بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته فیزیک گرایش ماده چگال

مطالعه اثر مجاورت در اتصال‌های ضعیف گرافینی بین ابررسانا و فرومغناطیس

استاد راهنما:

دکتر غلامرضا راشدی

پژوهشگر:

مرتضی صالحی

شهریور ماه ۱۳۸۹

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

دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه ی کارشناسی ارشد رشته ی فیزیک گرایش ماده چگال آقای

مرتضی صالحی تحت عنوان

مطالعه اثر مجاورت در اتصال‌های ضعیف گرافینی بین ابررسانا و فرومغناطیس

در تاریخ ۸۹/۷/۲۹ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه عالی به تصویب نهایی رسید.

۱- استاد راهنمای پایان نامه دکتر غلامرضا راشدی با مرتبه ی علمی استادیار

امضا

۲- استاد داور داخل گروه دکترابراهیم قنبری عدیوی با مرتبه ی علمی استادیار

امضا

۳- استاد داور خارج از گروه دکترعلی‌اکبر بابایی بروجنی با مرتبه ی علمی دانشیار

امضا

امضای مدیر گروه

دکتر حمیدرضا فلاح

تقدیم به پدر و مادر مهربانم

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول: گرافین

۱-۱ آلوتروپ‌های کربن و گرافین..... ۱

۱-۲ ساخت گرافین..... ۳

۱-۳ بررسی پایداری گرافین..... ۴

۱-۴ ساختار شبکه گرافین..... ۴

۱-۵ یک‌دستی در گرافین..... ۱۲

۱-۶ اثر هال در گرافین..... ۱۳

۱-۷ پارادوکس کلاین..... ۱۷

۱-۸ نتیجه‌گیری..... ۱۸

فصل دوم: معادله‌های بوگلیوبوف-دژن

۲-۱پیشینه کوانتومی ابررسانایی..... ۱۹

۲-۲ معادلات خودسازگار بوگلیوبوف-دژن..... ۲۰

۲-۳ بازتاب آندریو..... ۲۶

۲-۴ نظریه BTK..... ۳۰

۲-۵ نتیجه‌گیری..... ۳۹

فصل سوم: اتصال‌های گرافینی شامل ابررساناها و خواص ترابردی آنها

۳-۱ رسانندگی الکترونی اتصال گرافینی ابررسانا- نرمال ۴۰

۳-۱-۱ ویژه اسپینورهای ناحیه ابررسانا..... ۴۴

۳-۱-۲ ویژه اسپینورهای ناحیه نرمال..... ۴۶

۳-۱-۳ شرایط مرزی در یک اتصال NS..... ۴۹

عنوان **صفحه**

۳-۱-۴ رسانندگی دیفرانسیلی الکترونی در یک اتصال NS ۵۱

۳-۲رسانندگی الکترونی اتصال گرافینی ابررسانا-عایق- نرمال ۵۲

۳-۲-۱ ویژه اسپینورهای ناحیه عایق ۵۳

۳-۲-۲ شرایط مرزی در NIS و تقریب سد باریک ۵۳

۳-۲-۳ رسانندگی دیفرانسیلی الکترونی در یک اتصال NIS ۵۶

۳-۳جریان جوزفسون در یک اتصال گرافینی ابررسانا-نرمال-ابررسانا ۵۷

۳-۳-۱ شرط کوانتش برای ساختار SNS ۵۸

۳-۳-۲ وابستگی فاز-جریان برای ساختار SNS ۵۹

۳-۴ خواص ترابردی یک اتصال گرافینی ابررسانا-فرومغناطیس ۶۲

۳-۴-۱ ویژه اسپینورهای ناحیه فرومغناطیس ۶۳

۳-۴-۲بازتاب آندریو و بازتاب نرمال در فصل مشترک FS ۶۴

۳-۴-۳ رسانندگی دیفرانسیلی الکترونی اتصال FS ۶۵

۳-۴-۴ رسانندگی دیفرانسیلی اسپینی اتصال FS ۶۷

۳-۴-۵ رسانندگی گرمایی یک اتصال FS ۶۹

۳-۵ خواص ترابردی یک اتصال گرافینی فرومغناطیس-ابررسانا-فرومغناطیس ۷۱

۳-۵-۱ احتمال بازتاب آندریو و بازتاب نرمال در یک اتصال FSF ۷۲

۳-۵-۲ رسانندگی دیفرانسیلی الکترونی اتصال FSF ۷۳

۳-۵-۳ رسانندگی دیفرانسیلی اسپینی اتصال FSF ۷۴

۳-۵-۴ رسانندگی بهنجار گرمایی یک اتصال FSF ۷۵

۳-۶ جریان جوزفسون در یک اتصال گرافینی ابررسانا-فرومغناطیس-ابررسانا ۷۸

۳-۷ عایق توپولوژیک ۸۲

۳-۸ نتیجه‌گیری ۸۴

منابع و مآخذ ۸۵

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل (۱-۱) ساختار بلوری آلوتروپ‌های کربن..... ۲

شکل (۱-۲) اربیتال هیبریدی sp^2 اتم کربن..... ۵

شکل (۱-۳) ساختار بلوری و شبکه گرافین..... ۶

شکل (۱-۴) ساختار نواری (رابطه پاشیدگی) گرافین..... ۱۰

شکل (۱-۵) عکس SEM از یک وسیله‌ی گرافینی..... ۱۳

شکل (۱-۶) ترازهای لاندائو..... ۱۴

شکل (۱-۷) جرم سیکلوترونی الکترون و حفره..... ۱۵

شکل (۱-۸) رسانندگی هال و مقاومت طولی در گرافین..... ۱۶

شکل (۱-۹) تونل زنی کلاین در گرافین..... ۱۸

شکل (۲-۱) بازتاب آندریو دورانی در اتصال NS..... ۲۹

شکل (۲-۲) ساختار یک بعدی BTK..... ۳۱

شکل (۲-۳) نمودار انرژی-اندازه حرکت یک اتصال NS ۳۳

شکل (۲-۴) احتمال بازتاب‌ها و ترابردها در یک اتصال NS برای قدرت $Z = ۰$ ۳۵

شکل (۲-۵) احتمال بازتاب‌ها و ترابردها در یک اتصال NS برای قدرت $Z = ۰.۳$ ۳۶

شکل (۲-۶) احتمال بازتاب‌ها و ترابردها در یک اتصال NS برای قدرت $Z = ۱$ ۳۶

شکل (۲-۷) احتمال بازتاب‌ها و ترابردها در یک اتصال NS برای قدرت $Z = ۳$ ۳۷

شکل (۲-۸) رسانندگی دیفرانسیلی اتصال NS..... ۳۹

شکل (۳-۱) تصویر AFM از یک لایه گرافین و دو الکترود ابررسانا..... ۴۱

شکل (۳-۲) بازتاب آندریو و نرمال در فصل مشترک گرافینی NS..... ۴۲

شکل (۳-۳) طیف برانگیختگی گرافین در حالت ابررسانایی..... ۴۵

شکل (۳-۴) طیف برانگیختگی گرافین در ناحیه نرمال..... ۴۷

شکل (۳-۵) احتمال بازتاب آندریو در فصل مشترک NS..... ۵۰

شکل (۳-۶) احتمال بازتاب نرمال در یک اتصال NS..... ۵۰

شکل (۳-۷) رسانندگی دیفرانسیلی یک اتصال NS..... ۵۱

شکل (۳-۸) نمایش ساختاری یک اتصال گرافینی نرمال- عایق – ابررسانا..... ۵۲

شکل (۳-۹) احتمال بازتاب آندریو در یک اتصال NIS..... ۵۵

عنوان **صفحه**

شکل (۳-۱۰) احتمال بازتاب نرمال از یک فصل مشترک NIS ۵۶

شکل (۳-۱۱) رسانندگی دیفرانسیلی یک اتصال NIS ۵۷

شکل (۳-۱۲) ساختار یک اتصال ضعیف گرافینی ابررسانا- نرمال- ابررسانا ۵۸

شکل (۳-۱۳) نمودار جریان – فاز یک اتصال تمیز SNS ۶۱

شکل (۳-۱۴) نمودار حاصلضرب جریان بحرانی در مقاومت نرمال یک اتصال SNS در حد اتصال کوتاه ۶۲

شکل (۳-۱۵) احتمال بازتاب آندریو و احتمال بازتاب نرمال یک اتصال FS ۶۴

شکل (۳-۱۶) رسانندگی دیفرانسیلی الکترونی یک ساختار FS بر حسب انرژی برانگیختگی ۶۶

شکل (۳-۱۷) رسانندگی دیفرانسیلی الکترونی یک ساختار FS بر حسب پتانسیل تبادلی فرومغناطیسی ۶۶

شکل (۳-۱۸) رسانندگی دیفرانسیلی اسپینی یک ساختار FS بر حسب انرژی برانگیختگی ۶۸

شکل (۳-۱۹) رسانندگی دیفرانسیلی اسپینی یک ساختار FS بر حسب پتانسیل تبادلی فرومغناطیسی ۶۸

شکل (۳-۲۰) رسانندگی بهنجار گرمایی بر حسب تابع دما یک ساختار FS ۷۰

شکل (۳-۲۱) رسانندگی بهنجار گرمایی بر حسب تابعی از پتانسیل تبادلی یک ساختار FS ۷۱

شکل (۳-۲۲) نمایی از یک ساختار FSF به پهنای W ۷۱

شکل (۳-۲۳) احتمال بازتاب آندریو و احتمال بازتاب نرمال در یک اتصال FSF ۷۲

شکل (۳-۲۴) رسانندگی دیفرانسیلی الکترونی یک ساختار FSF ۷۴

شکل (۳-۲۵) رسانندگی دیفرانسیلی اسپینی بعنوان تابعی از انرژی برانگیختگی شبه ذرات ۷۵

شکل (۳-۲۶) رسانندگی بهنجار گرمایی یک اتصال FSF به‌عنوان تابعی از دما ۷۶

شکل (۳-۲۷) رسانندگی بهنجار گرمایی به عنوان تابعی از طول ناحیه ابررسانا ۷۶

شکل (۳-۲۸) رسانندگی بهنجار گرمایی یک اتصال FSF بر حسب تابعی از پتانسیل تبادلی ۷۷

شکل (۳-۲۹) ساختار گرافینی ابررسانا- فرومغناطیس- ابررسانا ۷۸

شکل (۳-۳۰) انرژی حالت‌های مقید آندریو برای جهت‌گیری اسپین-بالا ۸۰

شکل (۳-۳۱) انرژی حالت مقید آندریو برای حالت اسپین-پایین ۸۰

شکل (۳-۳۲) نمودار جریان- فاز یک ساختار SFS ۸۱

شکل (۳-۳۳) ساختار F|N|F عایق توپولوژیک ۸۳

شکل (۳-۳۴) رسانندگی اتصال ساختارF|N|F عایق توپولوژیک برای مغناطش موازی و پادموازی ۸۴

شکل (۳-۳۵) مقاومت مغناطیسی یک ساختار F|N|F عایق توپولوژیک ۸۴

چکیده:

گرافین، یک ساختار دو بعدی و تک لایه از اتم‌های کربن است که به صورت آرایه‌های شش گوشی در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند. در طی سال‌های گذشته، تلاش‌های بسیار برای ساخت گرافین با شکست مواجه شدند تا اینکه در سال ۲۰۰۴ در دانشگاه منچستر گایم و گروه همکارانش توانستند این ماده را در مقیاس قابل قبول آزمایشگاهی و به صورت پایدار تولید کنند. با تولید گرافین، توجه جمع کثیری از محققان نظری و تجربی به سوی این ماده جلب شد. گرافین به دلیل طیف برانگیختگی‌های دیراک گونه آن، در واقع آزمایشگاهی برای بررسی پیش‌بینی‌های کوانتوم نسبیتی و الکترودینامیک کوانتومی است.

با تایید القای ابررسانایی در گرافین، این ماده به ابزاری کاربردی برای مطالعه ابررسانایی و الکترودینامیک نسبیتی به طور هم‌زمان نیز تبدیل شد.

از سوی دیگر، فرومغناطیسی تمایل دارد تا اسپین الکترون‌ها را هم‌جهت با میدان تبادلی فرومغناطیسی سازد و در مقابل ابررسانایی تمایل دارد تا اسپین الکترون‌ها را در راستای مخالف یکدیگر قرار دهد تا شرایط برای تشکیل زوج‌های کوپر فراهم گردد. هنگام حضور فرومغناطیسی و ابررسانایی در کنار یکدیگر به دلیل ماهیت متفاوت این دو پدیده، برهم-کنش آنها حائز اهمیت است. مطالعه برهم‌کنش های متقابل فرومغناطیسی و ابررسانایی در ساختارها و اتصالات فلزی به سال ۱۹۹۵ باز می‌گردد.

در این پایان‌نامه به مطالعه برهم‌کنش‌های بین فرومغناطیسی و ابررسانایی، که هر دو تحت اثر مجاورت می‌توانند در گرافین القا شوند، در یک ساختار گرافینی می‌پردازیم. ساختارهای مورد بررسی در این پایان نامه از نوع تمیز می‌باشند و برای این منظور، از فرمول بندی دیراک–بوگلیوبوف– دژن استفاده کرده‌ایم و با حل تحلیلی معادله‌ها ، اثر مجاورت را بر رفتار شبه ذره‌های دیراک در گرافین مورد بررسی قرار داده‌ایم.

اثر مجاورت در فرمول‌بندی بوگلیوبوف–دژن و در یک اتصال ابررسانا– نرمال در پدیده‌ی بازتاب آندریو خود را نمایان می‌کند. بازتاب آندریو در اتصال‌های گرافینی ویژگی آینه‌ای دارد که در تضاد با اتصال‌های فلزی است و ما به طور کامل به آن پرداخته‌ایم. جزئیات محاسبه‌ها و بررسی تاثیر فرومغناطیسی بر بازتاب آندریو را ارائه می‌دهیم. مرور رسانندگی دیفرانسیلی الکترونی ساختارهای فرومغناطیس– ابررسانا، فرومغناطیس– عایق– ابررسانا و فرومغناطیس– ابررسانا– فرومغناطیس یکی دیگر از موضوعات بررسی شده در این تحقیق است. تولید جریان اسپین– قطبیده در یک اتصال فرومغناطیس– ابررسانا و فرومغناطیس–ابررسانا– فرومغناطیس را به عنوان پدیده‌ای که بسیار مورد توجه اسپینترونیک است مورد بررسی قرار داده‌ایم. ابرجریان ناشی از اختلاف فاز در ساختارهای ابررسانا– نرمال– ابررسانا و ابررسانا– فرومغناطیس– ابررسانا را به دست آورده‌ایم. در نهایت، ترابرد گرمایی ساختارهای تک اتصالی و دو اتصالی را بررسی کرده‌ایم و نشانه‌های همدوسی در ترابرد کوانتومی را در مورد ساختارهای دو اتصالی نشان داده‌ایم.

کلیـــد واژه‌هـــا: گـــرافین، ابررســـانایی، اتصـــال ضـــعیف، رســـانندگی دیفرانســـیلی الکترونـــی، رســـانندگی دیفرانســـیلی اسپینی، رسانندگی گرمایی، جریان جوزفسون، ترابرد کوانتومی همدوس .

فصل اول

گرافین

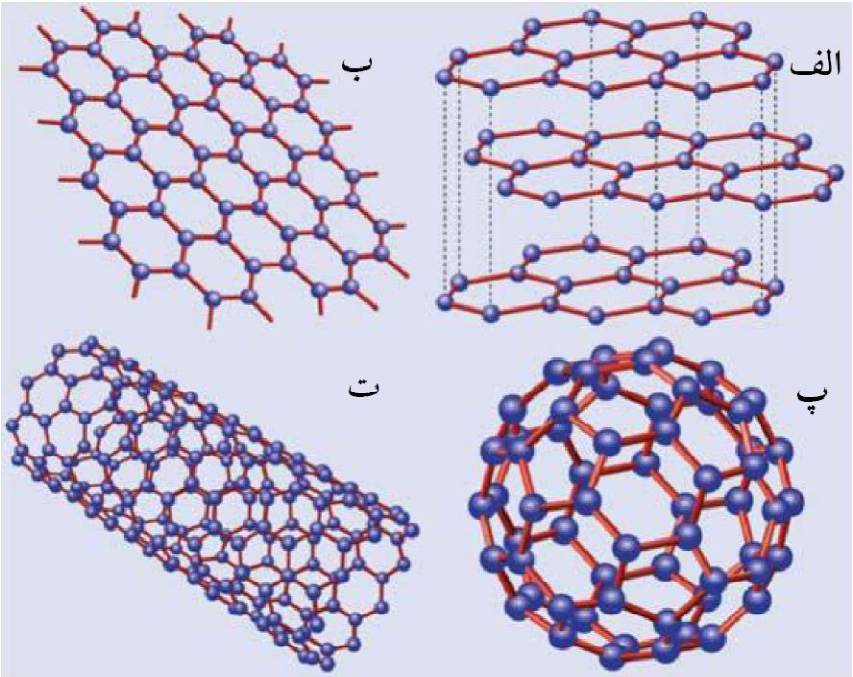
۱-۱ آلوتروپ[۱]های کربن و گرافین

کربن یکی از عناصر در جدول تناوبی است که نقش منحصر به فردی در طبیعت دارد و پایه وجود حیات است. در واقع شکل‌گیری کربن در ستاره‌ها که نتیجه‌ای از هم‌جوشی سه ذره آلفا در یک فرآیند قطعی است، باعث به وجود آمدن عناصر شیمیایی نسبتاً سنگین در جهان می‌شود[۱]. کربن تنها عنصر جدول تناوبی است که دارای ایزومر[۲]هایی از ابعاد صفر (فولرن[۳]) تا سه (گرافیت) است. در شکل(۱-۱) ساختار بلوری آلوتروپ‌های مختلف کربن آمده است.

ساختارهای سه بعدی گرافیت و الماس، از زمان‌های بسیار قدیم شناخته شده‌اند. ساختار صفر بعدی فولرن (۱۹۸۵)[۲-۴] و ساختار یک بعدی نانولوله نیز (تک لایه ۱۹۹۳ و دو لایه ۱۹۹۱) نزدیک به دو دهه پیش کشف شده‌اند[۵]. گرافیت، از صفحه‌های تخت از اتم‌های کربن که در شبکه‌ی لانه زنبوری قرار گرفته‌اند، تشکیل شده است. به طوری که بر هم کنش ضعیف واندروالس بین لایه‌ها وجود دارد. نانولوله‌ها، از پیچیده شدن این صفحه-های تخت ایجاد می‌شوند که بسته به جهت پیچش، می‌توانند خواص الکترونی فلز و یا نیمه‌فلز داشته باشند و فولرن‌ها که با ایجاد یک نقص توپولوژیکی از این لایه‌های دوبعدی به دست می‌آیند.

---

[۱] Allotrope
[۲] Isomer
[۳] Bucky balls



شکل (۱-۱): ساختار بلوری آلوتروپ‌های مختلف کربن: الف، گرافیت (سه بعدی)، ب، گرافین (دوبعدی)، پ، فولرن (صفر بعدی)، ت، نانولوله (یک بعدی)[۶].

الماس نیز با تبدیل پیوند دوبعدی 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 دوبعدی کربن به وجود آمده‌اند که نقطه شروع محاسبات در این ساختارها است. این لایه‌ی دوبعدی، گرافین نام دارد. گرافین، تک لایه‌ای از اتم‌های کربن است که در شبکه‌ی لانه زنبوری قرار گرفته‌اند. تا سالیان دراز این فرم دوبعدی کربن به حالت آزاد غایب بود و تلاش‌های تجربی برای تولید آن با شکست همراه بود[۷]. در واقع بیشتر فیزیکدانان معتقد بودند که یک بلور دوبعدی مثل گرافین از لحاظ تئوری پایدار نیست و نمی‌تواند به صورت یک صفحه تخت وجود داشته باشد و احتمالاً خمیده خواهد شد[۸].

۱-۲ ساخت گرافین

با وجود اینکه تصور می‌شد لایه‌های دوبعدی کربن نمی‌توانند وجود داشته باشند، در سال ۲۰۰٤ یک گروه از فیزیکدان‌ها در دانشگاه منچستر به سرپرستی آندره گایم[۱] به این فرض پایان دادند. آن‌ها توانستند با استفاده از یک روش کاملاً متفاوت و در نگاه اول ساده انگارانه این کار را انجام دهند و تک لایه گرافین را جدا کنند و با این کار تحول عظیمی در این زمینه به وجود آورند. آن‌ها از گرافیت سه بعدی آغاز کردند و یک تک لایه از اتم‌ها را با تکنیکی به نام شکاف میکرومکانیکی[۲] جدا کردند[۹، ۱۰]. در واقع همان طور که قبلاً هم اشاره شد، گرافیت ساختار لایه‌ای دارد و شامل تعدادی از صفحه‌های دوبعدی گرافین است که به صورت ضعیفی (وان-دروالس) به هم جفت شده‌اند. ضعیف بودن پیوند بین لایه‌ها نسبت به پیوند اتم‌های کربن در هر لایه موجب می-شود که جداسازی لایه‌ها به راحتی صورت گیرد (در هنگام نوشتن با مداد به طور مداوم این کار صورت می گیرد) و آن خصوصیتی است که توسط تیم دانشگاه منچستر مورد استفاده قرار گرفت. همین طور با استفاده از روش بالا و با شروع از بلورهای سه بعدی بزرگ، از تمامی مسائلی که در مورد پایداری بلورهای کوچک در ابتدای رشد وجود داشت، اجتناب می‌شود. این گروه از این روش برای ساخت صفحه‌های دوبعدی از موادی چون بورونیترید و بعضی مواد دیکالکوژنید[۳] و ابر رساناهای دمای بالا نظیر BiSrCaCuO نیز استفاده کردند[۱۱]. گروه گایم 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. همین طور با استفاده از تکنیک نوشتن با مداد، بلورهای 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 نوری استفاده کرد. AFM[٤] ، تنها روشی است که برای مشخص کردن بلور تک لایه‌ای استفاده می‌شود. در حالی که گروه دیگری در دانشگاه جرجیا[۵] یک روش دیگری به نام روش رشد هم بافته[٦] را به کار بردند که برای استفاده صنعتی (تولید انبوه) مناسب است[۱۲]. این یافته‌ها یک پیغام مهم دارند و آن این‌که بلورهای دوبعدی وجود دارند و در دمای

---

[۱] Andre Geim
[۲] Micromechanical cleavage
[۳] Dichalcogenide
[٤] Atomic Force Microscopy
[۵] Georgia Institute of Technology
[٦] Epitaxial growth process

اتاق و در هوای محیط پایدار هستند. این روش اجازه تولید آسان و با کیفیت بالا را می‌دهد و بلورهای بزرگ گرافین به اندازه‌های ۱۰ میکرومتر هم ساخته شده‌اند[۹، ۱۳]. کیفیت نمونه‌های تولید شده به اندازه‌ای خوب است که ترابرد بالستیک [۱۰] و اثر کوانتومی هال[۹، ۱۳] به راحتی در گرافین قابل مشاهده است و این ویژگی‌ها باعث شده تا گرافین کاندیدای ایده‌آلی برای کاربردهای آینده در نانوالکتریک باشد.

۱-۳ بررسی پایداری گرافین

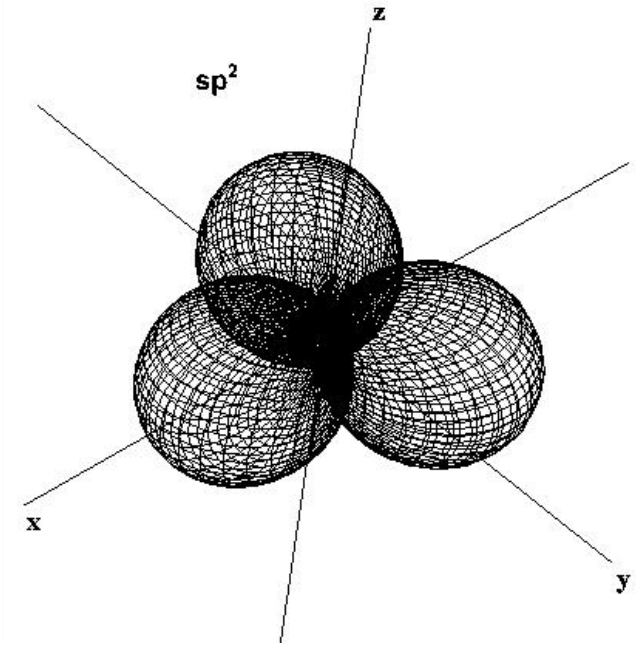
بیش از ۷۰ سال پیش لاندائو و پیرلس[۱] اعلام کردند که بلورهای دو بعدی از لحاظ ترمودینامیکی غیرپایدار هستند و نمی‌توانند وجود داشته باشند[۸] که بعدها این نظریه توسط واگنر و مرمین [۲] تایید شد. بنابر قضیه واگنر ومرمین هیچ نظم بلند برد دوبعدی وجود ندارد[۱٤]. بنابراین هیچ ساختار دو بعدی منظم و پایداری با ابعاد بزرگ را نمی‌توان تولید کرد. زیرا ساختارهای منظم یعنی تولید بلور با تقارن و نظم انتقالی و چون هیچ نظم بلند برد دو بعدی وجود ندارد، لذا نمی‌توان ساختار دوبعدی پایدار ساخت. سوالی که اکنون باید پاسخ گفته شود این است که با توجه به توضیحات بالا گرافین چگونه ساخته شده است. پاسخ این پرسش را می‌توان با بررسی بیشتر ساختار گرافین یافت. گرافین ساخته شده در واقع یک شبکه براوه کامل نیست، چرا که همواره در ساختار آن دررفتگی و جابه جایی اتم‌های کربن وجود دارد. به علاوه سطح گرافین یک سطح کاملاً دو بعدی و هموار نیست و همیشه در سطح آن افت و خیزهای البته تصادفی و با اندازه‌های گوناگون وجود دارد. این دو مسأله روی هم سبب می-شود تا گرافین یک شبکه دو بعدی کامل با تقارن انتقالی صد در صد نباشد و در یک کلام یک شبکه براوه تشکیل ندهد. همین نکته راه فرار از قضیه مرمین واگنر است. بنابراین لایه‌های تک بلوری می‌توانند وجود داشته باشند اما چروکیده خواهند بود این چین و چروکها در گرافین وقتی که آزادانه معلق است مشاهده شده است و احتمالاً تأثیر مهمی در ترابرد الکترونی نیز دارد[۱۵].

۱-۴ ساختار شبکه گرافین

اتم کربن توانایی استثنایی در تشکیل انواع پیوندها را دارد. اتم کربن با ۶ الکترون ساختار الکترونی پایه‌ی $1s^2 2s^2 2p^2$ دارد اما در زمان ترکیب با دیگر اتم‌ها به حالت برانگیخته $1s^2 2s^1 2p^3$ در می‌آید که می‌تواند به دو صورت متفاوت هیبریدی شود که به ترتیب در هر یک با ۲یا ۴ اتم می‌تواند پیوند داشته باشد. مثلاً درمورد

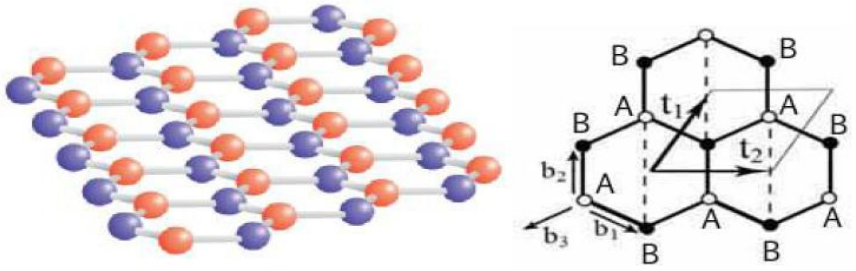
[۱] Peierles
[۲] Wagner-Mermin theorm

گرافین اربیتال‌های ۲s، $2p_x$ و $2p_y$ هر اتم با هم اربیتال هیبریدی sp^2 با زاویه ۱۲۰ درجه نسبت به هم می‌سازند. اربیتال sp^2 یک اتم با اربیتال sp^2 اتم مجاور که در راستای آن است پیوند σ تشکیل می‌دهند که به ساختار لانه زنبوری گرافین منجر می‌شود. اما در مورد اربیتال $2p_z$ هر اتم یک اربیتال $2p_z$ دارد که پر باقی مانده است و جهت‌گیری آن عمود بر صفحه گرافین است. این اربیتال‌های $2p_z$ موجب تشکیل پیوندهای اضافی π میان اتم-های مجاور می‌شوند. همپوشانی اربیتال‌های π کم است و در نتیجه پیوند ضعیف می‌شود.



شکل (۱-۲): اربیتال هیبریدی sp^2 اتم کربن

با توجه به مطالب بالا در حالی‌که الکترون‌های پیوند σ به مقدار زیادی تحت تأثیر هسته‌های مجاور هستند و جایگزیده‌اند، الکترون اربیتال p_z به دلیل جهش میان اتم‌ها به حالت‌های گسترده و یک نوار انرژی منجر می-شود.



شکل(۱-۳): ساختار بلوری و شبکه گرافین[۱۶].

اکنون یک شبکه لانه زنبوری که به ازای هر نقطه یک الکترون دارد، در نظر می‌گیریم. شبکه لانه زنبوری یک شبکه براوه نیست ولی از دو زیر شبکه مثلثی که براوه‌اند تشکیل شده است. لذا هر اتم کربن سه همسایه نزدیک دارد که با فاصله‌های مساوی a (تقریبا $1/42\ \mathrm{A}^{\circ}$). از آن قرار گرفته‌اند. این سه اتم کناری در حالت متقارن نسبت به یکدیگر قرار دارند و می‌توان با یک دوران ۶۰ درجه آن‌ها را با یکدیگر جابه‌جا کرد. بدون این- که به ساختار شبکه آسیبی وارد شود. با توجه به شکل (۱-۳) اگر یک اتم متعلق به زیرشبکه A باشد، سه اتم کربن دیگر که نزدیکترین همسایه آن محسوب می‌شوند متعلق به زیرشبکه B می‌باشند. بردارهای سلول واحد[۱]:

$$\begin{cases} \vec{t}_1 = (\sqrt{3}a, 0) = \sqrt{3}a(1, 0) \\ \vec{t}_2 = (\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{3}{2}a) \end{cases} \qquad (1-1)$$

بردارهای شبکه حقیقی[۲]

$$\begin{cases} \mathbf{b}_1 = a(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{-1}{2}) \\ \mathbf{b}_2 = a(0, 1) \\ \mathbf{b}_3 = a(\frac{-\sqrt{3}}{2}, \frac{-1}{2}) \end{cases} \qquad (2-1)$$

مساحت سلول واحد

$$S = \hat{k}.(\vec{t}_1 \times \vec{t}_2) = 3\frac{\sqrt{3}}{2}a^2 \qquad (3-1)$$

[۱] Unit Cell
[۲] Real lattice

اکنون بردارهای پایه در فضای وارون[۱] را پیدا می‌کنیم

$$\mathbf{g}_1 = \frac{\vec{t}_2 \times \mathbf{k}}{\hat{k}.(\vec{t}_1 \times \vec{t}_2)} = \frac{4\pi}{3a}(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})$$
$$\mathbf{g}_2 = \frac{\vec{t}_2 \times \mathbf{k}}{\hat{k}.(\vec{t}_1 \times \vec{t}_2)} = \frac{4\pi}{3a}(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{-1}{2}) \quad (۴-۱)$$

سلول واحد در فضای وارون نیز دارای دو پایه می‌باشد که یکی متعلق به زیر شبکه A و دیگری متعلق به زیر شبکه B است.

با توجه به توضیح‌های بالا تقریب تنگ‌بست[۲] را برای توصیف ویژگی‌های گرافین به کار می‌بریم. اگر تابع بلاخ الکترونی را با استفاده از توابع جایگزیده اتمی در جایگاه‌های اتمی بسازیم یک بسط به صورت زیر به دست می‌آوریم:

$$\Psi_k(r) = \sum_{R \in G} e^{i\vec{k}.\vec{R}} \varphi(r-R) \quad (۵-۱)$$

که در عبارت بالا $\varphi(r)$ در واقع تابع موج مربوط به سلول واحد است و بنابراین می‌تواند به صورت ترکیب خطی از اربیتال‌های اتمی دو اتم داخل آن $\Phi = \sum_{i=1,2} b_i \varphi_i$ نوشته شود. همچنین R بردار جابه‌جایی است که ترکیبی از t_i ها می‌تواند باشد. برای ادامه‌ی کار هامیلتونی تک الکترون درون شبکه ناشی از یون‌ها را بر تابع موج بالا اثر می‌دهیم

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sum_{R \in G} \sum_{i=1,2} V_{at}(r - t_i) \quad (۶-۱)$$

$$H\Psi = E\Psi \quad (۷-۱)$$

$$\langle \phi_j | H | \Psi \rangle = E \langle \phi_j | \Psi \rangle \qquad j = 1, 2 \quad (۸-۱)$$

از آنجا که از تقریب تنگ بست کمک گرفته‌ایم، خواهیم داشت

$$\langle \phi_1 | \Psi \rangle = b_1 + b_2 \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle \sum_{i=1}^{3} e^{-ik.a_i}$$
$$\langle \phi_2 | \Psi \rangle = b_2 + b_1 \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle \sum_{i=1}^{3} e^{ik.a_i} \quad (۹-۱)$$

در رابطه بالا فرض می‌کنیم که $\gamma_0 = \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle$ است.

---

[۱] Inverse Space
[۲] Tight Binding Approximation

حال به محاسبه $\langle \phi_i | H | \Psi \rangle$ برمی‌گردیم. ابتدا باید توجه شود که هامیلتونی H شامل یک هامیلتونی دقیق برای اتم اول است که با $H_۱ = \frac{\nabla^۲}{۲m} + V_{at}(r - t_۱)$ نشان داده می‌شود و پتانسیل حاصل از اتم دیگر را با $\Delta H_۱$ نشان می‌دهیم. داریم

$$H = H_۱ + \Delta H_۱ = H_۲ + \Delta H_۲ \qquad (۱۰-۱)$$

و همچنین در نظر می‌گیریم

$$H_j | \phi_j \rangle = \varepsilon_j | \phi_j \rangle \qquad (۱۱-۱)$$

که ε_j انرژی اربیتال $۲p_z$ اتم کربن است و شرط $\varepsilon_۱ = \varepsilon_۲$ که برای سادگی با ε نشان می‌دهیم و می‌توانیم مقدار آن را صفر در نظر بگیریم. در این صورت خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \langle \phi_۱ | H | \psi \rangle &= \langle \phi_۱ | H_۱ + \Delta H_۱ | \psi \rangle = \langle \phi_۱ | \Delta H_۱ | \psi \rangle \\ \langle \phi_۲ | H | \psi \rangle &= \langle \phi_۲ | H_۲ + \Delta H_۲ | \psi \rangle = \langle \phi_۲ | \Delta H_۲ | \psi \rangle \end{aligned} \quad ، \qquad (۱۲-۱)$$

که در بالا مبدأ انرژی $\varepsilon = ۰$ فرض شده است. حال فرض می‌کنیم که

$$\beta = \langle \phi_i | \Delta H | \phi_i \rangle \qquad (۱۳-۱)$$

و

$$\gamma_۱ = \langle \phi_۱ | \Delta H | \phi_۲ \rangle = \langle \phi_۲ | \Delta H | \phi_۱ \rangle \qquad (۱۴-۱)$$

و

$$f(k) = \sum_{i=۱}^{۳} e^{ik.a_i} \qquad (۱۵-۱)$$

که $f(k)$ تابع ساختار شبکه نامیده می‌شود. که با قرار دادن (۱-۱۳) و (۱-۱۴) در (۱-۱۲) به رابطه زیر می‌رسیم

$$\begin{aligned} \langle \phi_۱ | H | \psi \rangle &= b_۱\beta + b_۲\gamma_۱ f^*(k) \\ \langle \phi_۲ | H | \psi \rangle &= b_۲\beta + b_۱\gamma_۱ f(k) \end{aligned} \qquad (۱۶-۱)$$

و درنهایت برای معادله شرودینگر داریم

$$\begin{pmatrix} \beta & f^*(k)(\gamma_۱ - \gamma_۰ E) \\ f(k)(\gamma_۱ - \gamma_۰ E) & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_۱ \\ b_۲ \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} b_۱ \\ b_۲ \end{pmatrix} \quad ، \qquad (۱۷-۱)$$

که بدین ترتیب می‌توانیم رابطه پاشندگی $E = E(k)$ را به دست آوریم.

در عبارت بالا β برابر تغییر انرژی اربیتال اتمی p_z به وسیله اتم‌های دیگر است و با توجه به کوچک بودن مقدار آن قابل چشم‌پوشی می‌باشد. پس معادله بالا با این فرض که مقدار γ. کوچک است به صورت زیر خواهد بود.

$$\begin{pmatrix} ۰ & \gamma_۱ f^*(k) \\ \gamma_۱ f(k) & ۰ \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_۱ \\ b_۲ \end{pmatrix} = E(k)\begin{pmatrix} b_۱ \\ b_۲ \end{pmatrix} \qquad (۱۸-۱)$$

با حل معادله بالا ویژه مقدارهای زیر را بدست می‌آوریم

$$E(k) = \pm\gamma_۱ \,|f(k)| \qquad (۱۹-۱)$$

$$Det[H(k) - E(k)I_{۲\times۲}] = ۰ \qquad (۲۰-۱)$$

$$\begin{aligned} E^۲(k) &= [\gamma_۱ f(k)][\gamma_۱ f^*(k)] \\ &= \gamma_۱^۲[۲Cos(\frac{\sqrt{۳}}{۲}k_x a)e^{ik_y\frac{a}{۲}} + e^{-ik_y a}][۲Cos(\frac{\sqrt{۳}}{۲}k_x a)e^{-ik_y\frac{a}{۲}} + e^{ik_y a}] \\ &= \gamma_۱^۲[۱ + ۲Cos(\frac{\sqrt{۳}}{۲}k_x a)(e^{\frac{۳}{۲}ik_y\frac{a}{۲}} + e^{\frac{-۳}{۲}ik_y\frac{a}{۲}}) + ۴Cos^۲(\frac{\sqrt{۳}}{۲}k_x a)] \\ &= \gamma_۱^۲[۱ + ۲Cos(\frac{\sqrt{۳}}{۲}k_x a)Cos(\frac{۳}{۲}k_y a) + ۴Cos^۲(\frac{\sqrt{۳}}{۲}k_x a)] \end{aligned} \qquad (۲۱-۱)$$

بنابراین رابطه پاشیدگی انرژی در گرافین در محدوده‌ی اعتبار تقریب بستگی قوی به صورت زیر است[۱۶، ۱۷]

$$E(k) = \pm\gamma_۱\sqrt{۱ + ۴Cos(\frac{\sqrt{۳}}{۲}k_x a)Cos(\frac{۳}{۲}k_y a) + ۴Cos^۲(\frac{\sqrt{۳}}{۲}k_x a)} \qquad (۲۲-۱)$$

این نوع رابطه پاشندگی که در آن انرژی متناسب با قدر مطلق تابع ساختار شبکه می‌شود نتیجه‌ای عمومی در تقریب بستگی قوی است.