

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

کلیه ی 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 درجه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک
گرایش حالت جامد

عنوان پایان نامه

اثرات میدان مغناطیسی روی نانونوارهای گرافینی

استاد راهنما:

دکتر حمزه موسوی

نگارش:

مهدی درویشی گیلان

اسفند ماه ۱۳۸۹



دانشکده علوم
گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک
گرایش حالت جامد نظری

عنوان پایان نامه

اثرات میدان مغناطیسی روی نانونوارهای گرافنی

استاد راهنما: دکتر حمزه موسوی

نگارش و تدوین: مهدی درویشی گیلان

در تاریخ _____ توسط هیئت داوران زیر بررسی و با درجه‌ی _____ به تصویب نهایی رسید.

۱- استاد راهنمای پایان نامه: دکتر حمزه موسوی با مرتبه علمی استاد یار امضاء:

۲- استاد داور داخل گروه: دکتر حامد رضائیا با مرتبه علمی استاد یار امضاء:

۳- استاد داور خارج گروه: دکتر مهران باقری با مرتبه علمی استاد یار امضاء:

اسفند ماه ۱۳۸۹

تقدیم به پدر و مادرم

با تقدیر و تشکر فراوان از:

استاد راهنمای ارجمندم، جناب آقای دکتر حمزه موسوی که همواره با گشاده‌رویی و شکیبایی پاسخگوی سوالات بنده بودند، و با تشویق‌های دلگرم‌کننده‌ی خود مرا در به انجام رساندن این کار یاری نمودند. همچنین جناب آقای دکتر مهران باقری و جناب آقای دکتر حامد رضانیا که که زحمت داوری این پایان‌نامه را قبول کردند. و در نهایت از تمامی اساتید گروه فیزیک که طی دو دوره‌ی کارشناسی و کارشناسی ارشد تمامی دانسته‌های خود را مدیون این عزیزان هستم، و تمامی دوستانی که مرا در به انجام رساندن این پایان‌نامه یاری نموده‌اند کمال تشکر و قدردانی را دارم.

مهدی درویشی گیلان

اسفند ۱۳۸۹

چکیده

در این پایان نامه به بررسی خواص الکترونیکی نانونوارهای گرافینی با استفاده از تقریب تنگ‌بست و روش تابع گرین می‌پردازیم. برای این کار ابتدا نانونوارهای گرافینی را بدون هیچ‌گونه ناخالصی و میدان خارجی در نظر گرفته، و برای عرضهای مختلف خواص الکترونیکی و وابستگی آنرا به اندازه‌ی عرض نوار و شکل لبه‌ها تعیین می‌کنیم. در مرحله‌ی بعد خواص الکترونیکی دستگاه را با در نظر گرفتن میدان مغناطیسی یکنواخت خارجی در پیمانه‌ی لاندائو مورد بررسی قرار داده و در مورد وابستگی این خواص به اندازه‌ی عرض نوار، شکل لبه‌ها و شدت میدان مغناطیسی اعمالی بحث خواهیم کرد.

فصل اول شامل مقدمه‌ای بر نانوفناوری و معرفی گرافین و نانونوارهای گرافینی به‌عنوان ترکیبات جدید کربن می‌باشد. در فصل دوم به بررسی مدل‌های بس‌ذره‌ای برای نمونه مدل هابارد و تقریب تنگ‌بست می‌پردازیم. در فصل سوم با استفاده از تکنیک توابع گرین معادله‌ی حرکت در تصویر هایزنبرگ را مورد بحث قرار داده و در انتهای این فصل توابع گرین الکترونیکی بدون برهمکنش بلاخ را بدست می‌آوریم (با استفاده از این توابع گرین می‌توان چگالی حالات الکترونی برای الکترونیکی بدون برهمکنش بلاخ را در دستگاه نانونوارهای گرافینی بدست آورد). در فصل چهارم حالات الکترونی نانونوارهای گرافینی خالص (بدون ناخالصی و میدان خارجی) و وابستگی آنها به اندازه‌ی عرض نوار و شکل لبه‌ی نوار بصورت کامل بررسی شده است. فصل پنجم مقدمه‌ای بر اثرات میدان مغناطیسی بر دستگاه‌های الکترونی می‌باشد. در این فصل توابع موج الکترونی در حضور میدان مغناطیسی با استفاده از پیمانه‌ی لاندائو تعیین می‌شوند. در آخرین فصل این پایان نامه یعنی فصل ششم نانونوارهای گرافینی را در حضور میدان مغناطیسی یکنواخت مورد بررسی قرار داده‌ایم. و در مورد وابستگی خواص الکترونیکی دستگاه نانونوارهای گرافینی و وابستگی آن به اندازه‌ی عرض نوار، شکل لبه‌ها و همچنین شدت میدان مغناطیسی بطور کامل بحث می‌کنیم.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱.....	فصل اول: مقدمه‌ای بر گرافین و نانونوارهای گرافینی
۲.....	۱-۱- مقدمه‌ای بر نانوفناوری.....
۳.....	۱-۲- کربن.....
۶.....	۱-۳- گرافین.....
۹.....	۱-۴- نانونوارهای گرافینی.....
۱۱.....	فصل دوم: مدل‌های بس‌ذره‌ای.....
۱۲.....	۱-۲- مقدمه.....
۱۲.....	۲-۲- جملات هامیلتونی در بلور یک جسم جامد.....
۱۴.....	۲-۳- مدل الکترونی‌های بدون برهمکنش بلاخ.....
۱۸.....	۲-۴- معرفی مدل زلیوم.....
۱۹.....	۲-۵- تقریب تنگ‌بست و مدل هابارد.....
۲۵.....	فصل سوم: توابع گرین.....
۲۶.....	۳-۱- مقدمه‌ای بر مفهوم تابع گرین.....
۲۷.....	۳-۲- تحول زمانی تابع موج برحسب تابع گرین.....
۲۸.....	۳-۳- نظریه‌ی پاسخ خطی و معرفی تابع گرین در تصویر هایزنبرگ.....
۳۳.....	۳-۴- معادله‌ی حرکت تابع گرین.....
۳۶.....	۳-۵- بررسی توابع گرین و چگالی طیفی در صفحه‌ی مختلط انرژی.....
۴۰.....	۳-۶- توابع گرین الکترونی‌های بدون برهمکنش بلاخ و چگالی حالات الکترونی.....
۴۴.....	فصل چهارم: نانونوارهای گرافینی.....
۴۵.....	۴-۱- مقدمه.....
۴۵.....	۴-۲- معرفی ساختار هندسی نانونوارهای گرافینی.....
۴۶.....	۴-۳- معرفی توابع موج بلاخ و هامیلتونی دستگاه نانونوارهای گرافینی.....
۴۷.....	۴-۴- ساختار نواری و چگالی حالات در نانونوارهای گرافینی.....
۵۵.....	۴-۵- نانونوارهای گرافینی آرمچیر در حالت نگاشته شده.....
۶۲.....	فصل پنجم: تابع موج الکترونی در حضور میدان مغناطیسی.....
۶۳.....	۵-۱- مقدمه.....
۶۴.....	۵-۲- الکترونی‌های آزاد در میدان مغناطیسی یکنواخت (در پیمانه‌ی لاندائو).....
۶۵.....	۵-۳- تابع موج الکترونی در حضور میدان مغناطیسی.....
۷۰.....	فصل ششم: اثرات میدان مغناطیسی بر نانونوارهای گرافینی.....
۷۱.....	۶-۱- مقدمه.....
۷۱.....	۶-۲- هامیلتونی تنگ‌بست در میدان مغناطیسی.....

۷۵.....	۳-۶- تعیین ساختار هندسی و سلول پایه در حضور میدان مغناطیسی یکنواخت.....
۷۵.....	۳-۶-۱- شبکه‌ی مربعی.....
۷۸.....	۳-۶-۲- گرافین.....
۸۰.....	۳-۶-۳- نانونوار گرافینی زیگزاگ.....
۸۲.....	۳-۶-۴- نانونوار گرافینی آرمچیر.....
۸۴.....	۶-۴- ساختار الکترونی گرافین در حضور میدان یکنواخت.....
۸۷.....	۶-۵- ساختار الکترونی نانونوارهای گرافینی زیگزاگ در حضور میدان یکنواخت.....
۹۳.....	۶-۶- ساختار الکترونی نانونوارهای گرافینی آرمچیر در حضور میدان یکنواخت.....
۱۰۱.....	منابع.....
۱۰۳.....	چکیده‌ی انگلیسی.....

فصل اول

مقدمه‌ای بر ساختار گرافین و نانونوارهای گرافینی

۱-۱- مقدمه‌ای بر نانوفناوری

در سالهای اخیر، نانوفناوری به یکی از مهم‌ترین و مهیج‌ترین زمینه‌های پیشرو در علم فیزیک، شیمی، مهندسی و زیست‌شناسی تبدیل شده است و نویدبخش آن است که در آینده‌ای نزدیک موفقیت‌های زیادی پیش روی ما قرار خواهد گرفت؛ بطوریکه در گستره‌ی وسیعی از کاربردها جهت‌گیری پیشرفتهای فنی را تغییر خواهد داد. اساس نانو فناوری، درک خواص و رفتار جدیدی است که ذراتی با اندازه‌ی کمتر از ۱۰۰ نانومتر (یک نانومتر یک میلیاردم متر است) به نانو ساختارهایی که از آن ذرات ساخته شده‌اند، منتقل می‌کنند. دلیل به وجود آمدن این خواص آن است که ذراتی با اندازه‌ای کوچکتر از ابعاد مشخصه، با پدیده‌های ویژه‌ای در ارتباط‌اند که اغلب فیزیک یا شیمی جدیدی را بروز می‌دهند و منجر به رفتار جدید وابسته به اندازه می‌شوند. مشاهده شده‌است که وقتی اندازه‌ی ذرات از یک مقدار بحرانی کمتر می‌شود خواصی مانند ساختار الکترونی، رسانایی، واکنش‌پذیری، دمای ذوب و خواص مکانیکی آن ذره‌ها تغییر می‌کنند. این وابستگی رفتار به اندازه‌ی ذرات می‌تواند به محقق اجازه دهد که خواص آن ذرات را راهبری و اداره کند. نتیجه‌ی پژوهش‌ها نشان می‌دهد که این فناوری به میزان گسترده و در محدوده‌ی متنوعی از زمینه‌های فنی، ظرفیت فوق‌العاده‌ای را برای تاثیر در پیشرفت‌های چشمگیر آینده از تولید مواد مستحکم‌تر و سبک‌تر تا کوتاه کردن زمان رساندن داروهای نانو ساختار به سیستم گردش خون بدن، افزایش ظرفیت ذخیره‌ی نوارهای مغناطیسی و یا فراهم کردن سوئیچ‌های سریع‌تر در رایانه‌ها دارا می‌باشد. تحقیقات در نانوفناوری بین رشته‌ای است و گستره‌ی موضوعات مختلفی را از شیمی کاتالیز کردن نانوذرات تا فیزیک لیزر نقطه کوانتومی شامل می‌شود. در نتیجه، محققان در هر موضوع خاص نیازمند دانشی فراتر از تخصص‌شان هستند؛ چرا که باید ملزومات گسترده‌ی نانوفناوری را درک کنند و یاد بگیرند که چگونه می‌توانند در این رشته‌ی مهیج و جدید سهم باشند [۱].

در سال ۲۰۰۴ امکان جداسازی لایه‌های منفرد گرافیت با ضخامت یک اتم که به آن گرافین گفته می‌شود به صورت آزمایشگاهی توسط آندره گیم^۱ و کونستانتین نواسیلوف^۲ فراهم شد. این دو دانشمند موفق به دریافت جایزه‌ی نوبل فیزیک ۲۰۱۰ برای آزمایشهای ارزشمندشان و نقش آنها در معرفی این ماده‌ی دو-بعدی، شدند. این کشف نقطه‌ی عطفی در فناوری نانو از آغاز تا کنون بود که مفهوم اجزای تک اتمی را به واقعیت نزدیکتر کرد.

^۱ Andre Geim

^۲ Konstantin Novoselov

۱-۲- کربن

اساس همه ساختارهای کربنی، عنصر کربن می باشد که یکی از عناصر حیاتی شناخته شده برای بشر است. این عنصر در همه بافتهای زنده وجود دارد. همچنین این عنصر در ساختارهای گوناگونی مانند گرافیت، الماس و کربن ۶۰ که اغلب از آنها به عنوان ساختارهای کربنی^۱ نام برده می شود یافت می شود. لازم به ذکر است که خواص فیزیکی ساختارهای کربنی به چگونگی پیوندهایی که اتمهای کربن در آنها برقرار می کنند، بستگی دارد. برای نمونه الماس بسیار شفاف می باشد، در حالی که گرافیت سیاه و آنقدر مابین لایه های آن پیوندهای سستی برقرار است که به آسانی با کشیدن آن روی یک سطح معمولی (به صورت توده ای) از هم جدا می شوند. همچنین الماس در مقایسه با گرافیت که از رساناهای خوب محسوب می شود، رسانایی الکتریکی بسیار پایینی دارد. در واقع شکلهای و خواص گوناگون این مواد، به سبب انواع پیوندهای مختلفی است که عنصر کربن از خود نشان می دهد. حال پیش از اینکه به بحث درباره انواع گوناگون پیوندهای هیبریدی کربن بپردازیم، خاطر نشان می نمایم که اتم کربن در مجموع دارای شش الکترون می باشد که دو تای آنها پوسته داخلی، یعنی اربیتال 1s را اشغال می نمایند و چهار الکترون باقی مانده تراز ظرفیت، که شامل اربیتالهای 2s و 2p می باشند را پر می کنند. از این رو در حالت برانگیخته، چهار حالت معادل $|2s\rangle$ ، $|2p_x\rangle$ ، $|2p_y\rangle$ و $|2p_z\rangle$ وجود خواهند داشت، به این صورت که برهمنش حالت $|2s\rangle$ با n تا از حالتها $|2p\rangle$ ، هیبرید sp^n نامیده می شود که نقش بسزایی در پیوندهای کووالانسی دارد. بنابراین در ادامه انواع مختلف هیبریداسیون^۲ کربن را توضیح خواهیم داد.

برهمنش اوربیتال یا حالت $|2s\rangle$ با یکی از اوربیتالهای $|2p\rangle$ به پیوند هیبریدی sp می انجامد. برای نمونه برهمنش حالت $|2s\rangle$ و $|2p_x\rangle$ به دو حالت متقارن و پادمقارن که به ترتیب با $|sp_a\rangle$ و $|sp_b\rangle$ مشخص می شوند (شکل ۱-۱) می انجامد:

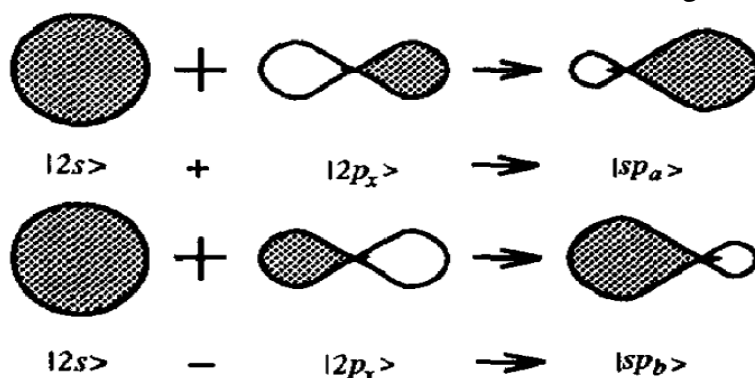
$$|sp_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle + |2p_x\rangle) \quad , \quad |sp_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle - |2p_x\rangle) \quad 1-2-1$$

ترکیب متقارن با نزدیک شدن دو اتم کربن، سطح انرژی را نسبت به زمانی که اتمها جدا هستند پایین می آورد و از این رو حالت پیوندی نامیده می شود در حالی که ترکیب پادمقارن سطح انرژی را نسبت به حالتی که اتمها از هم فاصله زیادی دارند، افزایش می دهد و ترازهای پادپیوندی را به وجود می آورد (شکل ۱-۱ را ببینید). توجه کنید که در این فرایند دو حالت $|2p_y\rangle$ و $|2p_z\rangle$ همچنان بدون تغییر باقی می مانند. آشکار است که ابر الکترونی اربیتالهای هیبریدی دمبلی شکل می باشند و گسترش آن برای حالت $|sp_a\rangle$ ($|sp_b\rangle$) از سمت $+x$ ($-x$) است. در واقع این نوع از هیبریداسیون به تشکیل مولوکولهای نظیر $H-C \equiv C-H$ می انجامد که همپوشانی اوربیتالهای اتمهای مجاور در آن، پیوندهای کووالانسی را نتیجه می دهد. خاطر نشان

¹ Carbon allotropes

² hybridization

می‌شود که از آنجایی که در هیبریداسیون sp تنها اوربیتالهای $|2p\rangle$ مشارکت دارند، دو اوربیتال $|2p_y\rangle$ و $|2p_z\rangle$ دست نخورده باقی می‌مانند که مسئول تشکیل پیوندهای موسوم به پیوند π می‌باشند که بسیار سست-تر از پیوندهای کووالانس σ هستند.



شکل ۱-۱: نمایش شماتیک هیبرید sp ساخته شده از اوربیتالهای $|2s\rangle$ و $|2p\rangle$ اتم کربن [۲].

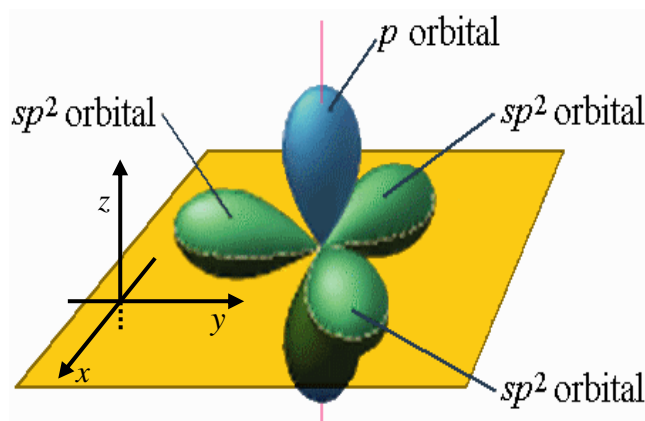
در هیبرید sp^2 پیوندهای کووالانسی که از نوع پیوندهایی می‌باشند که در صفحات گرافیت (و همانطور که خواهیم دید در گرافین نیز) یافت می‌شوند با یکدیگر زاویه 120° درجه می‌سازند (شکل ۱-۲). این نوع پیوند هیبریدی از برهمنش اوربیتال $|2s\rangle$ و دو اوربیتال $|2p\rangle$ که می‌توانند هر کدام از حالت‌های $|2p_x\rangle$ ، $|2p_y\rangle$ و یا $|2p_z\rangle$ باشند، تشکیل یافته‌است. از این رو حالت‌های هیبریدی مختلف sp^2 با روابط زیر داده می‌شوند:

$$|sp_a^2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|2p_y\rangle \quad 2-2-1$$

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

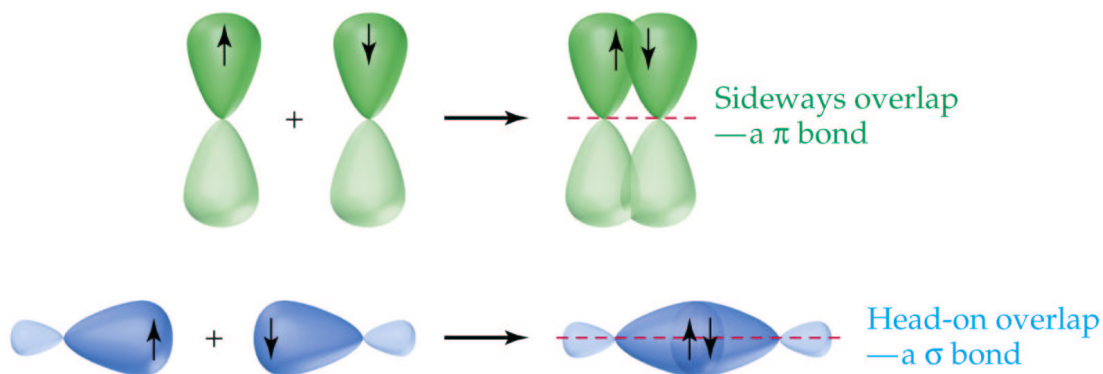
$$|sp_c^2\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left(-|2p_x\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2p_y\rangle\right) \quad 4-2-1$$

همانگونه که از شکل ۱-۲ پیدا است، حالت‌هایی که توسط این نوع اوربیتالها داده می‌شوند در صفحه xy واقع می‌باشند که با یکدیگر زاویه 120° درجه می‌سازند.

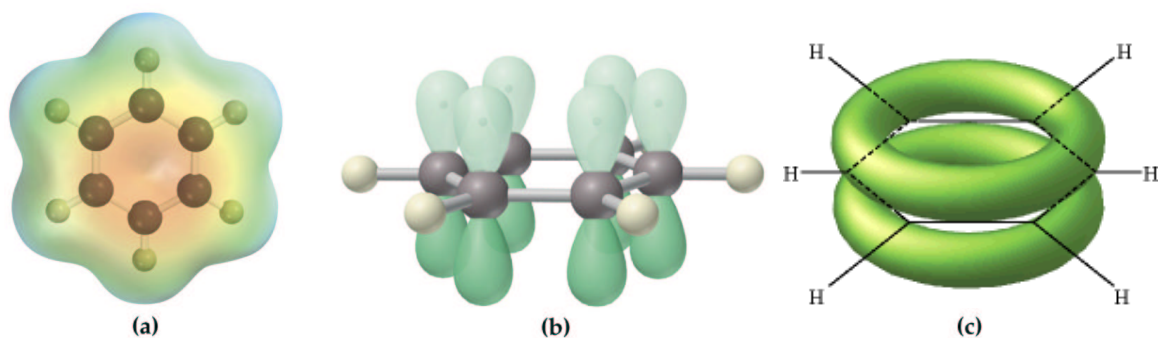


شکل ۱-۲: نمایش شماتیک هیبرید sp^2 ساخته شده از اوربیتالهای $|2s\rangle$ و $|2p_x\rangle$ و $|2p_y\rangle$ اتم کربن.

اوربیتال باقیمانده $|2p_z\rangle$ که عمود بر صفحه xy است به سبب همپوشانی سر به سر اوربیتالهای هیبریدی sp^2 اتمهای مجاور که توسط پیوندهای قوی کووالانسی به هم متصل هستند، با یکدیگر پیوند کناره‌ای ضعیف π را تشکیل می‌دهند (شکل ۱-۳). یک مثال آشنا مولکول بنزن است که اتمهای کربن در آن در گوشه‌های یک شش ضلعی جای گرفته‌اند (شکل ۱-۴).



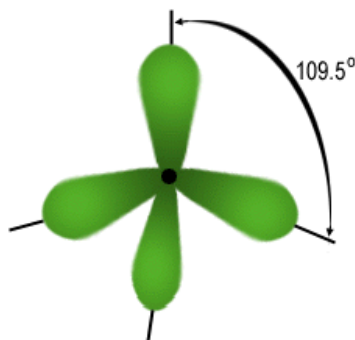
شکل ۱-۳: نمایش شماتیک پیوندهای سر به سر و قوی σ برای اوربیتالهای هیبرید sp^2 و پیوند موازی و کناره‌ای اوربیتالهای غیر هیبریدی $|2p_z\rangle$ برای اتمهای کربن مجاور هم [۳].



شکل ۱-۴: نمایش شماتیک مولکول بنزن و اوربیتالهای غیر هیبریدی $|2p_z\rangle$ در آن [۳].

ماده دیگری که در آن هیبریداسیون sp^2 نقش اساسی را دارد گرافیت می‌باشد که از شمار بسیار زیادی لایه‌های مختلف که در یک شبکه لانه زنبوری آرایش یافته‌اند، تشکیل شده است. این لایه‌ها به سبب وجود پیوندهای سست مابین آنها، به آسانی (البته بصورت توده‌ای) از هم جدا می‌شوند. در واقع رسانندگی الکتریکی و گرمایی مشاهده شده برای گرافیت به سبب وجود همین پیوندهای سست است که ناشی از اوربیتالهای غیر هیبریدی $|2p_z\rangle$ می‌باشد.

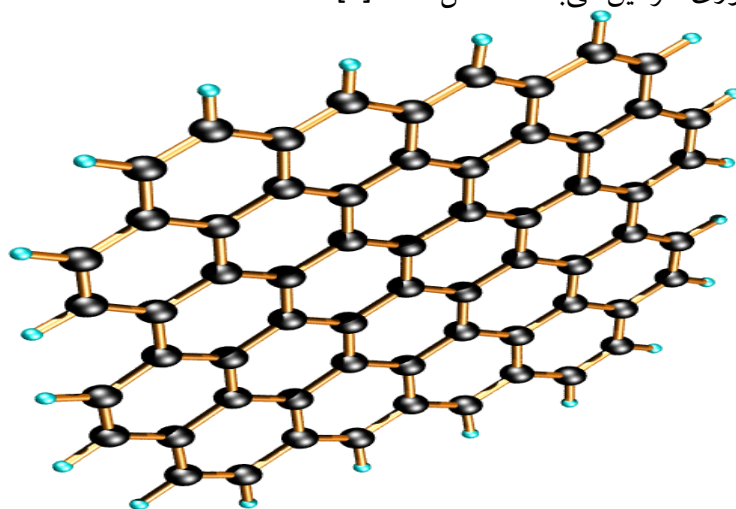
ترکیب اربیتالهای $2s$ با هر سه اربیتال $2p$ به هیبریداسیون sp^3 می‌انجامد که از چهار اربیتال دمبلی شکل در گوشه‌های یک چهاروجهی که با یکدیگر زاویه 109.5° درجه می‌سازند، تشکیل شده است (شکل ۵-۱). مثال‌های آشنا شبکه‌ی الماس و متان است که هر چهار اربیتال آن در پیوندهای کووالانسی با سهیم می‌باشند.



شکل ۵-۱: نمایش شماتیک هیبرید sp^3 ساخته شده از اربیتالهای $2s$ و $2p_x$ و $2p_y$ و $2p_z$ اتم کربن.

۳-۱- گرافین

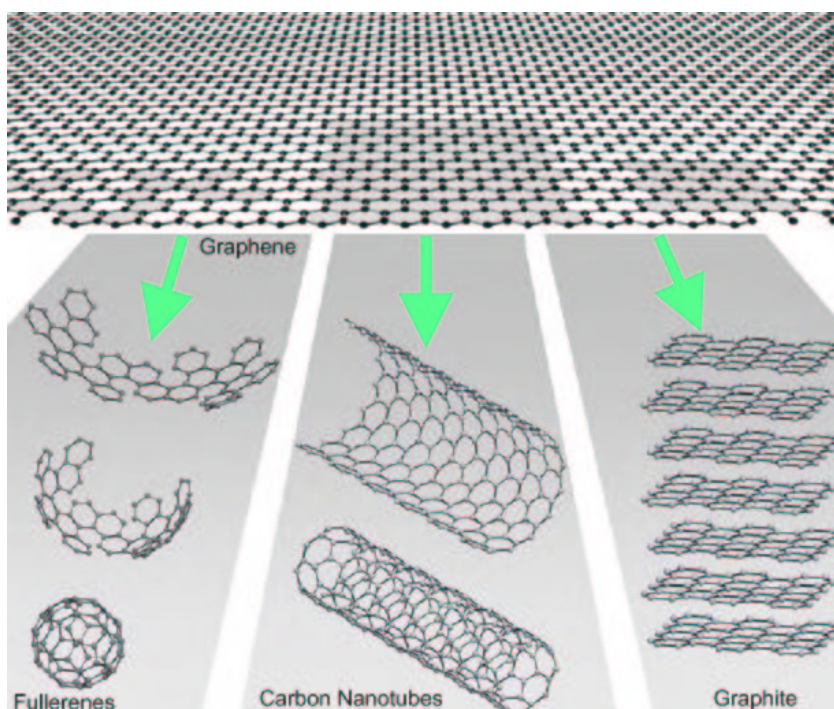
اتم کربن می‌تواند بصورت زنجیره‌های طولانی درآید که به آن زنجیری شدن می‌گویند که این فرایند منجر به تشکیل ترکیبات آلی گوناگونی می‌شود که شامل بیومولکولها نیز می‌گردد. سیلیکون دومین عنصر مشابه کربن در گروه ۴ است که ساختار الکترونی با باندهای نیمه‌پر مشابه دارد. سیلیکون در مقایسه با کربن، به راحتی زنجیری نمی‌شود زیرا اثرات فضایی مانع از همپوشانی الکترونیهای اربیتال p می‌شود. بنابراین اندازه‌ی کوچک و ساختار الکترونی کربن، آنرا به‌عنوان یک عنصر ویژه با قابلیت تولید ساختارهای چند بعدی با خواص جالب توجه تبدیل کرده‌است. یکی از آلوتروپهای دوبعدی (با ضخامت یک اتم) کربن با ساختار شبکه‌ی لانه زنبوری می‌باشد (شکل ۶-۱) [۴].



شکل ۶-۱: نمایش شماتیک صفحه‌ی گرافین.

<http://www.ewels.info/img/science/graphite> © Dr. Chris Ewels, Inst. of Materials

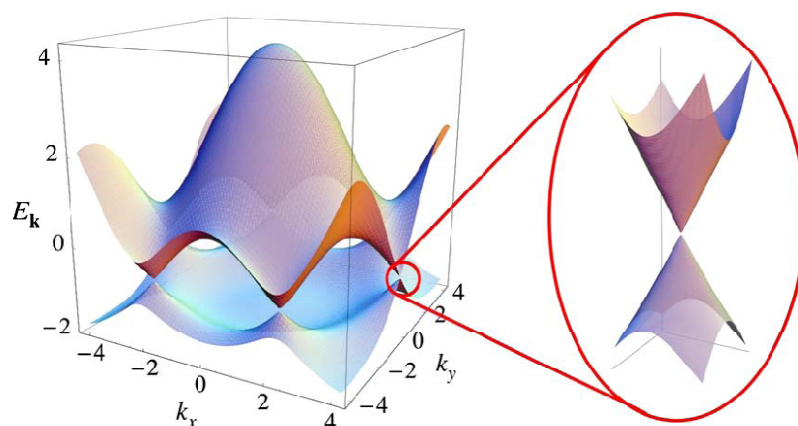
گرافین جزء قوی‌ترین موادی است که تا کنون مشاهده شده است. این ماده به عنوان بلوک ساختمانی پایه‌ای نانولوله‌های کربنی، فولرین‌ها و گرافیت شناخته می‌شود (شکل ۷-۱). بنابراین می‌توان گفت خواص این ساختارها ناشی از صفحات گرافین می‌باشد [۴].



شکل ۷-۱: گرافین و آلوتروپهای کربنی که مبنای ساختار آنها گرافین است صفحه‌ی گرافین است)

نانونوارهای گرافینی نیز برشهایی از صفحه‌ی گرافین می‌باشند [۵].

یک صفحه‌ی محدود از گرافین نشان دهنده‌ی یک شکاف نواری صفر با الکترونهایی که اثرات جرمی صفر دارند در محل تماس نوارهای رسانش و ظرفیت است (شکل ۸-۱). این پدیده گرافین را غیرعادی کرده است که مانند یک فلز یا نیمه‌رسانا رفتار نمی‌کند [۴].



شکل ۸-۱: نمودار ساختار نواری گرافین؛ همانطور که در این شکل مشاهده می‌شود نوارهای رسانش و ظرفیت در شش نقطه از فضای k با هم مماس هستند (هیچگونه همپوشانی ندارند) این نقاط را نقاط دیراک می‌نامند [۶].

گرافین خواص فیزیکی عجیبی از خود نشان می‌دهد که قبلاً در مقیاس نانو مشاهده نشده بود. این امر سبب شده است که در سالهای اخیر بیشترین پژوهشها هم از لحاظ نظری و هم از لحاظ تجربی روی آن صورت پذیرد. نقطه آغاز این توجه، اثر مشاهده شده غیر عادی هال^۱ بود که در سال ۲۰۰۵ توسط دو گروه مختلف گزارش شد [۸ و ۷]. از آن به بعد گرافن مورد توجه بسیار قرار گرفت و به موضوع اول پژوهشها در جهان مبدل شد. از ویژگی‌های گرافین می‌توان گفت: نه تنها کمترین ضخامت را دارد بلکه مستحکم‌ترین نیز هست، از نظر رسانندگی الکتریکی به خوبی مس است و از نظر رسانندگی گرمایی از همه مواد شناخته شده بهتر عمل می‌کند، تقریباً کاملاً شفاف است و با این همه آن قدر چگال است که حتی هلیوم (کوچکترین گاز اتمی) از آن عبور نمی‌کند. با گرافین فیزیکدانها اکنون می‌توانند رده‌ی جدیدی از مواد دو بعدی را با خواصی یکتا مطالعه کنند. گرافین آزمایشهایی را ممکن می‌کند که جلوه‌های جدیدی از پدیده‌های کوانتومی را به نمایش می‌گذارد. همچنین کاربردهائی جدید و گوناگون، اینک ممکن به نظر می‌رسد. از جمله خلق مواد جدید و ساخت دستگاه‌های الکترونیکی ابتکاری. پیش بینی می‌شود که ترانزیستورهای گرافینی از ترانزیستورهای سیلیسیومی امروزی بسیار سریعتر کار کنند و بتوان با آنها کامپیوترهای کارآمدتری ساخت. گرافین عملاً شفاف است و رساننده‌ی خوبی نیز هست و می‌تواند برای تولید صفحات حساس لمسی و شاید حتی سلولهای خورشیدی مناسب باشد. اگر پلاستیک با گرافین مخلوط شود، رساننده‌ی الکتریسته خواهد شد و ضمناً در برابر حرارت و از نظر مکانیکی مقاوم‌تر می‌شود. با این مقاومت مکانیکی بیشتر می‌توان موادی فوق‌العاده محکم ساخت که در عین حال نازک، کشسان و سبک‌تر نیز هستند و در آینده می‌توان با این مواد مرکب جدید، ماهواره، هواپیما و خودرو ساخت.

از جمله خواص فیزیکی که گرافین نشان می‌دهد قبلاً در مقیاس نانو مشاهده نشده بود عبارت اند از: مدول یانگ بالا (حدود ۱۱۰۰ گیگاپاسکال)، مقاومت مکانیکی بالا در برابر شکست (۱۲۵ گیگاپاسکال)، رسانایی حرارتی خوب (حدود ۵۰۰۰ W/mK)، تحرک پذیری بالای حاملان بار یا به عبارت دیگر رسانایی الکتریکی بالا (۲۰۰۰۰۰ Vs/cm)، مساحت سطحی ویژه‌ی بالا (مقدار محاسبه شده ۲۶۳۰ متر مربع بر گرم)، و گرافین از نقطه نظر الکتریکی یک ماده قابل ملاحظه است. به دلیل سختی و ویژه بودن پیوندهای σ در یک صفحه‌ی گرافینی، جایگزین شدن اتمهای شبکه لانه زنبوری به وسیله اتمهای خارجی بسیار مشکل است. این یکی از دلایلی است که باعث می‌شود مسافت آزاد میانگین الکترونی در گرافین زیاد باشد و به حدود $1\mu\text{m}$ در نمونه‌های موجود نیز می‌رسد. در ابتدا گرافین با استفاده از فرآیند لایه برداری مکانیکی از گرافیت تولید شد [۹]. این روش قابلیت تولید نمونه‌های اندک با کیفیت بالا را برای مطالعات بنیادی دارد. در اینجا دو روش برای سنتز صفحات گرافین معرفی می‌شود:

(۱) لایه برداری مکانیکی از گرافیت:

با استفاده از نوار چسب‌های معمولی ابتدا توده‌ای از گرافیت را از هم جدا می‌کنند، با تکرار این فرآیند لایه‌ی

¹ Unconventional quantum Hall effect

بسیار نازکی از گرافیت به دست می‌آید [۹]. با قرار دادن آن روی پایه‌ی سیلیکونی امکان آشکارسازی گرافین به اینصورت فراهم می‌شود که پایه‌ی سیلیکونی تمامی رنگهای موجود در طیف تابشی را منعکس می‌کند و با توجه به اینکه تک لایه‌های گرافیت طیف نوری خاصی را در مقایسه با توده‌های زیاد گرافیتی به نمایش می‌گذارند، می‌توان با استفاده از میکروسکوپ نوری به مشاهده‌ی گرافین پرداخت که البته این مشاهده به دشواری امکان‌پذیر است.

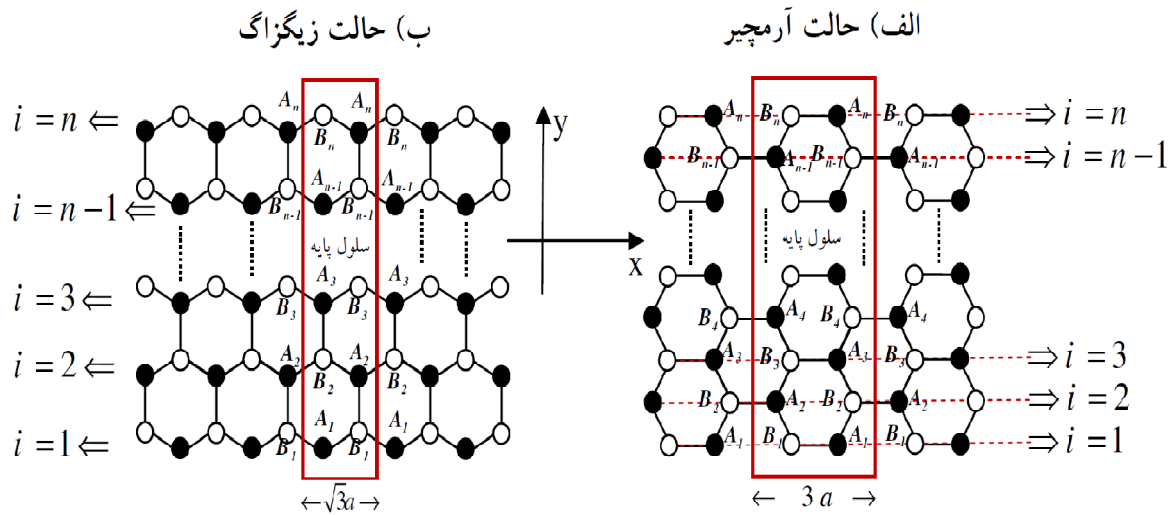
(۲) رشد گرافین روی سطح بلور کاربید سیلیکون [۱۰]:

می‌توان گرافین را روی سطحی از سیلیکن کاربید رشد داد، با گرم کردن SiC تا دمای ۱۳۰۰ درجه سانتیگراد سیلیکن از روی لایه‌ی زیرین جدا می‌شود و لایه‌های اندکی از گرافین روی سطح باقی می‌ماند، تعداد این لایه‌های گرافین را با محدود کردن زمان یا حرارت می‌توان کنترل کرد. کیفیت و تعداد لایه‌های به دست آمده در این نمونه‌ها به Si بستگی دارد که برای رشد گرافین به کار می‌رود. هزینه، عملکرد، اندازه صفحات، کیفیت صفحات، اصلاح شیمیایی و سازگاری با فرآیندهای تجاری تولید تراشه مهمترین نکاتی هستند که در انتخاب روش سنتز گرافین باید به آن توجه شود.

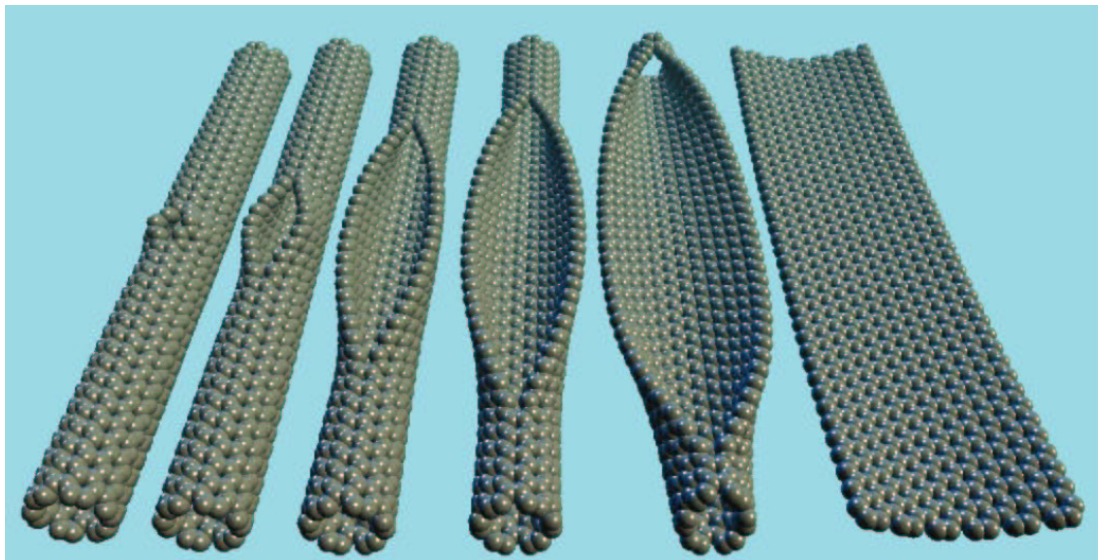
۱-۴- نانونوارهای گرافینی *GNRs*^۱

برش صفحه‌های گرافین به شکل نانوتراشه‌ها را میتوان به عنوان یک فرایند فیزیکی که در حین آن پیوندهای موجود در ساختار گرافین سالم می‌ماند توصیف کرد. بنابراین می‌توان نوارهایی را از صفحه گرافین که پهنای آنها در حدود نانومتر است برش داد، به این ساختارها نانونوارهای گرافینی (یا بطور اختصاری *GNRs*) گفته می‌شود و بسته به شکل لبه‌ی آنها به دو دسته نانونوارهای گرافینی زیگزاگ (*ZGNRs*) و نانونوارهای گرافینی آرمچیر (*AGNRs*) تقسیم می‌شوند. نانونوارهای گرافینی دارای عرضی محدود و طول خیلی بزرگ هستند، و می‌توان آنرا یک ساختار شبه‌یک بعدی در نظر گرفت. ساختار هندسی نانونوارها با سلول بندی قراردادی را در شکل ۱-۹ می‌توان مشاهده کرد. این ساختار به طور گسترده‌ای مورد مطالعه قرار گرفته است [۱۱-۱۷]. ساخت این ماده بصورت آزمایشگاهی و با روشهای مختلف امکان‌پذیر است [۷ و ۸ و ۱۸ و ۱۹ و ۲۰]. روشی جدید نیز برای تولید انبوه نانونوارهای خیلی ریز وجود دارد که در آن نانولوله‌های کربنی در طی یک فرایند شیمیایی و در دمای محیط باز می‌شوند (شکل ۱-۱۰) [۲۱]. در فصل‌های ۴ و ۶ به بررسی ساختار هندسی و الکترونیکی این ماده‌ی جدید خواهیم پرداخت.

¹ Graphene Nano Ribbons



شکل ۱-۹: نمایش ساختار هندسی نانونوارهای گرافینی و سلول پایه‌ی آنها برای حالت‌های (الف) آرمچیر و (ب) زیگزاگ. عرض هر نوار برای (الف) حالت آرمچیر با تعداد خطوط نقطه چین و برای (ب) حالت زیگزاگ با تعداد خطوط زیگزاگ مشخص شده که شاخص هر عرض i می‌باشد. زیر شبکه‌های A و B نیز برای هر دو حالت با نقاط توپر و توخالی معرفی می‌شوند.



شکل ۱-۱۰: نمایش شماتیک مراحل تبدیل شدن نانولوله‌ی کربنی به نانونوار گرافینی (زیگزاگ) طی یک فرآیند شیمیایی [۲۱].