای کاربرد در نانوالکترونیک در آینده خواهد بود. دو عامل، قضیه وگنر-مرمین<sup>۳</sup> که بر طبق آن هیچ نظم بلند برد دو بعدی در دماهای غیر صفر یافت نمی‌شود، و نبود امکانات اندازه‌گیری مقیاس اتمی در مقیاس روبشی بزرگتر از چند ده میلیمتر که بتواند پستی بلندی‌های سطح را با دقت نانو اندازه‌گیری کند، در عدم شناسایی ساختارهای دو بعدی پیش از کار گایم و همکارانش موثر بود. اگر چه تولید گرافین به ظاهر در تناقض با قضیه مرمین-ویگنر بود، اما در واقع تناقضی وجود نداشت، مطالعات تجربی با استفاده از میکروسکوپ‌های TEM نشان دادند که گرافین تولید شده شبکه برآوه کامل نیست و علاوه بر نابجایی‌های اتم کربن، سطح آن کاملاً هموار نیست.

### ۳.۱ ساختار هندسی و نواری گرافین

جهت بررسی ساختار نواری و طیف الکترونی صفحه‌ی گرافین از روش هامیلتونی تنگا بست و نظریه‌ی بلاخ<sup>۴</sup> استفاده می‌شود. چون در این محاسبات به تقارن‌ها و همسایه‌های نزدیک هر اتم احتیاج هست، قبل از پرداختن به محاسبه‌ی ساختار نواری گرافین بهتر است با ساختار هندسی گرافین آشنا شویم (شکل (۴.۱)).



شکل ۴.۱: در این شکل دو بردار پایه‌ی صفحه‌ی گرافین و دو نوع کربن  $a$  و  $b$  و چهار همسایه اول برای اتم  $a$  نیز نشان داده شده است.

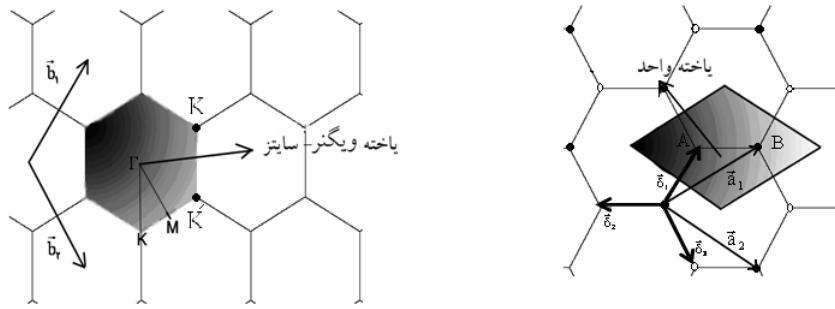
<sup>۱</sup>ballistic transport

<sup>۲</sup>quantum Hall effect

<sup>۳</sup>Mermin- Wagner

<sup>۴</sup>Bloch





شکل ۵.۱: (راست) ساختار شبکه‌ی گرافین با دو زیرشبکه مثلثی. (چپ) ناحیه بریلوئن همراه نقاط پرتقارن. بردارهای پایه‌ی شبکه‌ی مستقیم و شبکه‌ی وارون  $a_i$  و  $b_i$ ،  $i = (1, 2)$  هستند.

گرافین از اتم‌های کربن که در ساختار لانه زنبوری قرار گرفته‌اند تشکیل شده است و بنابراین ساختار بلوری گرافین یک شبکه براوه نیست، در یک شبکه‌ی براوه دو بعدی می‌توان از هر اتم در شبکه به وسیله‌ی بردار انتقالی که بر اساس دو بردار پایه شبکه تعریف می‌شود به هر اتم دیگری در شبکه دست یافت [۱۶]. ولی در مورد گرافین هرچند تمام اتم‌ها کربن هستند اما یک سری از اتم‌ها دارای بازوهای پیوندی متفاوت با سری دیگر هستند؛ ولی می‌توان آن را به صورت یک شبکه‌ی مثلثی با پایه‌ای متشکل از دو اتم داخل سلول واحد 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  $a_1$  و  $a_2$  ساخته می‌شوند، بدین معنی که هر بردار شبکه ترکیبی خطی از این دو بردار با ضرایب صحیح است (۵.۱). هر اتم کربن، در ساختار شبکه‌ی لانه زنبوری، در صفحه‌ی گرافین با سه اتم مجاور خود پیوندهای قوی  $\sigma$  برقرار می‌کند، که نتیجه‌ی هیبریداسیون  $sp^2$  برای اوربیتال‌های  $2s$ ،  $2p_x$ ،  $2p_y$  سه الکترون ظرفیتی است. چهارمین الکترون ظرفیتی در هر اتم در اوربیتال  $2p_z$ ، اوربیتال  $\pi$ ، که بر این صفحه گرافین عمود است، قرار دارد. هم‌پوشانی اوربیتال‌های  $2p_z$  موجب تشکیل پیوندهای اضافی  $\pi$  میان اتم‌های مجاور می‌شود. هم‌پوشانی اوربیتال‌ها در پیوند  $\pi$  عموماً کم است و در نتیجه این پیوند ضعیف است. به همین دلیل در حالیکه الکترون‌های دیگر اتم، شدیداً تحت تأثیر هسته‌های مجاور قرار دارند و کاملاً جایگزیده‌اند، الکترون اوربیتال  $2p_z$  به سبب جهش<sup>۱</sup> میان اتم‌ها به حالت‌های گسترده و یک نوار انرژی منجر می‌شود، ضمن اینکه خواص تراپردی گرافین نیز توسط همین الکترون‌های  $\pi$  غیرجایگزیده مشخص می‌شود و با توجه به اینکه دو الکترون در هر سلول واحد داریم، باید دو باند  $\pi$  که  $\pi^*$  هستند، وجود داشته باشند که یکی مربوط به باند ظرفیت و دیگری مربوط به باند رسانش است.

گرافین دارای یک ساختار دو بعدی است که در آن اتم‌های کربن در گوشه‌های شش ضلعی‌های منتظمی قرار گرفته‌اند. فاصله پیوندی کربن - کربن برابر  $a = 0.142 \text{ nm}$  است و زاویه پیوندی برابر  $120^\circ$  می‌باشد. با تعریف بردارهای پایه می‌توان از هر اتم  $a$  به اتم دیگر  $a$  به وسیله‌ی بردار انتقال  $R_i$  رفت. به عبارت دیگر

<sup>۱</sup>Hopping

اتم‌های نوع  $a$  و یا اتم‌های نوع  $b$  با هم دیگر در یک صفحه‌ی گرافین تولید شبکه‌ی براوه‌ای با ثابت شبکه  $0.246\text{nm}$  می‌کنند [۱۷]. بنابراین بردارهای شبکه مربوط را به صورت زیر خواهیم داشت:

$$a_1 = \frac{a}{\sqrt{3}}(\sqrt{3}, 1) \quad , \quad a_2 = \frac{a}{\sqrt{3}}(\sqrt{3}, -1) \quad (1.1)$$

شبکه وارون نیز به صورت مثلثی است و ناحیه اول بریلوئن<sup>۱</sup> که در واقع سلول واحد ویگنر-سایتز<sup>۲</sup> شبکه‌ی وارون است، شش ضلعی می‌باشد. بردارهای شبکه وارون<sup>۳</sup> متناظر نیز به شکل زیر داده می‌شوند:

$$b_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(1, \sqrt{3}) \quad , \quad b_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(1, -\sqrt{3}) \quad (2.1)$$

در میان نقاط پر تقارن در فضای تکرانه که در شکل (۵.۱) مشاهده می‌شود، دو نقطه  $K$  و  $K'$  دارای اهمیت بالایی هستند. این دو نقطه به نقاط دیراک موسوم هستند و در فضای تکرانه به صورت زیر توصیف می‌شوند:

$$K = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(1, \frac{1}{\sqrt{3}}) \quad , \quad K' = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}) \quad (3.1)$$

در شکل (۵.۱) بردارهای  $a_1$  و  $a_2$  بردارهای شبکه و  $\delta_i$  بردارهای همسایه‌های نزدیک هستند.

### ۱.۳.۱ رابطه پاشندگی خطی

برای گرافین، رابطه‌ی پاشندگی الکترون‌های  $\pi$ ، از هامیلتونی تنگابست<sup>۴</sup> [۱۸] و با در نظر گرفتن جهش الکترونی میان همسایه‌های اول و دوم به دست می‌آید:

$$H_{t.b.} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} + h.c.) - t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle, \sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} + b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma}) \quad (4.1)$$

که در آن  $a_{i,\sigma}^\dagger (a_{i,\sigma})$  یک الکترون با اسپین  $\sigma (\sigma = \uparrow, \downarrow)$  را در مکان  $R_i$  از زیرشبکه  $A$  ایجاد می‌کند (نابود می‌کند) و  $b_{i,\sigma}^\dagger (b_{i,\sigma})$  یک الکترون با اسپین  $\sigma (\sigma = \uparrow, \downarrow)$  را در مکان  $R_i$  از زیرشبکه  $B$  ایجاد می‌کند (نابود می‌کند).  $t \sim 2.7\text{eV}$  انرژی جهش بین همسایه‌های نزدیک  $\langle i, j \rangle$  و  $t' \sim 0.2\text{eV}$  انرژی جهش بین همسایه‌های نزدیک بعدی  $\langle\langle i, j \rangle\rangle$  است و  $h.c.$  همیوگ هرمیتی را نشان می‌دهد.

<sup>۱</sup>first Brillouin zone

<sup>۲</sup>Wigner-Seitz unit cell

<sup>۳</sup>Reciprocal lattice

<sup>۴</sup>Tight Binding

برای به دست آوردن طیف انرژی و ویژه مقادیر هامیلتونی [۱۹]، باید  $H_{t.b.}$  را در فضای تکانه قطری کنیم و بنابراین ابتدا تبدیل فوریه عملگرهای خلق و فنا را برای دو زیر شبکه  $A$  و  $B$  در فضای تکانه به صورت زیر در نظر می گیریم:

$$\begin{aligned} a_{i,\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N_A}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} a_{k,\sigma}^\dagger \\ b_{i,\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N_B}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} b_{k,\sigma}^\dagger \end{aligned} \quad , N_A = N_B = N \quad (5.1)$$

در عبارت های بالا،  $N$  تعداد سلول های واحد یا به بیانی نصف تعداد سایت های کربن است. با بازنویسی هامیلتونی (۴.۱) بر حسب عملگرهای فضای تکانه به روابط زیر می رسیم:

$$H = -t \sum_{k,\sigma} [f(k) a_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma} + h.c.] - t' \sum_{k,\sigma} f'(k) [a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} + b_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma}] \quad (6.1)$$

$$f(k) = \sum_{i=1,3} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_i} = e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_2} (1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2}) \quad (7.1)$$

$$f'(k) = \sum_{i=1,6} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta'_i} = e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{\pm i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1)} = |f(k)|^2 - 3 \quad (8.1)$$

در روابط بالا  $\delta_i$  و  $\delta'_i$  محل همسایه های اول و دوم هر نقطه شبکه را نسبت به آن معین می کنند.

$$\delta_1 = \frac{a}{\sqrt{3}}(1, \sqrt{3}) \quad , \quad \delta_2 = \frac{a}{\sqrt{3}}(1, -\sqrt{3}) \quad , \quad \delta_3 = a(1, 0) \quad (9.1)$$

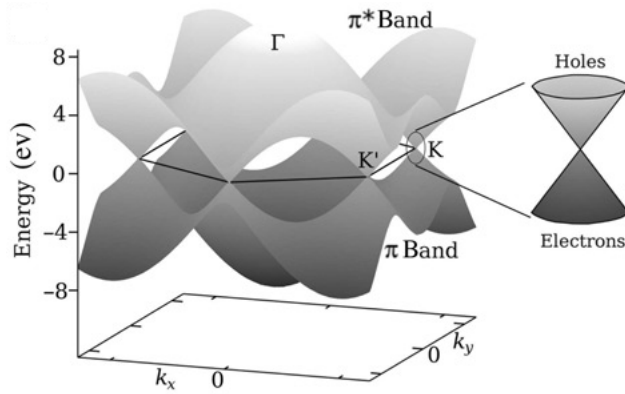
$$\delta'_1 = \pm \mathbf{a}_1 \quad , \quad \delta'_2 = \pm \mathbf{a}_2 \quad , \quad \delta'_3 = \pm(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \quad (10.1)$$

هامیلتونی (۶.۱) را میتوان بر حسب عملگرهای دو مولفه ای خلق و فنا  $(a_{k,\sigma}, b_{k,\sigma})^T$  و  $(a_{k,\sigma}^\dagger, b_{k,\sigma}^\dagger)$  به شکل زیر نوشت:

$$H = - \sum_{k,\sigma} (a_{k,\sigma}^\dagger, b_{k,\sigma}^\dagger) \begin{pmatrix} t' f'(k) & t f(k) \\ t f^*(k) & t' f'(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k,\sigma} \\ b_{k,\sigma} \end{pmatrix} \quad (11.1)$$

برای راحتی هامیلتونی تنگابست را در فضای تکانه در حالی که  $t' = 0$  است، در نظر می گیریم، چون با در نظر گرفتن  $t' \neq 0$  تقارن نوارهای رسانش و ظرفیت و به عبارتی تقارن تقارن الکترون و حفره از بین می رود و نقطه دیراک جابجا می شود. بنابراین همواره  $t' = 0$  را در نظر می گیریم که تقارن میان الکترون و حفره حفظ می شود و هامیلتونی به صورت زیر نوشته می شود:

$$H = - \sum_{k,\sigma} (a_{k,\sigma}^\dagger, b_{k,\sigma}^\dagger) \begin{pmatrix} 0 & t f(k) \\ t f^*(k) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k,\sigma} \\ b_{k,\sigma} \end{pmatrix} \quad (12.1)$$



شکل ۶.۱: طیف انرژی گرافین به همراه بزرگنمایی آن در یکی از نقاط دیراک [۲۰]

در صورتی که آن را قطری کنیم طیف انرژی به صورت زیر داده می‌شود:

$$E_{\pm} = \pm t|f(k)|, \quad f(k) = \sum_{i=1,2,3}^N e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_i} \quad (13.1)$$

که علامت‌های مثبت و منفی به ترتیب به نوارهای رسانش و ظرفیت مربوط است. ساختار نواری گرافین در شکل (۶.۱) نشان داده می‌شود. همان‌گونه که در شکل مشخص است و رابطه انرژی هم نشان می‌دهد دو نوار ظرفیت و رسانش در رئوس ناحیه اول بریلوئن (نقاط  $K$  و  $K'$ ) به هم متصل می‌شوند. در گرافین بدون آرایش در دمای صفر الکترون‌ها نوار ظرفیت را کاملاً پر کرده و نوار رسانش خالی است. از این رو برانگیختگی‌های پایه‌ی گرافین تکانه‌ای در حوالی محل تماس دو نوار و در واقع نقاط  $K$  و  $K'$  خواهند داشت. این امر اهمیت این دو نقطه را که از آنها با عنوان وادی<sup>۱</sup> یاد می‌شود نشان می‌دهد. طیف انرژی در نقطه  $K$  در ناحیه بریلوئن<sup>۲</sup> (ناحیه بریلوئن شش ضلعی است)، همچنین در ۵ گوشه دیگر شش ضلعی صفر می‌شود و در دو گوشه‌ی نابرابر ( $K, K'$ ) باند رسانش و ظرفیت به هم می‌رسند. با بسط طیف انرژی حول این دو نقطه رابطه پاشندگی الکترون‌ها به این صورت خواهد بود:

$$E_{\pm}(k) \approx \pm \frac{3}{4}ta|\vec{k}| = \pm \hbar v_F |\vec{k}| \quad (14.1)$$

که  $|\vec{k}| \ll |K|$  و تکانه نسبت به نقاط دیراک است و نسبت به نقطه  $K$  در ناحیه اول بریلوئن اندازه‌گیری می‌شود و  $v_F = \frac{3ta}{2\hbar} \simeq 10^6 \text{ m/s}$  سرعت فرمی را نشان می‌دهد. رابطه‌ی (۱۴.۱)، رابطه‌ی پاشندگی برای ذرات نسبیتی با سرعت  $v_F = \frac{3ta}{2\hbar}$  است که این ذرات فرمیون‌های دیراک نامیده می‌شوند. تفاوت اساسی رابطه پاشندگی خطی گرافین در مقایسه با حالت معمول  $\epsilon(q) = q^2/2m$  بدین صورت است که سرعت فرمی آن مستقل از تکانه و انرژی است؛ در حالی که در موارد معمول سرعت الکترون‌ها به صورت  $\vec{v} = \vec{k}/m = \sqrt{2E/m}$  بوده و وابستگی صریح به انرژی دارد [۸]. شکل (۶.۱) ساختار نواری کامل

<sup>۱</sup>vally

<sup>۲</sup>Brillion Zone