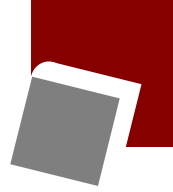


وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه
گوازنک - زنجان



ترابرد کوانتومی در گرافین گافدار

پایان نامه کارشناسی ارشد

مجتبی رحیمی

استاد راهنما: دکتر مالک زارعیان

اردیبهشت ۱۳۸۹

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

تقدیم به پدر و مادر عزیزم

قدردانی و تشکر

اول سپاس خدای عزوجل را، که در این پهنه گیتی ما را نعمت وجود بخشید و هر چه داد بی منت، جز نعمت مرگ. دوم سپاس پدر و مادر که موجب وجود گشتند و عمر گرانبهای خود را با تمام عشق به پای فرزند خود ریختند، که هر چه در حق آنان انجام دهیم ناچیز و هرگز نتوان قدردان فداکاری، گذشت و مهربانی‌های آن دو گوهر نایاب گیتی بود و از خداوند منان خواهان آنم که سایه‌ی پدر و مادر را همواره بر سر ما مستدام دارد، که مایه خیر و برکت برای ما خواهد بود و اما بعد مراتب سپاس و قدردانی خود را نثار معلمان و اساتیدم بالاخص استاد راهنمایم جناب آقای دکتر مالک زارعیان می‌کنم که مرا به عنوان شاگرد خود قبول کردند و من جز خوش خلقی از ایشان هیچ ندیدم و امیدوارم در سایه ایزد منان همیشه سلامت و موفق باشند و اما بعد از دوست گرامی جناب آقای دکتر علی قربانزاده مقدم بابت تمامی بحث‌های علمی که با هم داشتیم و کمک‌های بی دریغ ایشان نهایت تشکر و سپاسگذاری را دارم و آرزوی سلامتی و موفقیت روزافزون را برای ایشان دارم. همچنین برای اعضای گروه نانو آرزوی سلامتی و عمری با برکت دارم و اما در نهایت از هم‌اتاقی‌هایم جناب آقای آرمان جوادی، یاسر رجبی و مجتبی چراغیان تشکر می‌کنم که در این مدت مرا تحمل کردند.

اگر از کسی رسیده است، بدی به ما بماند

به کسی مباد از ما، که بدی رسیده باشد

چکیده

در گرافین بدون گاف به دلیل طیف الکترونی منحصر به فردش، رسانش الکتریکی در نقطه دیراک، یک کمینه از مرتبه $\frac{e^2}{h}$ دارد. این موجب شده است که استفاده از این ماده در قطعات الکترونیکی به سهولت امکان پذیر نباشد. یک راه برای غلبه بر این مشکل ایجاد گاف در طیف انرژی گرافین می باشد که با شکست تقارن وارونی (تقارن زیر شبکه ها) به وجود می آید. همزمان با شکست تقارن وارونی مفهوم فازبری و انحنای بری و اثرات نا بهنجار آن در ترابرد الکترونی، در این ماده مهم می شود.

در این پایان نامه به بررسی رسانش و نوبه شلیکی در اتصال گرافین گاف دار شده می پردازیم و اثرات فازبری را که به صورت شرط مرزی در مسئله وارد می شود، بر این دو کمیت بررسی می کنیم. نشان می دهیم که کمینه رسانش در نقطه دیراک در گرافین گاف دار کاهش می یابد و در رژیم هایی گاف مشاهده شده در رسانش بیش از گاف القا شده توسط زیر لایه می شود، که آن را گاف دینامیکی (تراپردی) می نامیم که قبلاً نیز به نوعی در کارهای تجربی مشاهده شده است. در رژیم مخالف رسانش در نزدیکی گاف انرژی نوسان می کند که معادل نوسانات آهارانوف – بوهم می باشد و با افزایش پتانسیل شیمیایی و دور شدن از گاف انرژی این نوسانات از بین می رود. فاکتور فانو بر حسب ولتاژ گیت از مقدار تقریباً تونل زنی به مقدار بالاستیک میل می کند و مقدار آن برای ولتاژ گیت بالاتر از گاف انرژی مستقل از عرض اتصال است. در حد $\frac{eV}{T} \rightarrow \infty$ فاکتور فانو با افزایش پتانسیل شیمیایی (هنگامی که اثرات فازبری کاهش می یابد) به مقدار 0.1 نزدیک می شود.

فهرست

| | | |
|-------|-------|-----|
| چکیده | | پنج |
| مقدمه | | نه |

۱ آشنایی با گرافین

| | | | |
|-------|--|-------|----|
| ۱.۱ | ناپایداری در دو بعد | | ۱ |
| ۲.۱ | ساختار هندسی و طیف الکترونی | | ۲ |
| ۱.۲.۱ | ساختار هندسی | | ۲ |
| ۲.۲.۱ | طیف الکترونی | | ۳ |
| ۳.۱ | برانگیختگیهای با انرژی کم و معادله دیراک | | ۶ |
| ۴.۱ | شرایط مرزی | | ۹ |
| ۵.۱ | خواص یکتای الکترونی در گرافین | | ۱۲ |
| ۱.۵.۱ | الکترون های کایرال دیراک | | ۱۲ |
| ۲.۵.۱ | اثر کوانتومی غیر عادی هال | | ۱۳ |

| | | | |
|----|-------|-------|---|
| ۱۵ | | ۳.۵.۱ | تونل زنی ذرات کایرال |
| ۱۵ | | | تونل زنی کوانتومی |
| ۱۶ | | | پارادوکس کلاین |
| ۱۷ | | ۶.۱ | رسانش و نوفه شلیکی |
| ۱۷ | | ۱.۶.۱ | اتصال نقطه کوانتومی و رابطه لاندائور-بوتیکر |
| ۲۱ | | ۲.۶.۱ | نوفه تعادلی و شلیکی |
| ۲۶ | | ۳.۶.۱ | فاکتور فانو ($f = \frac{S(\omega)}{2eT}$) |
| ۲۷ | | ۷.۱ | رسانش و نوفه شلیکی در اتصال گرافینی |

۲ لزوم ایجاد گاف در گرافین

| | | | |
|----|-------|-------|---------------------------|
| ۳۱ | | ۱.۲ | شکست تقارن و معادله دیراک |
| ۳۳ | | ۱.۱.۲ | زیر لایه |
| ۳۳ | | ۲.۱.۲ | گرافین دولایه |
| ۳۸ | | ۳.۱.۲ | تنش |
| ۴۲ | | ۲.۲ | نوار گرافینی محدود شده |
| ۴۵ | | ۳.۲ | فاز هندسی بری |
| ۴۵ | | ۱.۳.۲ | مفاهیم اساسی فاز بری |
| ۴۵ | | | تحول بی دررو چرخه ای |
| ۴۸ | | | انحنای بری |

| | | |
|----|-------|--|
| ۴۹ | | ۲.۳.۲ فازبری در نوارهای بلاخ |
| ۵۱ | | ۳.۳.۲ دینامیک الکترون در حضور میدان الکتریکی |
| ۵۲ | | سرعت نابهنجار |
| ۵۳ | | انحنای بری: ملاحظات تقارنی |

۳ رسانش و نوفه شلیکی در گرافین گاف دار شده و اهمیت فازبری

| | | |
|----|-------|---|
| ۵۵ | | ۱.۳ حالت های الکترونی در گرافین گاف دار |
| ۵۷ | | ۲.۳ فازبری و انحنای بری در گرافین گاف دار |
| ۶۰ | | ۳.۳ شرط مرزی بی نهایت در گرافین گاف دار |
| ۶۲ | | ۴.۳ ماتریس پراکندگی و دامنه احتمال عبور |
| ۶۴ | | ۵.۳ رسانندگی و فاکتور فانو در اتصال گرافینی گاف دار شده |
| ۶۵ | | ۱.۵.۳ وابستگی به عرض اتصال |
| ۶۷ | | ۲.۵.۳ وابستگی به ولتاژ گیت |
| ۷۱ | | نتیجه گیری |
| ۷۳ | | مراجع |

مقدمه

کربن یکی از اصلی ترین عناصر حیات است. این عنصر با عدد اتمی ۶ در گروه چهارده جدول تناوبی عناصر قرار دارد و دارای ساختار شیمیایی $1s^2 2s^2 2p^2$ است که به دلیل قابلیت هیبریداسیون متفاوت، این عنصر، انعطاف پذیری بالایی در پیوند های اتمی دارد. به همین دلیل آلوتروپ های گوناگون با خواص کاملاً متفاوت از این عنصر در طبیعت یافت می شود. از جمله ساختار الماسی که عنصری بسیار سخت و شفاف است، ساختار گرافیت که یک ماده ی نسبتاً نرم و کدر است، ساختار توبی C_{60} که به صورت یک مولکول با سلول های پنج ضلعی می باشد که از دید فیزیکی می توان آن را یک شئی صفر بعدی در نظر گرفت. از دیگر آلوتروپ های کربن نانو لوله های کربنی هستند [۱] که از پیچیدن تک یا چند لایه ی گرافین به وجود می آیند و از دید فیزیکی می توان به عنوان یک شئی یک بعدی در نظر گرفت. آلوتروپ دیگر کربن که در دهه ی اخیر با پیشرفت تکنولوژی، بشر موفق به ساخت آن شده است گرافین است [۲]. گرافین تک لایه ی گرافیت و دارای ساختار لانه زنبوری است که در آن هر اتم کربن با هیدراسیون sp^2 با سه اتم مجاور خود پیوند σ تشکیل می دهد. که طول هر پیوند 1.42 \AA است. و اوربیتال P باقی مانده عمود بر صفحه ی گرافین پیوند π تشکیل می دهد. الکترون موجود در این اوربیتال قابلیت جهش بین همسایه ها را دارد و مسئول خواص تراپردی در گرافین است. والاس در سال ۱۹۹۷ اولین کسی بود که مقاله ای در مورد ساختار نواری گرافین نوشت و رفتار شبه فلزی غیر معمول در این باره را نشان داد [۳]. یکی از مهم ترین جنبه های مسئله ی گرافین در برانگیختگی های با انرژی کم، فرمیون های بدون جرم و کایرال دیراک است که ناشی از طیف انرژی منحصر به فرد این ماده (خطی بودن در انرژی های پایین) است. این رابطه ی پاشندگی خاص که فقط در انرژی های پایین صادق است، رفتار های کوانتوم الکترو دینامیکی (QED) فرمیون های بدون جرم دیراک را تقلید می کند. به جز این که سرعت فرمیون های دیراک v در گرافین 3×10^8 برابر کوچک تر از سرعت نور (c) است. بنابراین بسیاری از رفتار های غیر عادی QED در گرافین نشان داده شده است، اما در سرعت های پایین تر از سرعت نور [۴]، [۵] و [۶]. فرمیون های دیراک هنگامی که در میدان مغناطیسی قرار می گیرند در مقایسه با الکترون های معمولی رفتار های غیر عادی از خود نشان می دهند که منجر به پدیده های فیزیکی جدید از جمله اثر نابهنجار کوانتومی هال صحیح (IQHE) می شود [۷] [۸]. علاوه بر تفاوت های کیفی بین اثر نابهنجار کوانتومی هال صحیح که در ساختار های Si و

GcAlAs دیده شده با گرافین، در گرافین این اثر را به دلیل انرژی بالای سیکلوترونی الکترون های نسبیتی در دمای اتاق نیز می توان مشاهده کرد [۹]. در حقیقت اثر نابهنجار کوانتومی هال صحیح یک نشان فرمیون های دیراک محسوب می شود.

یکی دیگر از جنبه های خاص گرافین، غیر حساس بودن فرمیون های دیراک به پتانسیل الکتروستاتیکی خارجی به دلیل پدیده ی پارادوکس کلاین است، یعنی فرمیون های دیراک می توانند با احتمال یک از ناحیه ی ممنوعه کلاسیکی عبور کنند، است [۱۰] و [۱۱]. در حقیقت فرمیون های دیراک در حضور پتانسیل های محدود کننده به صورت غیر عادی رفتار می کنند که منجر به پدیده ی حرکت دو تایی (یا zitter bewegung) توابع موج می شود [۱۰]. در گرافین این پتانسیل های الکتروستاتیکی را می توان به سادگی با بی نظمی ها و ناخالصی ها تولید کرد. چون بی نظمی ها در هر ماده ایی امری غیر قابل انکار هستند بنابراین تاثر این بی نظمی ها بر فیزیک الکترون ها در گرافین مورد علاقه زیادی است. در حقیقت تحت شرایط خاص فرمیون های دیراک از اثرات جایگزیدگی که در مورد الکترون های معمولی مشاهده شده است مصون می مانند [۱۲] و به طور تجربی نشان داده شده است که الکترون ها می توانند بدون پراکندگی فاصله های بزرگ از مرتبه میکرومتر را طی کنند [۲].

در آزمایشات تجربی گوناگون نشان داده شده است [۱۳] [۸] که رسانندگی در گرافین هنگامی که چگالی حامل ها به سمت صفر میل می کند به یک مقدار کمینه از مرتبه کوانتوم رسانش $(\frac{e^2}{h})$ می رسد. این رسانندگی کوانتومی محدود شده یک خاصیت ذاتی فرمیون های دیراک دو بعدی می باشد که در کریستال های ایده آل، بدون هیچ گونه ناخالصی یا نقصی، دیده نمی شود. از طرف دیگر این کمینه در رسانندگی، متناظر با یک ماکزیمم در فاکتور فانو می باشد. مقدار فاکتور فانو در نقطه دیراک در حد $\gg \frac{h}{e^2}$ به مقدار جهانی آن یعنی $\frac{1}{3}$ می رسد که سه برابر کوچکتر از نوفه پواسونی در اتصالات تانلینگ می باشد و برابر فاکتور فانو در یک سیستم پخشی است [۱۴][۱۵]، علی رغم این که دینامیک الکترونی در نوار گرافینی بالاستیک است [۱۶]. وجود این کمینه در رسانندگی به معنی عدم وجود ولتاژ گیتی برای به صفر رساندن رسانش و در نتیجه پدیده ی سوئیچینگ که پایه ی تمام مدارهای منطقی است، می شود. یک روش برای غلبه بر این مشکل وجود گاف در طیف انرژی گرافین است که به روش های مختلف امکان پذیر است. و اخیراً کارهای زیادی در این زمینه انجام شده است [۱۷، ۱۸، ۱۹، ۲۰، ۲۱، ۲۲، ۲۳، ۲۴، ۲۵، ۲۶، ۲۷]. یک راه برای ایجاد گاف شکست تقارنی وارونی (تقارن زیر شبکه ها) است. همزمان با شکست تقارن وارونی مفهوم فاز بری و انحنای بری و اثرات نابهنجار آن در تراپرد الکترونی در این ماده وارد می شود.

در سال ۱۹۸۴ مایکل بری مقاله ای نوشت که علاقه ی زیادی در شاخه ها ی دیگری از فیزیک شامل شیمی کوانتومی، به وجود آورد [۲۸]. در آن مقاله در مورد تحول بی دررویک ویژه حالت وقتی پارامترهای خارجی یک سیستم کوانتومی به آهستگی تغییر کند و در فضای پارامتریک مسیر بسته تشکیل دهد بحث شده بود. در غیاب تبهگنی وقتی مسیر بسته باشد ویژه حالت ها مطمئناً به مقدار اولیه ی خود باز می گردند، اما یک اختلاف فاز برابر انتگرال زمانی انرژی (تقسیم بر \hbar) به علاوه ی یک فاز اضافی که بعداً فاز بری نامیده شد می گیرند. فاز بری دارای سه خاصیت کلیدی است که مفهوم آن را مهم می سازد. اول اینکه تحت تبدیلات پیمانه ای ناورداست. دوم اینکه فاز بری یک فاز هندسی است یعنی این که می توان آن را به صورت انتگرال خطی روی مسیر بسته در فضای پارامتر نوشت و دقیقاً به نرخ تغییرات روی مسیر بستگی ندارد. سوم اینکه فاز بری شباهت زیادی به نظریه ی میدان پیمانه ای و هندسه ی دیفرانسیلی دارد [۲۹]. از جمله اثرات نابهنجار فاز بری وارد شدن یک سرعت نابهنجار [۳۰] در معادله ی سرعت گروه الکترون ها علاوه بر سرعت ناشی از رابطه ی پاشندگی طیف انرژی است که موجب به وجود آمدن اثری مانند اثر هال وادی در سیستم هایی مانند گرافین گاف دار که فاز در آنها مهم است می شود [۳۱].

این پایان نامه که ما در آن به بررسی ترابرد کوانتومی در گرافین گاف دار می پردازیم به سه فصل تقسیم شده است. در فصل اول ابتدا به معرفی گرافین خواهیم پرداخت و با استفاده از روش بستگی قوی هامیلتونی مؤثر یا همان هامیلتونی دیراک در انرژی های کم، حاکم بر فرمیون های دیراک را بدست می آوریم سپس به معرفی برخی از خواص یکتای گرافین می پردازیم در ادامه مروری بر روش پراکندگی و رابطه ی لاندائور برای رسانش خواهیم داشت و بعد از آن توان طیفی و فاکتور فانو را معرفی خواهیم کرد و بعد مروری کوتاه بر رسانش و فاکتور فانو در اتصال گرافینی معمولی (بدون گاف) داریم. در فصل دوم اهمیت گاف در گرافین را شرح خواهیم داد و در ادامه انواع روش های ممکن برای ایجاد گاف را که تا کنون پیشنهاد یا انجام شده است را بررسی می کنیم و بعد از آن مروری بر تحولات بی دررو در مکانیک کوانتومی و ظهور فاز بری و انحنا ی بری و اهمیت آن در دینامیک الکترونی خواهیم داشت. در فصل سوم رسانندگی و فاکتور فانو در اتصال گرافینی گاف دار شده و اثرات فاز بری را که به صورت شرط مرزی در مسئله وارد می کنیم برای این دو کمیت فیزیکی، به عنوان موضوعی جدید مورد بررسی قرار می دهیم و در نهایت نتایج بدست آمده در این کار را بیان خواهیم کرد.

فصل اول

آشنایی با گرافین

۱.۱ ناپایداری در دو بعد

گرافین با ساختار دو بعدی ماده ای است که از لحاظ ترمودینامیکی پایدار است و در شرایط نرمال می تواند وجود داشته باشد. اما تقریباً هفت دهه پیش لاندائو و پیپرلز^۲ عدم پایداری کریستالهای دو بعدی را به علت وجود افت و خیزهای گرمایی، که باعث جابجایی های اتمی در حد فواصل بزرگتر از فاصله ی بین اتمی می شود، پیش بینی کرده بودند [۳۲]. مشاهدات تجربی زیادی این بحث را تقویت می کرد زیرا دمای ذوب فیلمهای نازک با کاهش ضخامت سریعاً کاهش می یابد و بنابراین فیلم در حدود دوازده لایه ناپایدار می شود.

در سال ۲۰۰۴ یک گروه فیزیکدانان در دانشگاه منچستر به سرپرستی گایم^۳ و نووسلوف^۴ با استفاده از گرافیت سه بعدی (گرافیت از تک لایه های گرافین که روی هم، به طور ضعیفی کوپل شده اند تشکیل شده است) و با

^۱ Landau

^۲ Peierls

^۳ Geim

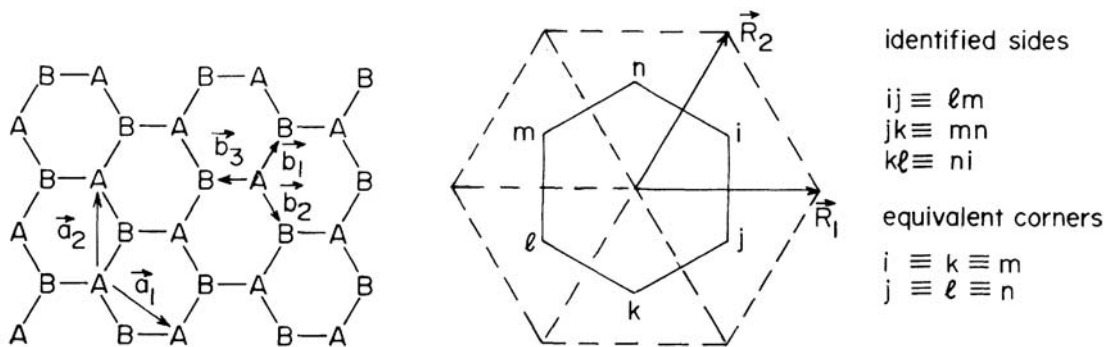
^۴ Novozelov

استفاده از روش «شکافت میکرومکانیکی»^۵ [۷،۲] موفق به ساخت تک لایه گرافین شدند. این رویکرد نه چندان پیچیده به آسانی قادر به تولید بلورهای گرافینی بزرگ (بیشتر از صد میکرومتر) و البته با کیفیت بالا است به طوری که ترابرد بالستیک [۳۳] و اثر کوانتومی هال (QHE) [۳۴، ۱۳] به سادگی در آن قابل مشاهده بود.

۲.۱ ساختار هندسی و طیف الکترونی

۱.۲.۱ ساختار هندسی

گرافین تک لایه ای از اتمهای کربن است، که همان طور که در شکل (۱.۱) نشاد داده شده به صورت سلولهای شش ضلعی است که در کنار هم قرار گرفته اند و ساختار لانه زنبوری را تشکیل می دهند که این ساختار براوه نیست، اما می توان آن را به صورت یک شبکه مثلثی با پایه دو اتمی در نظر گرفت.



شکل ۱-۱) شکل چپ: شبکه لانه زنبوری که تشکیل شده است از دو زیر شبکه A و B با بردارهای شبکه a_1, a_2 ، و زیر شبکه ها با بردارهای b_1, b_2, b_3 به یکدیگر مربوط می شوند. شکل راست: منطقه بریلوئن و شبکه وارون با بردارهای شبکه R_1 و R_2 . نقاط تبهگنی در زوایای $(ijklmn)$ از منطقه بریلوئن وجود دارد که دو تا از آن ها معادل نیستند [۳۵]

بردارهای شبکه را می توان به صورت $a_1 = (0, 1)a$ و $a_2 = (\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{-1}{2})a$ نوشت که $a = \sqrt{2}a_0$

و $a_0 \simeq 1.42 \text{ \AA}$ ثابت شبکه می باشد و در هر سلول اولیه دو اتم وجود دارد که در نقاط $(0, 0)$ و $(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{-1}{2})a$ قرار

^۵ Micromechanical cleavage

^۶ Quantum Hall Effect

گرفته اند و همچنین دو زیر شبکه A و B با بردارهای $b_1 = (\frac{1}{2\sqrt{3}}, \frac{1}{2})$ ، $b_2 = (\frac{1}{2\sqrt{3}}, -\frac{1}{2})$ و $b_3 = (\frac{-1}{\sqrt{3}}, 0)$ به هم مربوط می شوند. شبکه وارون نیز که در شکل نشان داده شده است یک شبکه لانه زنبوری با بردارهای شبکه $R_1 = (\frac{4\pi}{\sqrt{3}a})(1, 0)$ و $R_2 = (\frac{4\pi}{\sqrt{3}a})(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\sqrt{3})$ می باشد، بنابراین سلول واحد در شبکه وارون دارای دو اتم خواهد بود. نقاط تبهگن $(ijklmn)$ مرز ناحیه اول بریلوئن را مشخص می کند که ما دو نقطه $K = (\frac{4\pi}{\sqrt{3}a})(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\sqrt{3})$ و $K' = -K$ در Γ را به عنوان دو نقطه غیر معادل در نظر می گیریم.

۲.۲.۱ طیف الکترونی

اتم کربن با عدد اتمی ۶ دارای طیف اتمی $1s^2 2s^2 2p^2$ می باشد که در شبکه گرافین هر اتم کربن با هیبریداسیون sp^2 با سه اتم مجاور خود پیوند کووالانسی σ تشکیل می دهد به طوری که الکترونها در این سه پیوند قویا بین دو اتم جایگزیده است بنابراین این الکترونها در رسانندگی گرافین نقشی ندارند. تنها الکترون ارییتال p_z که عمود بر صفحه گرافین قرار دارد امکان جهش^۷ بین سایت های شبکه را دارد و فقط الکترون این ارییتال در رسانش نقش دارد بنابراین با استفاده از روش بستگی قوی^۸، فقط طیف نواری ناشی از این ارییتال را بررسی می کنیم. در روش بستگی قوی که بر اساس ترکیب خطی ارییتال های اتمی (LCAO^۹) که دامنه آنها در فواصل اتمی کوچک باشد استوار است، هامیلتونی تک الکترونی ناشی از پتانسیل دوره ایی شبکه به صورت زیر است:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sum_{R,i} V_{at}(r - R - d_i) = H_{at} + \sum_{R \neq 0,i} V_{at}$$

که d مختصات دو اتم در داخل سلول واحد و V پتانسیل ناشی از یونهای شبکه می باشد. به دلیل دوره ایی بودن پتانسیل شبکه $V(r) = V(r + R)$ (تقارن انتقالی^{۱۰}) تابع موج الکترونی در داخل بلور، که باید شرط بلاخ را رعایت کند $\psi(r + R) = e^{iK \cdot R} \psi(r)$ ، به صورت زیر نوشته می شود

^۷ Hopping

^۸ Tight binding

^۹ Linear Combination of Atomic Orbital

^{۱۰} Translational Symmetry

$$\psi_k(r) = \sum_R e^{ik \cdot R} \varphi_n(r - R) \quad \varphi_n(R - r) = \sum_n \psi_n(r) \quad (1)$$

در گرافین چون به دنبال نوار انرژی ناشی از ارییتال p_z هستیم و به دلیل این که در درون هر سلول واحد دو اتم کربن در مختصات 0 و d وجود دارد تابع موج الکترونی در درون شبکه گرافین به شکل زیر نوشته می شود

$$\psi_k(r) = \sum_R e^{ik \cdot R} (u\psi_{np_z}(r - R) + v\psi_{np_z}(r - R - d))$$

با اعمال این تابع موج در معادله شرودینگر تک ذره ایی $H\psi_k(r) = \varepsilon(k)\psi_k(r)$ و ضرب طرفین معادله در تابع موج ψ_m^* و انتگرال گیری روی کل سلول واحد و استفاده از رابطه زیر

$$\int \psi_m^*(r) H_{at} \psi_k(r) dr = \int (H_{at} \psi_m)^* \psi_k(r) dr = E_m \int \psi_m^*(r) \psi_k(r) dr$$

به رابطه زیر خواهیم رسید

$$(\varepsilon(k) - E_m) \int \psi_m^*(r) \psi_k(r) dr = \int \psi_m^*(r) \left(\sum_{R \neq 0, i} V_{at}(r - R - d) \right) \psi_k(r) dr \quad (2)$$

با جایگذاری $\psi_k(r)$ و استفاده از رابطه تعامد توابع موج اتمی

$$\int \psi_m(r)^* \psi_n(r) dr = \delta_{mn} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & (\varepsilon(k) - E_m) \int \psi_m(r)^* \left(\sum_R e^{ik \cdot R} (u\psi_{np_z}(r - R) + v\psi_{np_z}(r - R - d)) \right) dr \quad (4) \\ & = \int \psi_m(r)^* \left(\sum_{R \neq 0, i} V_{at}(r - R - d) \right) \left(\sum_R e^{ik \cdot R} (u\psi_{np_z}(r - R) + v\psi_{np_z}(r - R - d)) \right) dr \end{aligned}$$

$$(\varepsilon(k) - E_m) \int \psi_m(r)^* (u \sum_R e^{ik \cdot R} \psi_{np_z}(r - R) + v \sum_R \psi_{np_z}(r - R - d)) dr$$

$$= \int \psi_m(r)^* (\sum_{R \neq 0, i} V_{at}(r - R - d)) (u \sum_R e^{ik \cdot R} \psi_{np_z}(r - R) + v \sum_R e^{ik \cdot R} \psi_{np_z}(r - R - d)) \quad (5)$$

حال با داشتن انتگرال همپوشانی

$$\gamma = \int \psi_{p_z}(r)^* \psi_{p_z}(r - R - d) dr \quad (6)$$

وانرژی جهش^{۱۱} بین اتمها

$$t = \int \psi_{p_z}(r)^* \Delta U(r) \psi_{p_z}(r - R - d) dr \quad \Delta U(r) = \sum_{R \neq 0, i} V_{at}(r - R - d) \quad (7)$$

می توان رابطه انرژی تکانه را بدست آورد. به دلیل این که انرژی جهش و همپوشانی برای همسایه های دوم در شبکه گرافین کوچک است می توانیم از تقریب همسایه اول استفاده کنیم و از اثرات همسایه های بعدی صرف نظر کنیم.

بعد از مقداری محاسبه می توان معادله ماتریسی زیر را برای دامنه های v, u نوشت.

$$\begin{pmatrix} \beta - \varepsilon(k) & (t - \gamma \varepsilon(k)) f(k) \\ (t - \gamma \varepsilon(k)) f(k)^* & -\beta - \varepsilon(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0 \quad (8)$$

که در آن $f(k) = \sum_{i=1,2,3} e^{ik \cdot b_i}$ تابع ساختار شبکه، b_1, b_2, b_3 بردارهایی هستند که اندازه آنها برابر ثابت شبکه و رابط اتم مورد نظر و نزدیکترین همسایه ها هستند. با انتخاب مرجع صفر انرژی به طوری که

$$\beta = \int \psi_{p_z}^*(r) \Delta U(r) \psi_{p_z}(r) \quad (9)$$

انرژی مربوط به قرار گرفتن یک الکترون در یک نقطه شبکه (یا زیر شبکه) صفر شود و نیز صرف نظر کردن از جمله $\gamma \varepsilon(k)$ در حد انرژی های کم در مقابل $t \simeq 2.8 \text{ eV}$ ، رابطه انرژی تکانه به صورت زیر می شود

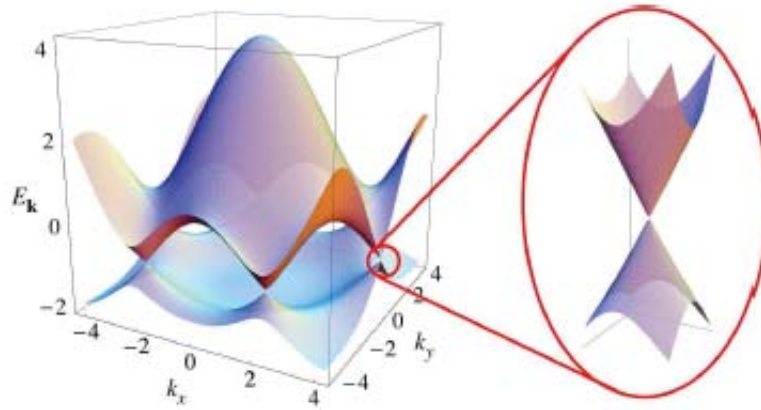
$$\varepsilon(k) = \pm t |f(k)| = \pm t |e^{ik \cdot b_1} + e^{ik \cdot b_2} + e^{ik \cdot b_3}| \quad (10)$$

علامت $+$ ، $-$ مشخص کننده نوار رسانش و ظرفیت است. شکل (۱-۲) ساختار نوار گرافین که در منطقه اول

بریلوئن^{۱۲} رسم شده است را نشان می دهد.

^{۱۱} Hopping

^{۱۲} Brillouin zone



شکل ۱-۲) شکل چپ طیف انرژی، در منطقه اول بریلوئن برای مقدار $t = 2.7\text{ev}$ و $t' = 0.2t$ (انرژی جهش همسایه دوم است) و شکل راست بزرگنمایی طیف انرژی در نزدیکی نقطه دیراک است [۳۶].

تعداد حالت‌های (k های) مجاز در منطقه بریلوئن برابر تعداد سایت‌های شبکه مستقیم است [۳۷] و چون در هر سلول اولیه شبکه دو اتم وجود دارد و هر اتم یک الکترون در ساختار نواری به مشارکت می‌گذارد، با در نظر گرفتن اسپین واقعی الکترون، نوار پایینی (نوار ظرفیت) ^{۱۳} با انرژی‌های منفی کاملاً پر و نوار بالایی (نوار رسانش) ^{۱۴} با انرژی‌های مثبت خالی می‌ماند. جدایی نوارهای رسانش و ظرفیت در صفرهای تابع $f(k)$ ، مینیمم خواهد بود که این امر در دو نقطه $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2\sqrt{3}})$ و $K = -K = (\frac{4\pi}{\sqrt{3}a})$ (نقاط دیراک ^{۱۵}) یعنی محل اتصال نوار رسانش و ظرفیت اتفاق می‌افتد و انرژی فرمی دقیقاً در نقطه $\varepsilon(k) = 0$ قرار می‌گیرد. نقاط دیگر در منطقه بریلوئن، همان‌طور که در شکل (۱،۱) نشان داده شده است، چون با بردارهای شبکه وارون به این دو نقطه مربوط می‌شوند معادل این دو هستند. به این ترتیب گرافین یک نیمه رسانای بدون گاف می‌باشد.

۳.۱ برانگیختگی‌های با انرژی کم و معادله دیراک

چون در مقابل محرک‌های بیرونی از جمله میدان الکتریکی و مغناطیسی ابتدا الکترون‌های سطح فرمی تحریک می‌شوند، بنابراین مشخصه‌های الکتریکی یک سیستم الکترونی را الکترون‌های حول سطح فرمی

^{۱۳} Valence Band

^{۱۴} Conduction Band

^{۱۵} Dirac Point

مشخص می کنند، به این ترتیب در گرافین نیز فقط الکترون های این ناحیه برای ما اهمیت دارند.

مطابق با ساختار نواری، برانگیختگیهای با انرژی کم تکانه شان حول نقاط K و K' اتفاق می افتد که این دو نقطه مخروطی شکل در منطقه بریلوئن را وادی ^{۱۶} می نامیم. بنابراین برای توصیف برانگیختگیهای با انرژی کم کفایت توابع موج u و v را حول این دو نقطه مشخص کنیم یعنی $u(k) = u(K + \kappa)$ ، $u'(k) = u'(K' + \kappa)$ ، $v(k) = v(K + \kappa)$ و $v'(k) = v'(K' + \kappa)$. در حد پیوسته ($a \rightarrow 0$) با بسط تابع ساختار شبکه یعنی $f(k)$ حول نقاط دیراک خواهیم داشت

$$f(K + \kappa) = \frac{\sqrt{3}}{2} a_0 (k_x + i k_y) \quad f(K' + \kappa) = \frac{\sqrt{3}}{2} a_0 (k_x - i k_y) \quad (11)$$

با جایگذاری روابط بالا در معادله ماتریسی رابطه پاشندگی انرژی به صورت خطی $\varepsilon(k) = \hbar v_f |k|$ ، که با جایگذاری روابط بالا در معادله ماتریسی رابطه پاشندگی انرژی به صورت خطی $\varepsilon(k) = \hbar v_f |k|$ ، که $v_f = \frac{\sqrt{3}}{2} a_0 t / \hbar \simeq 10^6 m/s$ سرعت فرمی یا سرعت گروه الکترون ها $v_f = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k}$ است، خواهد شد. بنابراین برانگیختگیهای با انرژی کم الکترون ها (حالت های پر در نواری رسانش) یا حفره ها ^{۱۷} (حالت های خالی در نواری ظرفیت) جرم موثر صفر خواهند داشت [۳۸، ۳۵]. بنابراین اگر چه سرعت فرمی از سرعت نور خیلی کوچکتر است ($v_f \ll c$) ولی چنین برانگیختگی های بدون جرمی بوسیله یک معادله موج کوانتوم مکانیکی نسبیتی موسوم به معادله دیراک ^{۱۸} توصیف می شود که تبدیل فوریه آن در فضای مکان به شکل زیر خواهد بود [۳۹].

$$-i\hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & \partial_x - i\partial_y \\ \partial_x + \partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (12)$$

دو مولفه u و v دامنه توابع موج $ue^{ik \cdot r}$ و $ve^{ik \cdot r}$ روی زیر شبکه های A و B را می دهند. با توجه به این که جهش نزدیکترین همسایه در شبکه گرافین زیر شبکه A را فقط با زیر شبکه B کوپل می کند بنابراین عملگر دیفراسیلی نیز همین خاصیت را دارد. با استفاده از عملگر تکانه در صفحه $x - y$ ، $p = -i\hbar(\partial_x, \partial_y)$ و ماتریس های پائولی $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ که روی اسپینور $\psi = (u, v)$ عمل می کند معادله دیراک به صورت فشرده زیر

^{۱۶} Valley

^{۱۷} Hole

^{۱۸} Dirac Equation

نوشته خواهد شد.

$$v_f(p, \sigma \psi) = \varepsilon \psi \quad (13)$$

به دلیل دو مولفه ای بودن تابع موج ψ درجه آزادی اسپینی توصیف شده بوسیله ماتریسهای پائولی را شبه اسپین^{۱۹} می نامیم. معادله موج بالا حالت های با بردار موج k در وادی K را توصیف می کند. وادی درگوشه مقابل منطقه بریلوئن، یعنی K' ، یک دسته حالت های مستقل دیگر با دامنه های u' ، v' را روی زیر شبکه های A ، B توصیف می کند که آن ها نیز از معادله ای شبیه معادله بالا پیروی می کنند با این تفاوت که $p_x \rightarrow -p_x$ تبدیل می شود، بنابراین اسپینور چهار مولفه ای $\psi = (u, v, u', v')$ که شامل هر دو وادی K ، K' می باشد از معادله چهار بعدی زیر پیروی می کند.

$$\begin{pmatrix} v_f(p, \sigma) & 0 \\ 0 & v_f(p, \sigma)^* \end{pmatrix} \psi = \varepsilon \psi \quad (14)$$

این معادله دیفرانسیل حد انرژی های پایین و طول موج های بلند در مدل بستگی قوی را نشان می دهد. هامیلتونی فوق متناظر هامیلتونی دیراک برای فرمیون های بدون جرم دو بعدی می باشد [۴۰، ۳۵] که در آن سرعت نور با سرعت فرمی جایگزین شده است. به این دلیل معادله (۱۴) را معادله دیراک و نقاط K ، K' را نقاط دیراک^{۲۰} می نامند این ویژگی همانندی با فرمیون های بدون جرم دیراک اصولاً از تقارن های شبکه بلوری گرافین ناشی می شود [۴۱] و به تقریب نزدیکترین همسایه وابسته نیست.

چیزی که تحقیق روی گرافین را جذاب می کند این است که طیف آن خیلی شبیه به طیف دیراک برای فرمیون های بدون جرم دیراک است [۴۲، ۳۵]. معادله دیراک ذرات کوانتوم نسبیتی با اسپین $\frac{1}{2}$ مانند الکترون ها را توصیف می کند. خصوصیت اساسی طیف دیراک امکان وجود پادذرات است، که از اصول موضوعه مکانیک کوانتومی و نظریه نسبیت به دست می آید. به طور خاص، حالات با انرژی های مثبت و منفی (الکترون ها

^{۱۹} Pseudospin

^{۲۰} Dirac Point

و پوزیترون ها)، به طور مطلوبی به هم مربوط هستند (همیوگ اند) و با مؤلفه های مختلف یک تابع حالت اسپینوری توصیف می شوند. این خصوصیت اساسی معادله دیراک اغلب به تقارن همیوگ — بارشناخته می شود.

۴.۱ شرایط مرزی

در اتصال های گرافینی چون بیشتر از نوارهای گرافینی^{۲۱} استفاده می شود ما نیز توجه خود را به شرایط مرزی در نوارهای گرافینی که از یک سو به الکترودها و از سوی دیگر بالبه های هندسی متفاوتی محدود شده معطوف می کنیم. اصولاً دو نوع لبه موسوم به زیگزاگ^{۲۲} و صندلی شکل^{۲۳} وجود دارد که منجر به خواص الکترونی متفاوتی برای نوار گرافینی می شود [۴۱] که منشأ این تفاوت در مدل پیوسته ای است که ما بر اساس روش بستگی قوی بنا کرده ایم که در آن توابع موج روی هر لبه به صورت ترکیب خطی توابع موج روی وادی K, K' می باشد [۴۳].

$$\begin{aligned}\psi_A(R_A) &= u_A(R_A)e^{ik \cdot R_B} + u'_A(R_A)e^{ik' \cdot R_A} \\ \psi_B(R_B) &= u_B(R_B)e^{ik \cdot R_B} + u'_B(R_B)e^{ik' \cdot R_B}\end{aligned}\quad (15)$$

برای یک نوار گرافینی با لبه های زیگزاگ در بالا و پایین همان طور که در شکل نشان داده شده است اتمها متعلق به یک زیر شبکه هستند (لبه بالا متعلق به زیر شبکه A و لبه پایین متعلق به زیر شبکه B است)

بنابراین روی هر لبه، ψ_A یا ψ_B باید برابر صفر شود، بنابراین مثلاً در $y = 0$ باید $\psi_A = 0$ یعنی توابع پوش $u_A = u'_A = 0$ و در لبه دیگر، $y = w$ باید $\psi_B = 0$ باشد یعنی توابع پوش $u_B = u'_B = 0$ بنابراین به طور کلی برای نوار با لبه زیگزاگ خواهیم داشت

$$u_A(y = 0) = u'_A(y = 0) = 0 \quad u_B(y = w) = u'_B(y = w) = 0 \quad (16)$$

^{۲۱} Strip Graphene

^{۲۲} Zigzag

^{۲۳} Armchair