



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة العربي التبسي - تبسة -
كلية العلم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة



كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة
FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES
ET DES SCIENCES DE LA NATURE ET DE LA VIE

قسم: علوم المادة

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر

الميدان: علوم المادة

التخصص: فيزياء المادة المكثفة

العنوان:

دراسة تأثير التغيرات الميكانيكية
على الخواص الالكترونية للغرافن

إعداد الطالبتين:

بوعكاز إيمان

باهي عبير

لجنة المناقشة:

| | | | |
|-------------------|---------------|--------------|---------------------|
| صوان عزالدين | أستاذ محاضر ب | رئيسة اللجنة | جامعة العربي التبسي |
| بوديار عبيد | أستاذ محاضر أ | مقرر | جامعة العربي التبسي |
| منصور محمد الهادي | أستاذ محاضر ب | ممتحن | جامعة العربي التبسي |

السنة الجامعية: 2020-2021



Déclaration sur l'honneur de non-plagiat

(à joindre obligatoirement au mémoire, remplie et signée)

Je soussigné(e),

Nom, Prénom : Bahi Abir /
Régulièrement inscrit(e) en Master au département : de science de la matière
N° de carte d'étudiant : 34022797115
Année universitaire : 2020-2021
Domaine : science de la matière
Fillière : physique
Spécialité : physique de la matière condensée
Intitulé du mémoire : دراسة تأثير التغيرات في خواص المواد الكهروضوئية للحرارة



Atteste que mon mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Je certifie également que je n'ai ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé :

L'étudiant sera convoqué devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont :

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent ;
- L'exclusion d'une année du master ;
- L'exclusion définitive.

Fait à Tébessa, le :

12 جويلية 2021

Signature de l'étudiant(e)

الجامعة الجزائرية للدراسات والبحوث
والتكنولوجيا
الجامعة الجزائرية للدراسات والبحوث
والتكنولوجيا
الجامعة الجزائرية للدراسات والبحوث
والتكنولوجيا





Déclaration sur l'honneur de non-plagiat
 (à joindre obligatoirement au mémoire, remplie et signée)

Je soussigné(e),
 Nom, Prénom : Bahi Abir
 Régulièrement inscrit(e) en **Master** au département : de science de la matière
 N° de carte d'étudiant : 34022797115
 Année universitaire : 2020-2021
 Domaine : science de la matière
 Filière : Physique
 Spécialité : physique de la matière condensée
 Intitulé du mémoire : دراسة تأثير الاغبريات اسيكليك على الخواص الكهربائية والحرارية



Atteste que mon mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Je certifie également que je n'ai ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé :

L'étudiant sera convoqué devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont :

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent ;
- L'exclusion d'une année du master ;
- L'exclusion définitive.

Fait à Tébessa, le : 12 جويلية 2021

Signature de l'étudiant(e)

(Handwritten signature)

المكتب الوطني للتحقق من النسخة
 وبتكنولوجيا المعلومات
 بوزارة التعليم العالي والبحث العلمي
 الجزائر



بسم الله الرحمن الرحيم

شكر وعرفان

نحمد الله عز وجل الذي وفقنا في إتمام هذا البحث العلمي والذي ألهمنا الصحة والعافية والعزيمة .

ثم نتقدم بجزيل الشكر والتقدير والامتنان إلى الأستاذ المؤطر "بوديار عميد" الذي شرفنا بقبوله الإشراف على هذه المذكرة بما قدمه لنا من توجيهات ومعلومات قيمة ساهمت في إثراء موضوع دراستنا في جوانبها المختلفة .

كما نتقدم بجزيل الشكر إلى أعضاء لجنة المناقشة الموقرة:

_الأستاذ منصور عبد الهادي: على موافقته للمشاركة كعضو ممتحن في لجنة المناقشة

_الأستاذ صوان عز الدين : على تقبله ترأس لجنة المناقشة

كما لايفوتني أن أتوجه بالشكر و العرفان و التقدير إلى كل من مد يد العون والمساعدة

لي , و أسدي لي نصحا , أو توجيها , أو إرشادا , أو دعوة في ظمير الغيب , أو تيسيرا

لأمري , واسأل الله بمنه وكرمه أن يتقبل مني ومنهم صالح الأعمال

وأخيرا نعيد الشكر لله سبحانه وتعالى

الإهداء

أهدي ثمرة عملي هذا إلى

_ إلى اعز الناس وأقربهم إلى قلبي إلى والدي العزيزة وفلذة قلبي وإلى والدي العزيز اللذان كانا عوننا وسندا كبيرا لي وكانا لدعائهما المبارك أعظم الأثر في تسيير سفينة الوجود حتى ترسو على هذه الصورة .

_ إلى اعز صديقاتي التي ساندتني وخطت معي خطواتي وعمرتني بالحب والتقدير والنصيحة والتوجيه والإرشاد.

_ إلى قرة عيني والنبع الذي ارتوي منه حبا وصبرا ، إلى الابتسامات التي تزين حياتي ، إلى النور الذي يضيء حياتي ، إلى سندي وقوتي إلى أختي حماكم الله من كل شر .

بأهلي محير

إهداء

اهدي أحرفه مذكرتي:

إلى روح جدتي الطاهرة التي افتقدتها كثيرا رحمة المولى رحمة واحدة

إلى كل شبية من شبيب أبيي إلى من ساندني وكان شمعة تضيء طريقي ، إلى من أكن له مشاعر الحب والتقدير والاحترام أبيي الغالي "جمال" أطال الله عمره واسأل المولى أن يشفيه ويعافيه.

إلى كل دعوة من فم أمي، إلى من كانت سبب وجودي على هذه الأرض ، إلى من وضعت الجنة تحت أقدامها ، إلى التي أرج وان أكون قد نلت رضاها إلى أمي الغالية "حليمة" أطال الله عمرها.

إلى كل أفراد عائلتي وخص بالذكر إخوتي "عبد النور ، صلاح الدين ، نصر الدين ، خولة ، رحمة" حفظكم الله يا نجومي .

إلى صديقات المواقف لاسنين المعرفة " هاجر ، ماجدة ، مروى ، مريم" حفظكم الله يا غالياتي .

إلى كل الأساتذة الذين قدموا لنا يد المساعدة إلى كل هؤلاء ، اهدي هذا العمل المتواضع واسأل الله عز وجل أن يوفقنا لما فيه الخير لنا .

بوعزاز إيمان

المخلص

ملخص

لقد قمنا في هذا العمل بدراسة تأثير تغيرات شكل سطح الغرافن على الخواص الالكترونية، وذلك بدراسة توزيع كثافة الحقل المغناطيسي الناتج عن هذه التشوهات ، حيث يؤدي إلى نشوء مفعول هول ذاتي ، وكذلك مستويات لانداو. نتيجة المحاكات أعطت تناسب تقريبي بين عدد الدوائر ثابتة الكثافة مع طول الموجة للاهتزازات السطحية .

الكلمات المفتاحية : الغرافن - حقل مغناطيسي - تشوهات

Abstract

In this work, we have studied the effect of changes in the shape of the graphene surface on the electronic properties, by studying the distribution of the magnetic field density resulting from these distortions, which leads to emergence of a self-Hall effects, as well as Landau levels. The simulation result gave an approximate proportion between the numbers of circles of constant density with the wavelength of the surface vibrations.

Key words:

Graphene – magnetic field– distortions.

Résumé :

Dans ce travail, nous avons étudié l'effet des changements de forme de la surface du graphène sur les propriétés électroniques, en étudiant la distribution de la densité de champ magnétique résultant

de distorsions , ce qui conduit a l'émergence d'un effet d'auto Hall, comme ainsi que les niveaux Landau .le résultat de la simulation a donne une proportion approximative entre le nombre de cercles de densité constante avec la longueur d'onde des vibrations de surface .

Mots-clés : graphène-champ magnétique-distorsions

01.....المقدمة العامة

الفصل الأول: عموميات حول الغرافن

- 04.....1-1- مقدمة
- 022-1- تاريخ الغرافن
- 04.....3-1- أشكال الكربون
- 05.....1-3-1- الماس
- 06.....2-3-1- الغرافيت
- 071-2-3-1- النظام السداسي
- 072-2-3-1- النظام المعيني للوجه
- 08.....3-3-1- الفوليرين
- 09.....4-3-1- الأنابيب النانوية الكربونية
- 12.....5-3-1- الغرافن
- 134-1- إنتاج الغرافن
- 14.....5-1- طرق تحضير الغرافن
- 14.....1-5-1- طريقة هامر
- 142-5-1- طريقة ترسيب الأبخرة الكيميائية
- 143-5-1- طريقة التقشير الكيميائي
- 154-5-1- طريقة التقشير الكهروكيميائي
- 156-1- خصائص الغرافن
- 16.....7-1- سبب أهمية الغرافن
- 168-1- استخدامات الغرافن
- 171-8-1- تحلية المياه المالحة
- 17.....2-8-1- صنع بطاريات فائقة الشحن
- 17.....3-8-1- إنتاج مادة الايروجيل الأسفنجية

- 17.....4-8-1-استخدام اللوحات الشمسية في الشتاء
- 17.....9-1-الاستخدامات المستقبلية لمادة الغرافن
- 18.....1-9-1-الهواتف الذكية
- 20.....2-9-1-الروبوتات
- 20.....3-9-1-تحديد المواد الغذائية
- 22.....4-9-1-تقنيات الأجهزة القابلة للارتداء
- 23.....5-9-1-واجهات لمسية جديدة
- 24.....10-1-تأثير الغرافن على البيئة

الفصل الثاني : الخصائص الالكترونية للغرافن

- 25.....1-2- الخصائص الالكترونية للغرافن
- 25.....1-1-2-ذرة الكربون
- 32.....2-1-2-الدوال π في الغرافن
- 39.....3-1-2-فرميونات ديراك عديمة الكتلة

الفصل الثالث : دراسة تغيرات سطح الغرافن

- 47.....1-3-مقدمة
- 47.....2-3-شكل سطح الغرافن
- 51.....3-3- شكل سطح الغرافن في وجود التناظر
- 54.....4-3-شكل سطح الغرافن في حالة عدم وجود التناظر

الفصل الرابع : دراسة تأثير التغيرات في حالة تناظر دائري

59.....1-4-مقدمة

59.....2-4-دراسة الحقول المغناطيسية في حالة التناظر الدائري

61.....3-4-دراسة النتائج

النتيجة العامة

70.....النتيجة العامة

المصادر و المراجع:

71.....المصادر و المراجع

فهرس الأشكال

فهرس الأشكال

| الصفحة | العنوان | الشكل |
|--------|--|--------------|
| 04 | مخطط من أسفل إلى أعلى ومن أعلى إلى أسفل لتخليق الغرافن أعيد طبعه | الشكل (1-1) |
| 05 | تمثيل ذرة الكربون الرئيسية. | الشكل (2-1) |
| 06 | الماس في الطبيعة (يسار) وهيكل من الماس (يمين). | الشكل (3-1) |
| 07 | الغرافيت في الطبيعة. | الشكل (4-1) |
| 08 | التركيب البلوري للغرافين على الشكل السداسي (الأيسر) وعلى الشكل المعين (الأيمن). | الشكل (5-1) |
| 09 | فوليرين C_{60} يتكون من 20 سداسي 12 خماسي . | الشكل (6-1) |
| 11 | تمثيل تخطيطي للبنية البلورية لأنبوب النانوي الكربوني . | الشكل (7-1) |
| 12 | هياكل مختلفة تمثل كرسي بذراعين ومتعرج ولولبي. | الشكل (8-1) |
| 13 | غرافن مكون من كربون في هيئة بلورية سداسية في طبقة واحدة . | الشكل (9-1) |
| 19 | صورة حقيقية لهاتف نقال . | الشكل (10-1) |
| 20 | صورة حقيقية لروبوت. | الشكل (11-1) |
| 21 | صورة المواد الثلاثة. | الشكل (12-1) |
| 22 | تقنيات الاجهزة القابلة للارتداء. | الشكل (13-1) |
| 23 | صورة تمثل الواجهات اللمسية الجديدة . | الشكل (14-1) |
| 30 | اتجاهات sp^3 الروابط الكيميائية لذرة الكربون . | الشكل (1-2) |
| 31 | هيكل الماس . | الشكل (2-2) |
| 33 | هيكل الغرافيت . | الشكل (3-2) |

| | | |
|----|---|-------------|
| 34 | (a) شبكة قرص العسل: تظهر الشبكتان الفرعيتان A و B باللونين الأسود و الرمادي. ناقلات شعرية متبادلة وبعض النقاط الخاصة في منطقة بريلوان. | الشكل (4-2) |
| 35 | هيكل الفرقة من الغرافن . | الشكل (5-2) |
| | طيف طاقة الإلكترون للغرافن في الجوار الأقرب . | الشكل (6-2) |
| 64 | توزيع كثافة شدة المرتبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 1$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 . | الشكل (1-4) |
| 64 | توزيع كثافة شدة المرتبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 2$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 . | الشكل (2-4) |
| 65 | توزيع كثافة شدة المرتبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 3$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 . | الشكل (3-4) |
| 65 | توزيع كثافة شدة المرتبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 4$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 . | الشكل (4-4) |
| 66 | توزيع كثافة شدة المرتبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 5$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 . | الشكل (5-4) |
| 66 | توزيع كثافة شدة المرتبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 6$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 . | الشكل (6-4) |
| 67 | توزيع كثافة شدة المرتبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 7$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 . | الشكل (7-4) |
| 67 | توزيع كثافة شدة المرتبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 8$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 . | الشكل (8-4) |

| | | |
|----|---|--------------|
| 68 | توزيع كثافة شدة المرتبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 9$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 | الشكل (9-4) |
| 66 | مخطط يوضح عدد الدوائر الكاملة ذات الكثافة العظمى أو الصغرى بدلالة λ | الشكل (10-4) |
| 67 | ظهور مفعول هول ذاتي بسبب الحقل المغناطيسي المولد بتغيرات سطح الغرافن | الشكل (11-4) |

جدول الرموز

| اسمه | الرمز | اسمه | الرمز |
|------------------------------|--|--|-----------------------------|
| الوظيفة الذاتية | $\psi_{e,h}^{(k)}$ | الرمز الفيزيائي للفوليرين | C_{60} |
| | | زوايا قطبية | φ و θ |
| مصفوفات بولي | $\delta_0, \delta_x, \delta_y, \delta_z$ | دوال (معادلات أساسية مطابقة للتوفيقات الكروية) | $Y_{m,l}$ |
| دالة موجة الإلكترون | ψ | عنصر للزاوية الصلبة | do |
| مصفوفة الوحدة في متجه الوادي | τ_0 | الانعكاس | T |
| الكثافة السطحية | ρ | الزاوية القطبية للشعاع | $\Phi_{\vec{k}}$ |
| معاملات دوال بيسل | a_n, b_n, I_n | نواقل الجوار الأقرب | $\vec{\delta}$ |
| وسائط | b_{mn}, a_{mn}, a_{0n} | شعاع الموجة | \vec{K} |
| نقاط سرج لطيف الإلكترون | M | الطاقة | $E(\vec{K})$ |
| كثافة الإلكترون للحالات | $\delta N(E)$ | مؤثر هاملتوني | \hat{H}_K |
| طيف طاقة الإلكترون | E_M | سرعة الإلكترون عند النقاط المخروطية | v |
| | | متجهات الشبكة العكسية | $\vec{a}, \vec{b}, \vec{k}$ |

المقدمة العامة

مقدمة عامة

إن الغرافن من المواد المكتشفة حديثا في سنة 2004 ، الذي يمتلك طبقة رقيقة ثنائية الأبعاد مكونة من ذرات الكربون النقية ، كما أن له مزايا استثنائية تجعله محط اهتمام الباحثين والصناعيين .

في هذه الدراسة نتعرف على الغرافن حيث نبرز بعض خصائصه الاستثنائية و أهميته وطرق إنتاجه وبعض استخداماته المستقبلية وتأثير التغيرات الميكانيكية على خواصه الالكترونية والمرونية ، وقد قسمت المذكرة إلى أربعة فصول .

في الفصل الاول نقم بتقديم معلومات عامة حول الغرافن واستخداماته وأهميته وكيفية تحضيره و بعض استخداماته المستقبلية .

في الفصل الثاني وهو فصل نظري تطرقنا فيه إلى دراسة الخواص الالكترونية للغرافن .

في الفصل الثالث هو ايضا فصل نظري تطرقنا فيه إلى دراسة التغيرات التي تحدث على سطح الغرافن ومدى تأثيرها على الخواص الالكترونية بسبب التشوهات الناتجة .

في الفصل الرابع قمنا بدراسة تأثير التغيرات الموجودة على سطح الغرافن على الخواص الالكترونية التي تنتج من خلال ظهور حقول مغناطيسية وبسبب تعقيد المسألة فقد تطرقنا فقط إلى السطح ذات التناظر الدائري.

الفصل الأول : عموميات حول الغرافن

1.1. مقدمة:

تعد الدراسة النظرية للغرافن , ثنائي الأبعاد , مجالاً سريع النمو للغاية لأبحاث المواد المكثفة اليوم . كان احد المعالم البارزة هو الدليل التجريبي لتأثير هول الكمي غير العادي الذي تم نشره في سبتمبر 2005 من قبل مجموعتين مختلفتين , مجموعة مانشستر بقيادة اندريه جيم وهورست ستورمر [1-2] . منذ هذه اللحظة وحتى مارس 2008, تم نشر ما يقرب من 700 مخطوطة من الغرافن في عنوانها على خادم ما قبل الطباعة , أثبتت إحدى المنشورات الأولى أن الغرافن في عام 2004 من قبل مجموعة جيم إمكانية التحكم في كثافة الموجة الحاملة في لوح الغرافن عن طريق التطبيق البسيط لجهد البوابة [3] , هذا التأثير هو عنصر أساسي في تصميم الأجهزة الالكترونية . تصل الالكترونيات القائمة على السيلكون اليوم إلى حدودها في التصغير , وهو في حدود 50 نانومتر لقناة كهربائية في حين تم إثبات أن شريط الغرافن الضيق الذي يبلغ عرضه بضعة نانومترات فقط يمكن استخدامه كترانزيستور [4], أي مكون الكتروني أساسي لذلك قد يأمل المرء في تحسين التصغير بترتيب واحد من حيث الحجم عند استخدام الالكترونيات القائمة على الغرافن [5].

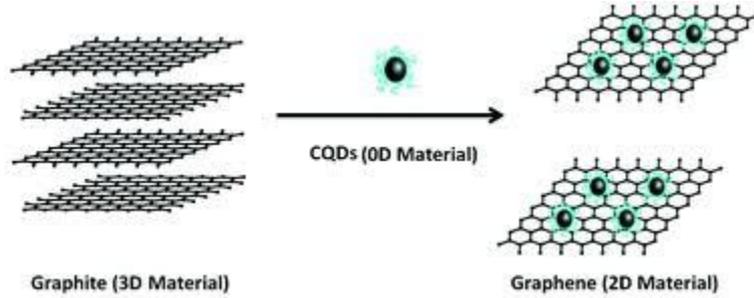
2.1. تاريخ الغرافن :

لم يكن اكتشاف الغرافن في عام 2004 أول تعامل مع هذه المادة الثورية، ففي عام 1986 [6] . حيث كان تطوير التقنيات الجديدة التي تسمح بتحديد ووصف بنية الذرة الواحدة من الغرافن وخصائصه غير العادية. ومن المحتمل أن يتم إنتاج الغرافن في كل مرة أثناء استخدام قلم رصاص . ومع ذلك , من الصعب ملاحظتها بين طبقات الغرافن المكسدة الأخرى . في الواقع لا يمكن ملاحظة الغرافن باستخدام تقنيات التصوير التقليدية (باستثناء الفحص المجهر الإلكتروني أو القوة الذرية) بسبب عدم وجود اختلافات

واضحة في التركيب الذري لطبقة الغرافن أحادية الطبقة والعديد من طبقات الغرافيت [7] . للحصول على كثافة الصورة المطلوبة والتباين ولتحديد بنية الذرة المفردة للغرافن في المجهر الضوئي، يلزم تحديد حامل العينة المناسب سماكة وطول موجي معين باستثناء الفحص المجهر البصري، هنا كتقنيات مفيدة في مراقبة وتحديد بنية الغرافن مثل مجهر القوة الذرية، المجهر الإلكتروني للإرسال، مطيافية الانبعاث الزاوي، والتحليل الطيفي لرابي ورامان [8] . حيث يعد تنظير رامان من أفضل الطرق للتعرف على بنية الغرافن والوصف السريع والدقيق، والقياسات المباشرة للتفاعلات الإلكترونية التي تسمح بتحديد عدد الطبقات والشوائب . استخدم أندري جيم وكونستاتين نوفوسلوف طريقاً بسيطة وفعالة للحصول على الغرافن من خلال الاستخدام المتكرر للشريط اللاصق لكسر رقائق رقيقة من الغرافيت ثم إرفاقها ببلوطة من السيلكون المؤكسدة للكشف عن عدد طبقات الغرافن وتحديداتها، بسبب استخدام بلورات عالية الجودة وهي تعد أحد أفضل الطرق للحصول على الغرافن أحادي الطبقة المتجانس هيكلياً وكهربائياً [9] . على الرغم من محدودية إنتاجه وإمكانية استخدامه العملي، أدت طريقة التقشير الميكانيكي إلى اكتشافات عديدة لخصائص الغرافن الإلكترونية والميكانيكية وأسفرت عن تطوير طرق جديدة للإنتاج [10-11].

هناك طريقتين للحصول على الغرافن (الشكل 1-1) . يتضمن أحدهما الغرافيت وإضعاف قوى فاندر وابلز لفصل الطبقات عن بعضها البعض والثاني يعتمد على مصادر الكربون البديلة، يعتبر التشريح الفعال دون الإضرار بالهيكل والحماية من إعادة تجميع

العناصر الرئيسية للحصول على الغرافن من الغرافيت. و عيوب هذه الأساليب هي انخفاض العائد و العديد من خطوات الإنتاج [12][13].



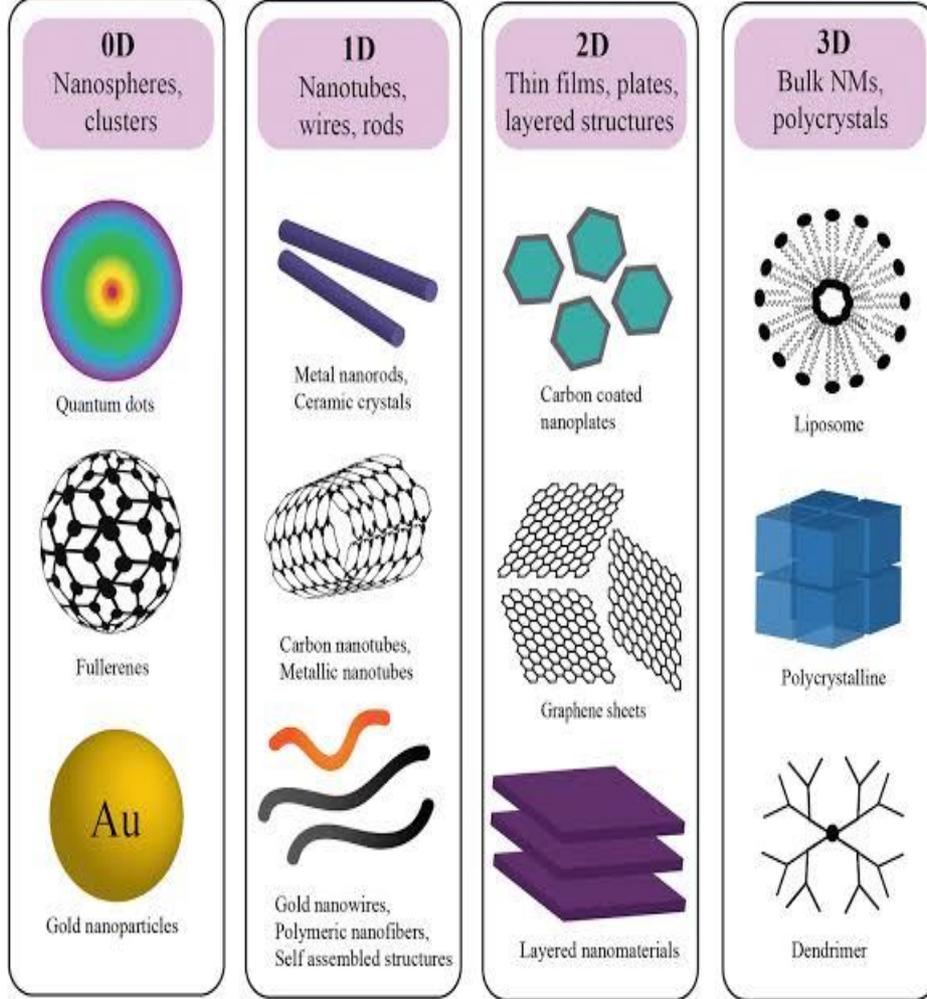
الشكل (1-1): مخطط من أسفل إلى أعلى ومن أعلى إلى أسفل لتخليق الغرافن أعيد

طبعه [14]

3.1 أشكال الكربون :

لأكثر من 100 عام ، سعى الكيميائيون إلى تصنيع جزيئات الكربون بأشكال مختلفة و خصائص فيزيائية كيميائية . و من أشهرها الكربون غير المتبلور (جينكينز 1973) ، الغرافيت (انتشون 1896) ، الغرافن (نوفوسيلوف 2004-2005) ، الفوليرين (كروتو 1985) ، الأنابيب النانوية الكربونية (ليجيما 1991) و الماس (مويسان 1894) ايضا ، تم تطوير أشكال أكثر تعقيدا مثل الغرافن النانو و ألياف الكربون النانوية مؤخرا ، و بشكل عام تعرف هذه الجزيئات بخصائصها الكهربائية و صلابتها و قوتها الميكانيكية العالية ، فضلا عن ثباتها الكيميائي و الحراري [15]

NMs classification based on dimensionality



الشكل (2-1) : تمثيل ذرة الكربون الرئيسية [16]

1.3.1. الماس: مصنوع من الكربون، نفس المادة الموجودة في أقلام الرصاص أو

مسحوق الغرافن المسحوق الأسود ، يكمن الاختلاف في طريقة ترتيب ذرات الكربون

بينهما . في الماس ، ترتبط كل ذرة كربون بأربع ذرات كربون أخرى لتشكيل هيكل

على شكل هرم ، في الواقع الماس هو أقصى مادة طبيعية نعرفها و يتطلب تكوين الماس

درجات حرارة عالية و ضغوط عالية ، و في الطبيعة توجد هذه الظروف فقط في أعماق القشرة الأرضية .

له هيكل مكعب الوجه ، كل ذرة مرتبطة بتهجين SP^3 ، و هي تشارك في الروابط التساهمية لذلك الماس عبارة عن عازل كهربائي بشريط ممنوع يساوي 5.4 فولط.



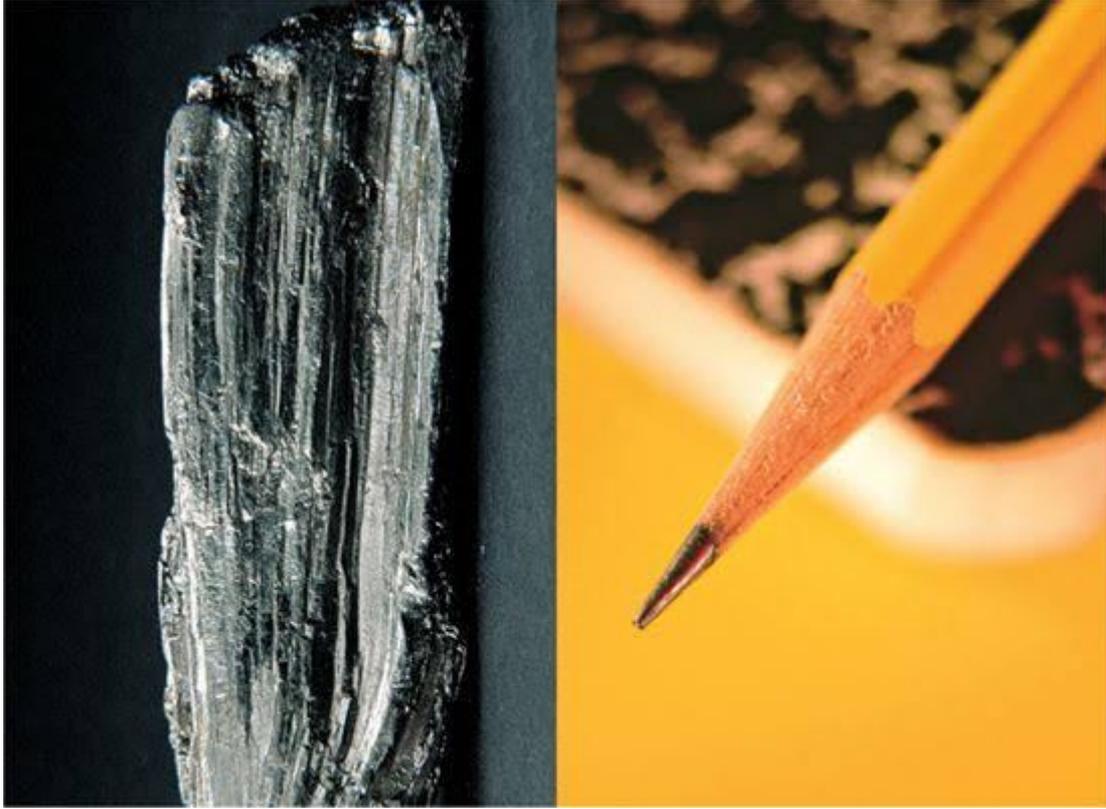
الشكل (3-1) : (يمين) هيكل من الماس (يسار) الماس في الطبيعة [17].

2.3.1. الغرافيت: الغرافيت هو أكثر أشكال الكربون استقرارا في درجة حرارة و

ضغط الغرفة ، يأتي على شكل مادة صلبة سوداء و هو رقيق مرن لامع و معدني ،

يتكون من ذرة الكربون المهجنة SP^2 ، في بنية مستوية من الصفائح المترابطة في كل

طبقة ، يتم ترتيب الذرات في شبكة من النوع " هيكل قرص عسل" و ترتبط المستويات ببعضها البعض عن طريق تفاعلات ضعيفة بمسافة 0.335 نانومتر .



الشكل (1-4) : الغرافيت في الطبيعة [18] .

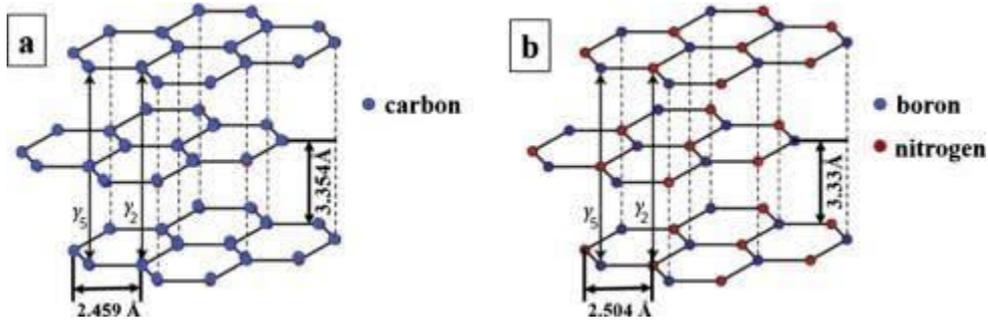
يتبلور الغرافن وفقا لنظامين :

1.2.3.1. النظام السداسي : و هو الشكل الاكثر شيوعا (90 بالمئة من جميع البلورات)

أو الطبقات الاولية تظهر بترتيب A-B-A-B .

2.2.3.1. النظام المعيني الوجوه : أكثر ندرة و اقل استقرارا في ظل ظروف درجة

الحرارة و الضغط العاديين ، أو الطبقات الاولية تتكرر بترتيب A-B-C-A-B-C .



الشكل (5-1) : التركيب البلوري للجرافن على الشكل السداسي (الأيسر) وعلى الشكل المعين (الأيمن) [19] .

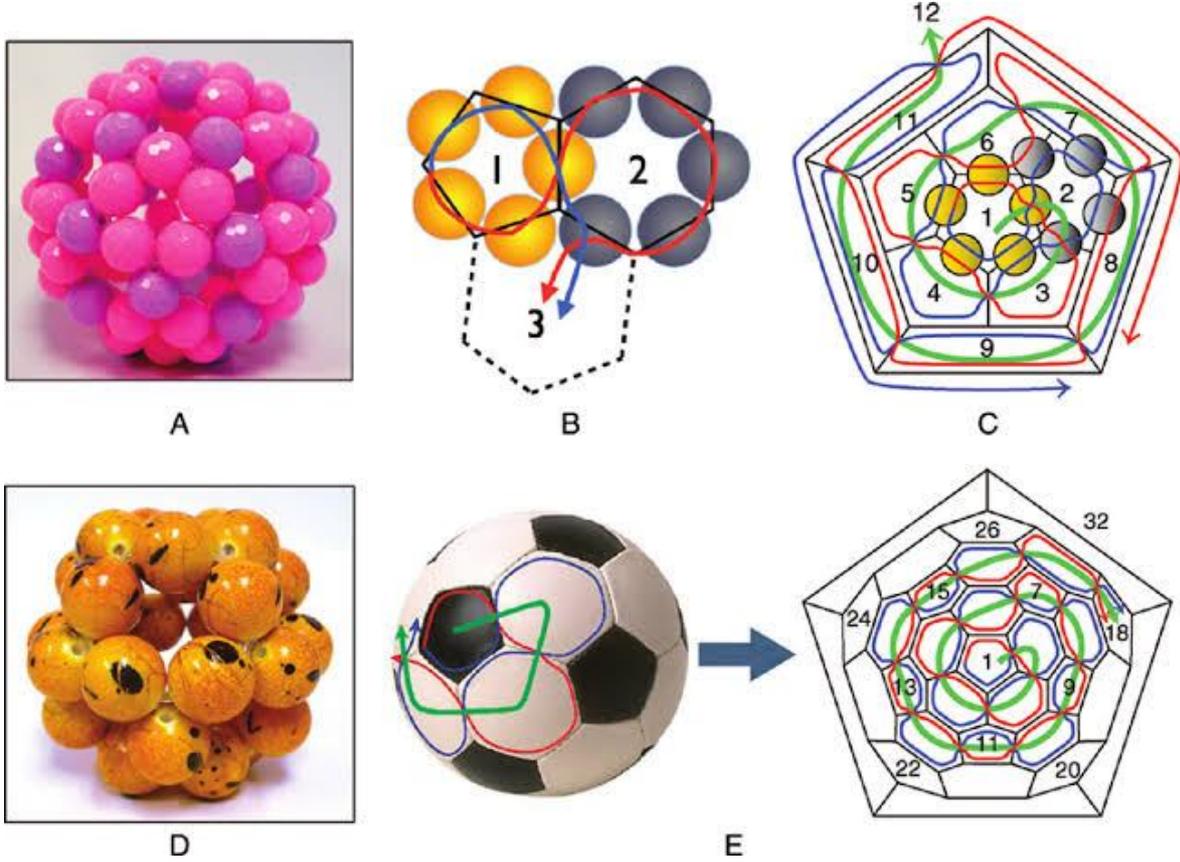
3.3.1. الفوليرين :

اكتشف من قبل (روبرت و هارولد كروتو عام 1985) والذين تحصلوا على جائزة نوبل فالكيمياء سنة 1996 . الفوليرين هي هياكل لها بنية متشابهة لتلك الموجودة في الجرافيت ، أي سلسلة SP^2 سداسية من ذرات الكربون المهجنة

تم إجراء أول عملية تخليق للفوليرين عن طريق تبخر الجرافيت بواسطة إشعاع الليزر في وجود تدفق من الهليوم . يتحول الكربون الموجود في الجرافيت إلى بلازما ساخنة تبرد و تتاين لنتج مجموعات C_n و معظمها من C_{60} .

C_{60} عبارة عن مجسم عشري الوجوه 20 سداسيا و 12 خماسيا و يمكن مقارنتها بكرة القدم بحيث يكون كل خماسي مستقرا محاط ب 5 أشكال سداسية . الفوليرين متماثل و جميع الذرات مكافئة . بين ما يسمى السداسيات [6,6] و هي روابط مزدوجة بطول

1.38 درجة مئوية وروابط بين البنثاغون و سداسي يسمى [5,6] و هي روابط 1.45 درجة .



الشكل (1-6) : فوليرين C_{60} يتكون من 20 سداسي و 12 خماسي [20] .

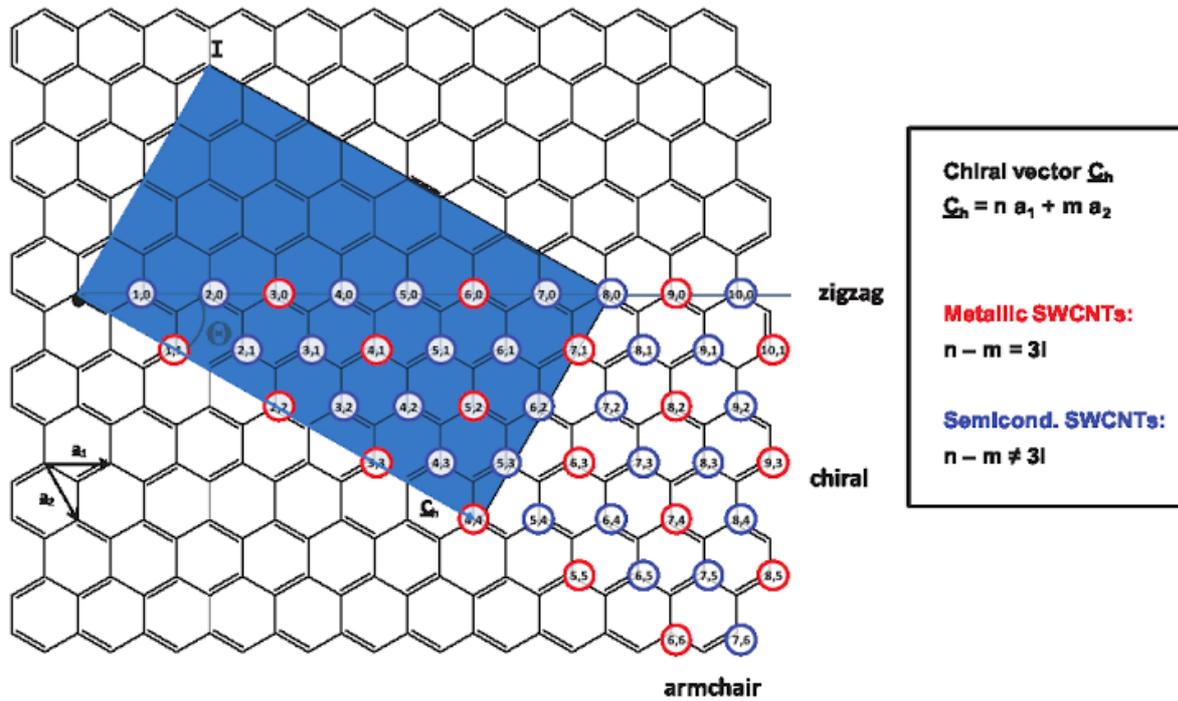
4.3.1. الأنابيب النانوية الكربونية :

لوحظت الأنابيب النانوية الكربونية لأول مرة في عام 1991 من قبل شركة سيميو ليجيما اليابانية أثناء تصنيع الفوليرينات بواسطة الطاقة الكهربائية. كانت تتميز بالفحص المجهرى حيث يتم لف صفائح الغرافن على نفسها في شكل أنابيب دقيقة وقد تم إعادة تسميتها لاحقا بالأنابيب النانوية الكربونية متعددة الجدران ، بعد ذلك بعامين تم الإبلاغ

عن توليف الأنابيب النانوية الكربونية أحادية الجدار بشكل مستقر بواسطة بارليجيما من خلال تحسين القوس الكهربائي . تحتوي الأنابيب النانوية الكربونية على جدار واحد أو أكثر ، الأنبوب النانوي الكربوني أحادي الجدار عبارة عن ورقة من الغرافن تتكون فقط من ذرات كربون موضوعة أعلى شبكة سداسية الشكل ، يتم لف هذه الصفحة على نفسها لتشكيل اسطوانة صغيرة بقطر يتراوح من 0.5 غالى بضع عشرات من نانومتر و طولها لا يتجاوز بضعة ميكرومتر ، هيكلها أحادي البعد و تناظر محوري ، اعتمادا على لف الورقة يتم الحصول على تركيبات مختلفة ، يتم تحديدها بواسطة متجه لولبي (n, m) ويمكن وصف المتجه اللولبي بأنه المتجه بين نقطتين A و O و الذي يتزامن في نهاية طي ورقة الغرافن . يتم التعبير عن المتجه اللولبي بعلاقة خطية بين المتجهين الأساسيين للخلية الأولية \vec{a}_1 و \vec{a}_2 حيث :

$$\vec{Ch} = n \vec{a}_1 + m \vec{a}_2 \quad (1-1)$$

حيث n و m أعداد صحيحة و $0 \leq m \leq n$



الشكل (7-1) : تمثيل تخطيطي للبنية البلورية للأنيوب الكربوني [21] .

من الممكن تحديد زاوية لف فيما يتعلق بمحور الأنبوب (المتجه اللولبي) . تسمى هذه

الزاوية بالزاوية اللولبية θ و يمكن حسابها وفقا للصيغة التالية:

$$\theta = \arctan \sqrt{\frac{m}{2n+m}} \quad (2-1)$$

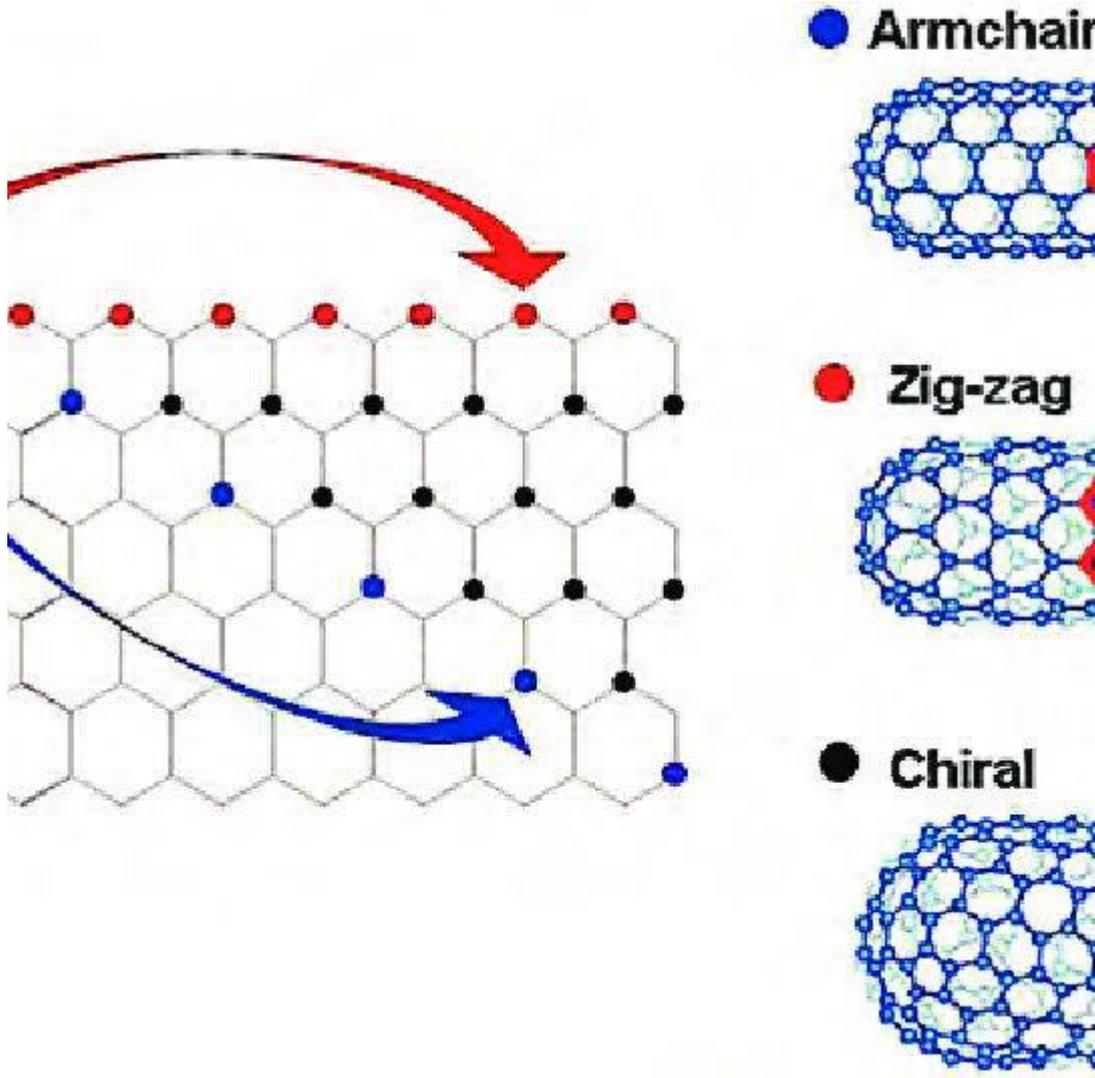
تستخدم المؤشرات n و m وكذلك الزاوية لتصنيف الأنابيب النانوية الكربونية إلى

ثلاث عائلات هيكلية :

أنبوب الكربون النانوي بتشكيل الكرسي (ذراع كرسي) : $n=m$ et $\theta = 30^\circ$

الأنابيب النانوية الكربونية من النوع المتعرج : $m=0$ et $\theta = 0^\circ$

الأنابيب النانوية الكربونية اللولبية : $n \neq m$ et $\theta \in]0,30[^\circ$



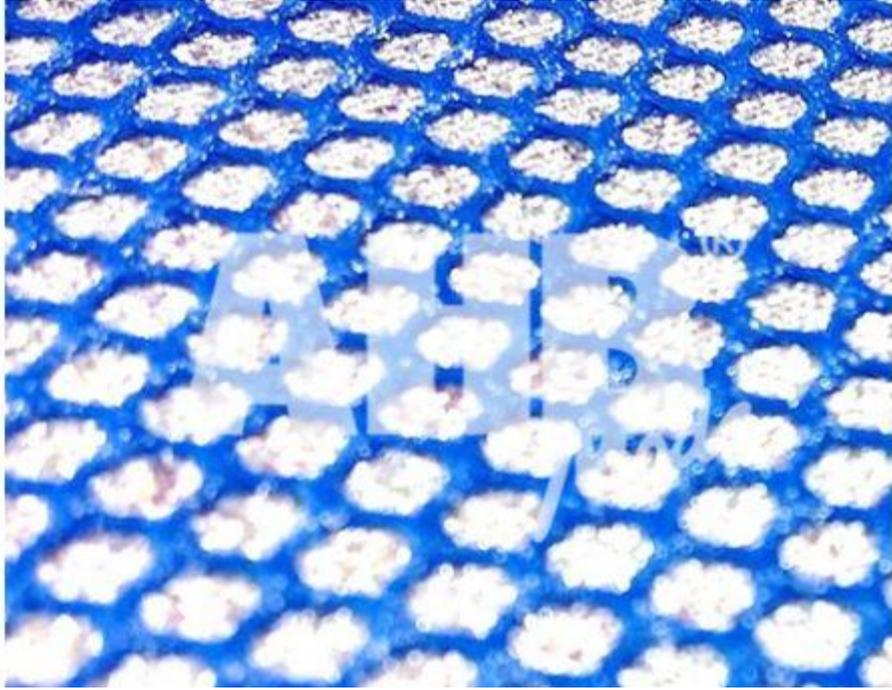
الشكل (8-1) : هياكل مختلفة تمثل كرسي بذراعين و متعرج لولبي [22] .

5.3.1. الغرافن: تم عزل الغرافن لأول مرة تجريبيا في عام 2004 في من الغرافيت

و اكتشافه أثار اهتماما بحثيا هائلا بشكل أساسي و تطبيقي علميا . لقد جذب الاهتمام

بسببه خصائص فيزيائية استثنائية ورائعة ، الغرافن عبارة عن بلورة ثنائية الأبعاد تتكون

من مستوى بسيط يتم توزيع ذرات الكربون في تهجين SP^2 بانتظام على الشبكة سداسية ، و هي طبقة ذات سمك ذري يمثل الوحدة الأساسية للجرافيت و يمكن لفها لتشكيل العديد من الأشكال الأخرى من الكربون مثل الفوليرين (OD) ، و الأنابيب النانوية (1D) أو المكذسة في الجرافيت [23].



الشكل(1-9) : جرافن مكون من كربون في هيئة بنية بلورية سداسية في طبقة واحدة .
[24] .

4.1. إنتاج الجرافن :

سميت هذه المادة بالجرافن لأنها مشتقة من الجرافيت حيث أن طبقات عديدة من الجرافن تكون الجرافيت . وتنتج بعدة طرق أهمها وأكثرها استعمالا هو تقشيرها من الجرافيت باستخدام شريط لاصق ، الطريقة الأخرى التي يجرى عليها أبحاث والتي تمكننا من تصنيعه على مستوى كبير هي طريقة الترسيب الكيميائي للبخار حيث أن هذه الطريقة

لديها عدة مشاكل منها تكون عدة طبقات من الغرافن وفقدانه لبعض خواصه، تعرض بلورة الغرافيت لأحماض مثل حمض الازوت وحمض الكبريت [25].

5.1.1 طرق تحضير الغرافن :

تختلف طرق إنتاجه حسب بساطة التركيب، والوقت والجهد للتحضير، لدينا أربع طرق مختلفة للتحضير :

1.5.1. طريقة هامر : تعتمد هذه الطريقة على الماء بشكل أساسي , عبر خلط بودرة

الغرافيت مع نترات الصوديوم وحمض الكبريت ثم نضيف ببطء برمنغنات البوتاسيوم

لتساعد على الوصول على درجة الحرارة المناسبة للتفاعل (والتي تكون اقل من 5

درجات مئوية) ، بعد ذلك تتم معالجة الخليط وتقليبه في جو جليدي قبل وضعه مرة

أخرى في حمام مائي بدرجة حرارة 40 درجة مئوية ، وبهذا يتم تحويل الغرافيت إلى

أكسيد الغرافن أولاً ثم الغرافن .

2.5.1. طريقة ترسيب الأبخرة الكيميائية : لدينا حالتان من الترسيب ، الترسيب

البخاري منخفض الضغط ، و الترسيب عالي الضغط ، و هذا يعتمد على جودة الغرافن

التي نريد إنتاجها، تعتمد هذه الطريقة على سيطرة درجة حرارة الوسط ، حيث يتم تبخير

المركبات الصلبة للمواد المتفاعلة ثم ترسيبها على حامل العينة المعدنية عن طريق

التكثيف .

3.5.1. طريقة التقشير الكيميائي: حقيقة يمكننا الحصول على الغرافن (كالصوديوم

أو البوتاسيوم ,أو يمكن استخدام الايونات كالنترات و الهالوجينات) ،بين طبقات الغرافن ، وتتم عملية التقشير عن طريق التفاعلات الأيونية القطبية الحاصلة ، دون أي تغيير في بنية الغرافن وهذا مايميز هذه الطريقة ، يمكن استخدام المذيبات أيضا مثل ثنائي ميثيل فورماميد .

4.5.1. طريقة التقشير الكهروكيميائي: أكثر الطرق فعالية ، إذ يتم التقشير بمساعدة

البلازما ، حيث يتم وصل القطب الموجب لقضيب الغرافيت (Anode) والقطب السالب للسلك (Cathode) إلى محلول الكتروليتي يحتوي على عدة شوارد ، كحمض الكبريت وكبريتات الصوديوم وبرمنغنات البوتاسيوم ، وتتم عملية التقشير في جهود (فولطيات) متدرجة للحصول على الغرافن [26].

6.1. خصائص الغرافن :

بالإضافة إلى ما يتمتع به الغرافن من خفة الوزن والسماكة ، والقوة ، فله خصائص عديدة مميزة :

حركة الإلكترونات فيه أسرع من حركة الإلكترونات في السيلكون ب 100 مرة .

الموصلية الكهربائية للغرافن أفضل من موصلية النحاس ب 13 ضعف تقريبا ، حيث يسمح الترتيب الذري الفريد لذرات الكربون بسهولة و سرعة انتقال الإلكترونات فيه دون تشتت ، وبالتالي يوفر طاقة عادة ما تضيع في الموصلات الأخرى .

يمتص 2,3% فقط من الضوء العاكس ، صفيحة الغرافن منيعة جدا ، كثيفة لدرجة لا يمكن حتى لأصغر ذرة غازية (كالهليوم) أن تخترقها ، الغرافن ثنائي الأبعاد ، يمتد في بعدين فقط ، الطول والعرض وكما قلنا هذه المادة عبارة عن ذرات متماسكة في صفوف ، ويتمتع بخاصية صلابة الكسر ، وهي أهم خاصية ميكانيكية للغرافن [27] .

7.1. سبب أهمية الغرافن :

تقريبا كل مادة نواجهها هي ثلاثية الأبعاد ، لقد بدأنا في فهم كيفية تغيير خصائص المادة عندما يتم تحويلها إلى مصفوفة ثنائية الأبعاد ، وتختلف خصائص الغرافن اختلافا كبيرا عن خصائص الغرافيت ، وهو الترتيب المقابل لثلاثي الأبعاد للكربون ، تساعدنا دراسة الغرافن على التنبؤ بكيفية تصرف المواد الأخرى في شكل ثنائي الأبعاد ويتمتع الغرافن بأفضل موصلية كهربائية لأي مادة ، حيث تتدفق الكهرباء بسرعة كبيرة من خلال خلية العسل ، معظم الموصلات التي نصادفها هي معادن ، ومع ذلك يعتمد الغرافن على الكربون ، وهو مادة غير فلزية وهذا يسمح بتدفق الكهرباء في ظل ظروف قد لا نريد فيها معدنا ، حيث انه يمكن استخدام الغرافن لصنع أجهزة صغيرة جدا ، يقوم الغرافن بتوصيل الكثير من الكهرباء في مساحة صغيرة جدا بحيث يمكن استخدامه لتطوير أجهزة الكمبيوتر والترانزستور فائقة السرعة مصغرة ، يجب أن تتطلب هذه الأجهزة قدرا ضئيلا من الطاقة لدعمها ، يفتح البحث في ميكانيكا الكم النسبية حيث يمكن استخدام الغرافن لاختبار تنبؤات الديناميكا الكهربائية الكمية ، حيث أن الغرافن ليس بمادة غريبة ، انه شيء يمكن لأي شخص صنعه [28] .

8.1. استخدامات الغرافن :

بالنظر إلى خصائص الغرافن القوية والمميزة ، يمكنك تخيل ما تفعله هذه المادة :

1.8.1. تحلية المياه المالحة :

حيث تسمح ثقب الغرافن الصغيرة جدا بمرور جزيئات الماء من خلالها ، ولكنها اصغر من أن تسمح لجزيئات الملح بالمرور .

2.8.1. صنع بطاريات فائقة الشحن (ذات شحن سريع) :

ابتكر العلماء بطاريات تحتوي على مكثفات مصنوعة من الغرافن ، والتي تستطيع استخدامها مرارا وتكرارا دون الخوف من انخفاض أدائها مع إمكانية شحنها بسرعة ، على عكس بطاريات هذه الأيام القابلة للشحن والتي تفقد شحنها بسرعة مع مرور الوقت .

3.8.1. إنتاج مادة الايروجيل الأسفنجية :

وهي اخف المواد في العالم، تنتج بدمج الكربون المخفف مع أكسيد الغرافن .

4.8.1. استخدام اللوحات الشمسية في الشتاء :

استخدم العلماء الغرافن لتطوير لوحات شمسية قادرة على توليد الكهرباء في ظل المطر، وذلك بتوليد الطاقة عن طريق تفاعل الغرافن مع أملاح مياه المطر، بالإضافة إلى صناعة المصابيح ذات كثافة عالية ، وإنتاج أوراق النانو القوية الغير قابلة للتمزيق وغيرها الكثير [29] .

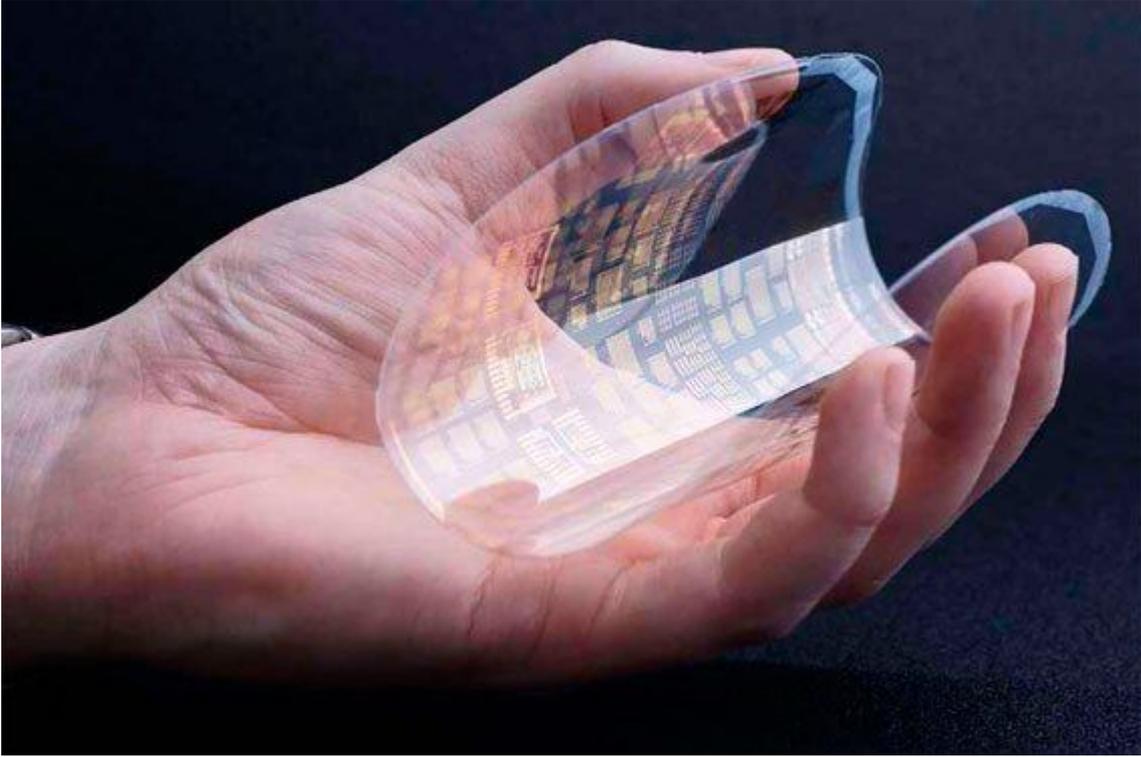
9.1. الاستخدامات المستقبلية لمادة الغرافن :

في السنوات القادمة سيتم طرح بعض هذه التطبيقات تجاريا، وسنبدأ في رؤية الغرافن في الهواتف والأجهزة القابلة للارتداء وغيرها من التقنيات . الغرافن عبارة عن طبقة رقيقة من ذرات الكربون النقي بداخل شريحة بتصميم يشبه قرص عسل النحل، وهي مادة غير مصنعة لكن يتم استخراجها من الغرافيت ، وهي عملية نجح العلماء في تطويرها في 2004 ، والنتيجة هي مادة ثنائية الأبعاد تحتوي على عدد من السمات غير العادية والمطلوبة ، بما في ذلك كونها رقيقة بشكل غير عادي وقوية ومرنة، وكان قد تم عزل

الغرافن لأول مرة في أوروبا ، واقتناعا لاتحاد الأوروبي بقدرته على أن يكون أساس المبادرة البحثية الأكبر للاتحاد ، ويهدف برنامج (Graphene flagship) الذي تبلغ تكلفته مليار يورو ، والذي استضاف جناح (Graphene pavilion) ، إلى إيجاد الطرق التي يمكن بها تقديم المادة في السوق ، وهذه هي بعض الاستخدامات المتوقعة لمادة الغرافن في المستقبل :

1.9.1. الهواتف الذكية : في السنوات القادمة من المتوقع أن تكون مادة الغرافن

مسؤولة عن بعض التحسينات المهمة في تكنولوجيا الهواتف ، فبالإضافة لكونها مرنة بما يكفي لوضعها في هواتف قابلة للانحناء على شكل هوائيات أو شاشات تعمل باللمس ، فإن لديها إمكانات هائلة لتحسين البطاريات ، ويمكن بناء الغرافن في البطاريات نفسها لتحسين تخزين الطاقة و الأداء على المدى الطويل ، ويمكننا أيضا تسريع نقل الطاقة بين مصدر طاقة وبطارية بشكل كبير ، وهو يعمل كنوع من الطرق للشحن السريع ، مما يسمح للطاقة بالمرور بسرعة كبيرة ، حتى يعتقد الباحثون أن بإمكان هذه المادة شحن الهاتف في غضون 7 ثواني ، وقد أوضح "كاري هيليت" رئيس قسم الابتكار في برنامج (Graphene flagship) أن الأمر سيستغرق اقل من سنتين لتصل هذه التكنولوجيا للهواتف ، وأضاف أنهم مندهشون عن مدى التطور الذي حققته هذه المادة في 14 عام ، وأنه يمكن استخدامها في العديد من المجالات بطرق مدهشة ، وكانت شركة (Ericsson) قد استخدمت الغرافن في عرضها التجريبي لشبكات 5G.



الشكل (1- 10) :صورة حقيقية لهاتف نقال [30].

2.9.1.الروبوتات: احد الإمكانيات البيولوجية الطبية المحتملة لمادة الغرافن هو استخدامها في تحسين الأطراف الاصطناعية ، فمن خلال دمج أجهزة الاستشعار العصبية المعتمدة على الغرافن في الجزء العلوي من الأطراف ، يمكن للشخص الشعور والاستجابة للتقلصات و الحركات الأخرى في العضلات ، مما قد يساعد على التحكم في حركة وقوة الطرف الصناعي الروبوتي ، بالإضافة إلى كون هذه المادة خفيفة فان الغرافن تستجيب بسرعة للضغط مما يضمن الحركة الطبيعية و السيطرة لمرتيديها ، و يمكن أن تساهم في جعل الأطراف الاصطناعية المستقبلية أكثر راحة واستجابة من أي وقت مضى.



الشكل (11-1): صورة حقيقية لروبوت [31].

3.9.1. تحديد المواد الغذائية:

بسبب قدرة الغرافن على امتصاص الضوء عند كل طول موجي تقريبا فانه يمكنها الكشف عن الأشعة فوق البنفسجية و المرئية و الأشعة تحت الحمراء باستخدام نفس مستشعر الصورة ، كما تستطيع كاميرا الغرافن الضوئية ذات الطيف الواسع رؤية التفاصيل غير مرئية للعين البشرية ، وقد تم عمل عرض توضيحي تظهر فيه قدرة المادة على التفريق بين ثلاثة أنواع مختلفة من الحليب وهما الأرز والحليب البقري وحليب اللوز ، والتي تبدو كلها متشابهة .

ما سيتيح إمكانية معرفة ما اذا كان الطعام آمن بالنسبة للأشخاص الذين يعانون من الحساسية من خلال كاميرا هاتفهم (الشكل 1-12) .



الشكل(1-12):صورة المواد الثلاثة [32] .

4.9.1. تقنيات الأجهزة القابلة للارتداء : مادة الغرافن مرنة جدا ، ما يجعلها مثالية لتقنيات الأجهزة القابلة للارتداء ، حيث قام الباحثون من معهد العلوم الضوئية في (Institute of photonic science) اسبانيا بدمج الغرافن في لاصقة بالأشعة البنفسجية ملحقة بالجلد مثل التقنيات التي قد تساعد في الإسعافات الأولية ، وكانت طبقة الغرافن الموجودة بالداخل حساسة للغاية و يمكنها قياس معدل ضربات القلب و أكسجين الدم على الجلد بالإضافة إلى نسبة التعرض للأشعة فوق البنفسجية ، مما يوفر نظام مصغر لمراقبة الصحة ، كما يمكن إضافة مادة الغرافن إلى الاحذية الذكية للحصول على مزايا تشمل الاستشعار والتبريد والقوة ، حيث يمكن لحذاء مزود بالغرافن موجود في جامعة كامبريدج مراقبة توزيع الضغط لعلاج القدم والأداء الرياضي (الشكل 1-13) .



الشكل (1-13): تقنيات الأجهزة القابلة للارتداء [33].

5.9.1. واجهات لمسية جديدة: طبقات الغرافن رقيقة جدا وهي تكاد تكون غير مرئية للعين البشرية ، وقد تم عرض استخدامها في بناء شاشة تبدو شفافة وتستخدم للسيطرة على سيارة لعبة عن طريق اللمس بجناح (Graphene pavilion) ، وهو احد الأمثلة الذي يوضح كيفية بناء الواجهات المستقبلية في مواد مختلفة مثل الزجاج أو القماش ، وقد أوضح مفوض الاتحاد الأوروبي " اندروس أنسيب" في مدونة بعد زيارته لجناح (Graphene pavilion) أن إمكانيات المادة تبدو بلا نهاية ، وانه قد فوجئ بمدى نجاحها ومدى توجيهها نحو المستهلك [34] (الشكل 1-14) .



الشكل(1-14):صورة تمثل الواجهات اللمسية الجديدة[35].

10.1. تأثير الغرافن على البيئة :

اكتشف علماء من جامعة كاليفورنيا في ريفرسايد أن مادة المستقبل الغرافن الذي قد يشكل ثورة في مجالات عديدة من التكنولوجيا ، ليس آمنة . ويتميز الغرافن بخصائص فريدة فهو أكثر متانة من الصلب ومرن وناقليته عالية للكهرباء ، في ما يعادل سمكه ذرة كربون واحدة فقط ، وقد أدت هذه الخصائص إلى اعتبار الغرافن أساسا للعديد من الاختراعات الاختراقية المستقبلية للبشرية .

ومع ذلك لم يدرس احد حتى الآونة الأخيرة آثار استخدام الغرافن على البيئة ، إلا أن الدراسة الأخيرة أظهرت انه عند تسرب الغرافن إلى المياه الجوفية ، يبدأ هيكله السداسي في الانهيار ، وسرعان ما تفقد الجزيئات استقرارها ، ولذلك لا يمكنها أن تسبب ضررا

كبيراً . ولكن التلوث بالغرافن في المياه السطحية ، حيث تكثر العناصر العضوية قد يكون أكثر خطورة . تعد الزوايا الحادة لجزيئات النانو للغرافن قادرة على قطع غشاء خلايا الكائنات الحية ، لذلك يدعو العلماء إلى دراسة خصائص الغرافن بشكل دقيق قبل بدء استخدامه في صناعة الإلكترونيات بنشاط . إلا إن هذا الاكتشاف لا يمنع البشرية من استخدام الغرافن على نطاق واسع ، حيث لا توجد مادة بديلة تتميز بنفس الخصائص [36].

**الفصل الثاني : الخصائص
الالكترونية للجرافن**

1.2. الخصائص الالكترونية للغرافن :

1.1.2. ذرة الكربون :

الكربون هو العنصر السادس في الجدول الدوري . له نظيران مستقران ، ^{12}C (98.9% من الكربون الطبيعي) مع عزم دوران نووي $I=0$ ، وبالتالي ، له عزم مغناطيسي نووي $\mu_n = 0$ و ^{13}C (1,1% من الكربون الطبيعي) مع $I=1/2$ و $\mu_n = 0,7024\mu_N$ حيث μ_N هو العزم المغناطيس النووي) [37]، مثل معظم العناصر الكيميائية ، تنشأ من التركيب النووي في النجوم [38] ، في الواقع هي تلعب دورا حاسما في التطور الكيميائي للكون .

حيث أنتجت نجوم الجيل الأول الطاقة فقط عن طريق تفاعل البروتون – البروتون المتسلسل ، والذي ينتج عنه تخليق جسيم α واحد (نواة الهيليوم ^4He) من أربعة بروتونات ، P . قد تؤدي تفاعلات الاندماج النووي إلى تكوين النظيرين ^5He و ^5Li ($\alpha + P$) تصادمات) او ^8Be ($\alpha + \alpha$) تصادمات) , ومع ذلك ، فإن كل هذه النوى غير مستقرة للغاية ، كما أدرك F Hoyle لأول مرة ، إن التطور الكيميائي لا يتوقف عند الهليوم فقط بسبب المصادفة المحظوظة . النواة تحتوي على مستوى قريب بدرجة كافية من طاقة ثلاث جسيمات α ، وبالتالي ، فإن تفاعل الانصهار الثلاثي $^{12}\text{C} \rightarrow 3\alpha$ ، لديه احتمال كبير بما فيه الكفاية .

يفتح هذا طريقا للتغلب على فجوة الكتلة (غياب النظائر المستقرة ذات الكتل 5 و 8)

ويوفر المتطلبات الأساسية للتخليق النووي حتى النواة الأكثر استقرارا ، Fe^{56} .

يلعب التفاعل $C3\alpha \rightarrow^{12}$ دورا أساسيا في التفاعلات النووية في نجوم التسلسل

الرئيسي (أثقل من الشمس).

تحتوي ذرة الكربون على ستة إلكترونات ، اثنان منها يشكلان غلاف مغلق $1S^2$

(غلاف الهيليوم) وأربع حالات $2P$ و $2S$. التكوين الذري للحالة الأرضية هو

$2S^2$ و $2P^2$, مع السبين الكلي $S=1$, إجمالي العزم المداري L العزم الزاوي $J=0$ (تعدد

الحالة الأرضية 3P_0) . الحالة المثارة الأولى ، مع $J=1$ ، 3P_1 متعدد ، له طاقة

$16 \text{ سم}^{-1} \approx 2$ ميغا إلكترون فولط [39] ، الذي يعطي تقديرا لقوة اقتران الدوران في

الذرة . اقل حالة طاقة مع التكوين $2p^1$ ، $2P^3$ ، لديها طاقة $33.735.2 \text{ سم}^{-1} \approx 4.2$

إلكترون فولط [40] ، لذا فهذه هي طاقة الترويج لإثارة إلكترون $2S$ إلى الحالة $2P$.

للهلة الأولى ، يكون دائما ثنائي التكافؤ ، نظرا لوجود الكترونيين $2P$ بينما

الإلكترونات $2S$ خاملة تماما كيميائيا . هذا الاستنتاج خاطئ . عادة ، يكون الكربون

رباعي التكافؤ ، بسبب تكوين حالات الإلكترون المهجنة SP ، وفقا لمفهوم "الرنين"

الذي طوره $L.Pauling$ [41] عندما تشكل الذرات جزيئات أو مواد صلبة ، تقل الطاقة

الكلية بسبب التداخل من وظائف موجة الإلكترون في مواقع مختلفة وتشكيل المدارات

الجزئية (في الجزيئات) أو نطاقات الطاقة (في المواد الصلبة) ; يمكن أن يكون اكتساب الطاقة كافيا لتوفير الطاقة اللازمة لتعزيزها 2S إلكترون إلى 2P في ذرة الكربون .

من أجل زيادة الطاقة المكتسبة أثناء تكوين الرابطة التساهمية ، الذرات المجاورة تقع في مثل هذه الاتجاهات من الذرات المركزية التي تأخذها وظائف الموجة الذرية قيما قصوى . كلما كانت هذه القيم اكبر ، كانت الرابطة أقوى . هناك أربع معادلات أساسية تطابق للتوفيق الكروية .

$$Y_{0,0}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{1,0}(\vartheta, \varphi) = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta \quad (1 - 2)$$

$$Y_{1,\pm 1}(\vartheta, \varphi) = \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta \exp(\mp i\varphi)$$

أين ϑ و φ زوايا قطبية . بدلا من اعتبار الدوال $Y_{1,m}(\vartheta, \varphi)$ هي معادلة الأساس ، يكون من الأنسب اختيار خطي مهيا للمركبات من النموذج :

$$\frac{i}{\sqrt{2}} [Y_{1,1}(\vartheta, \varphi) - Y_{1,-1}(\vartheta, \varphi)] = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \cos \varphi$$

$$\frac{i}{\sqrt{2}} [Y_{1,1}(\vartheta, \varphi) + Y_{1,-1}(\vartheta, \varphi)] = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \cos \varphi \quad (2-2)$$

$$iY_{1,0}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$$

التي يتم تحويلها بالتناوب مثل الإحداثيات الديكارتية Z، Y، X ، على التوالي . المكونات الشعاعية للوظائف S و P هي أبسطها حيث من المفترض أن يكون التقريب متساويا من

حيث الحجم (وهو بالطبع افتراض جد قوي) و يمكن حذفها مع العامل الثابت $\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ وهو

ليس مهما هنا . ثم الاعتماد الزاوي على المعادلات الاربعة التي سنقدمها $Y_{1,m}(\vartheta, \varphi)$

ويمكن تمثيلها كالتالي :

$$\begin{aligned} |x\rangle &= 1 & |x\rangle &= \sqrt{3} \sin \vartheta \cos \varphi \\ |Z\rangle &= \sqrt{3} \cos \varphi & & (3-2) \end{aligned}$$

$$|Y\rangle = \sqrt{3} \sin \vartheta \sin \varphi$$

نسعى الآن عن تركيبات خطية للمعادلة (3-2) التي من شأنها أن تضمن الحد الأقصى

تتداخل مع المعادلات الذرات المجاورة . يتطلب هذا أن تكون $\alpha = \max \varphi$ قيمة

قصوى . مع التطبيق الذي اخترناه للحالة S هو $\alpha = 1$ و $a = \sqrt{3}$ للحالة P هو

$|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$. ثم نمثل المعادلة $|\psi\rangle$ مثل :

$$|\psi\rangle = a + b_2|y\rangle + b_3|z\rangle (4-2)$$

حيث a و b_i شروط حقيقية تفي بشرط التطبيق

$$a^2 + b_1^2 + b_2^2 + b_3^2 = 1 \quad (5-2)$$

المعادلة $|\psi\rangle$ ، اذن ، يتم تطبيقها بنفس طريقة (1-2) . هذا يتبع من التعامد المتبادل

بينهما

$$\int do |(\vartheta, \varphi)|^2 \equiv \langle \psi | \psi \rangle = a^2 \langle s | s \rangle + b_1^2 \langle x | x \rangle + b_2^2 \langle y | y \rangle + b_3^2 \langle z | z \rangle = 4\pi$$

مع do كونه عنصرا للزاوية الصلبة . في الوقت الحالي ، يعتبر توجيه المحاور في

حالتنا تعسفيا .

لنفترض انه في إحدى معادلات ψ التي تكون α لها قيمة قصوى ، يتم الوصول الى هذه القيمة القصوى في الاتجاه على طول قطري المكعب $(1,1,1)$ ، مع وجود ذرة الكربون في مركزها ومع محاور الاحداثيات الموازية لحوافها (الشكل 1-2). ثم $b_3 = b_2 = b_1 = b$. يتم إعطاء الاتجاه $(1,1,1)$ بواسطة الزوايا ϑ و φ :

$$\sin \vartheta = \sqrt{\frac{2}{3}} \quad , \quad \cos \vartheta = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad , \quad \sin \varphi = \cos \varphi = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

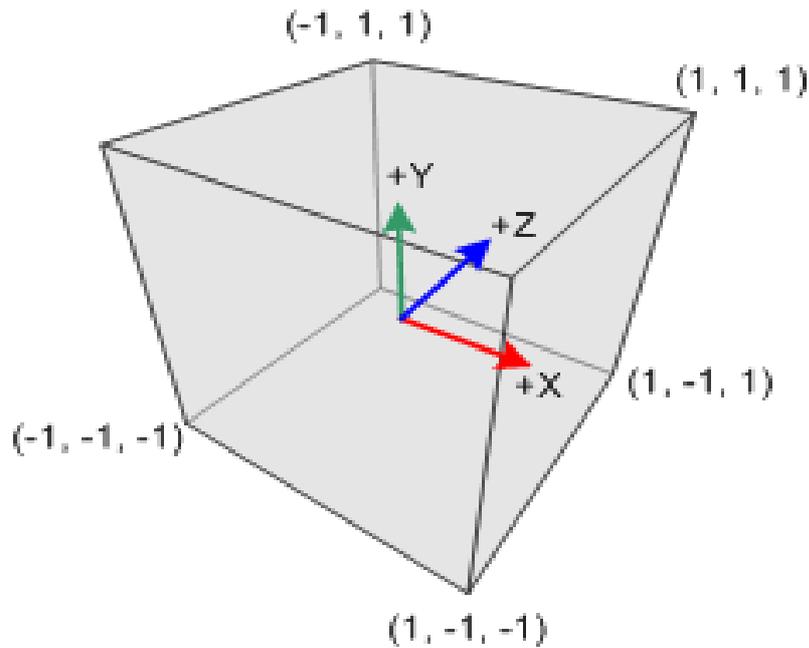
لهذا السبب

$$|x\rangle = |y\rangle = |z\rangle = 1$$

بالإضافة إلى ذلك :

(6-2)

$$a = a + 3b = a = \sqrt{3(1 - a^2)}$$



الشكل (1-2): اتجاهات sp^3 الروابط الكيميائية لذرة الكربون [42].

حيث استخدمنا الشروط (3.2). تم الوصول إلى الحد الأقصى α كدالة ل a حيث $a = \frac{1}{2}$

وتساوي 2 . الكمية b في هذه الحالة تساوي $\frac{1}{2}$. وهكذا المدار الاول مع القيم القصوى

على طول محاور الاحداثيات التي لدينا :

$$|1\rangle = \frac{1}{2}(|s\rangle + |x\rangle + |y\rangle) \quad (7-2)$$

يمكن أن تظهر بسهولة أن المعادلات

$$|2\rangle = \frac{1}{2}(|s\rangle + |x\rangle - |y\rangle - |z\rangle)$$

$$|3\rangle = \frac{1}{2}(|s\rangle - |x\rangle + |y\rangle - |z\rangle) \quad (8-2)$$

$$|4\rangle = \frac{1}{2}(|s\rangle - |x\rangle + |y\rangle + |z\rangle)$$

تتوافق مع نفس القيمة $\alpha = 2$. المعادلات $|i\rangle$, $(i=1, 2, 3, 4)$ متعامدة بشكل متبادل .

يأخذون قيمهم القصوى على طول المحاور $(1,1,1), (1,1,\bar{1}), (\bar{1},1,1), (\bar{1},1,\bar{1}), (1,\bar{1},\bar{1})$, اي

على طول محاور رباعي السطوح ، وبالتالي ، فان اقصى مكاسب في طاقة الترابط

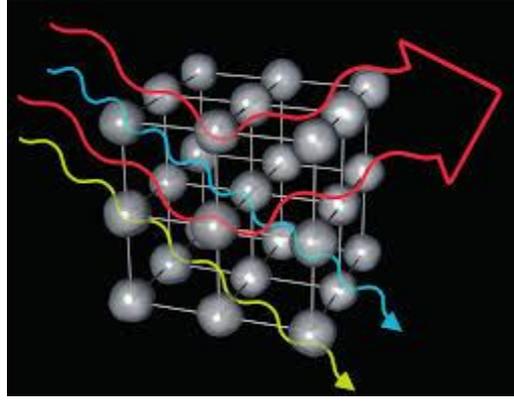
الكيميائي يتوافق مع البيئة الرباعية السطوح لذرة الكربون . على الرغم من كونه نوعيا

، إلا أن المعالجة التي أجريناها هنا تشرح طبيعة التركيب البلوري لعناصر المجموعة

الرابعة للجدول الدوري (شعرية من نوع الماس ، الشكل (2.2))بالإضافة إلى شكل

جزئ الميثان ، فهو قريب جدا من كونه رباعي السطوح .

تتوافق الدوال الموجية (7-2) و (8-2) مع ما يسمى بالحالة sp^3 من ذرة الكربون ، والتي تتكافئ فيها جميع الروابط الكيميائية . خيار اخر هو ان ثلاثة الكترونات sp تشكل روابط تساهمية هجينة ، في حين أن إلكتروننا واحدا p له مسار خاص ، حيث يتم توزيعه في جميع أنحاء الجزيء بأكمله .



الشكل (2-2): هيكل الماس [43] .

الكريستال (الغرافيت أو الغرافن). إذا كرر المرء الاعتبار السابق على أساس اصغر ، بما في ذلك المعادلات $|s\rangle$ ، $|x\rangle$ أو $|y\rangle$. المعادلات التي تناظر الحد الأقصى للتداخل [44].

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|s\rangle + \sqrt{2}|x\rangle),$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |s\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}} |x\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |y\rangle,$$

$$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |s\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}} |x\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |y\rangle. \quad (9-2)$$

المدارات المقابلة لها حدود قصوى في المستوى xy مفصولا بزوايا 120 درجة .

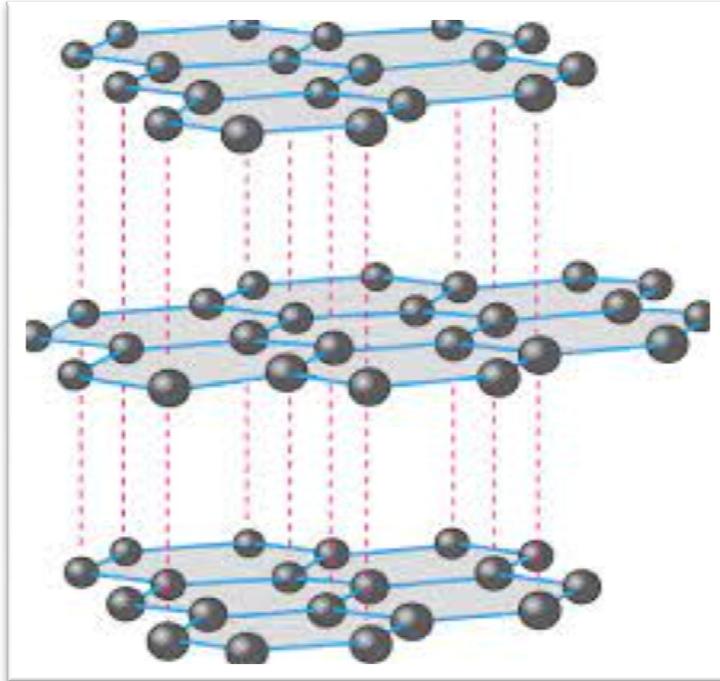
هذه تسمى مدارات σ . يشكل الالكترون الاخير ذو المدار p العمودي على (الدالة $|z\rangle$) تشكل رابطة π . لذلك تتميز هذه الحالة (sp^2) بتنسيق ثلاثي لذرات الكربون ، على عكس التنسيق الرباعي لحالة sp^3 . هذه هي حالة الغرافيت (الشكل 2-3).

2-2- الدوال π في الغرافن :

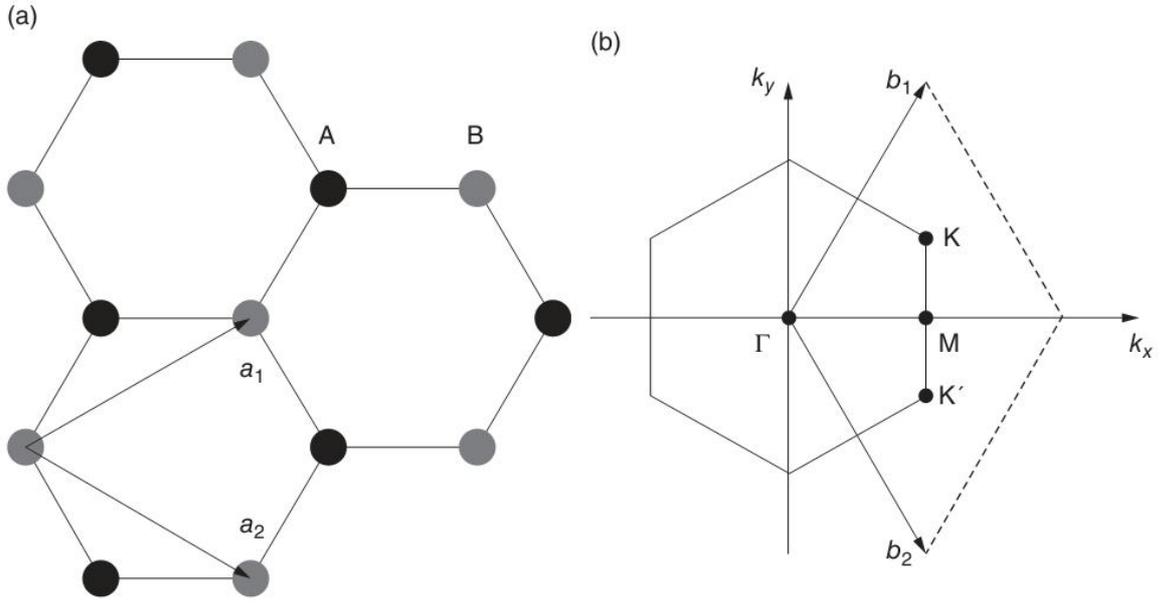
يحتوي الغرافن على شبكة بلورية قرص العسل كما هو موضح في الشكل 2-4 (a) . إن خلية برافي مثلثية ، بها أشعة أساسية .

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}) \quad (10-2)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3})$$



الشكل (3-2): هيكل الغرافيت [45].



الشكل (4-2) :

(a): شبكة قرص العسل : تظهر الشبكتان الفرعيتان A و B باللونين الأسود و الرمادي

(b): أشعة أساسية متبادلة وبعض النقاط الخاصة في منطقة بريلوان [46].

حيث $a \approx 1.42A^\circ$ هي اقرب مسافة مجاورة . انه يتوافق مع ما يسمى برابطة الكربون-

الكربون المترافقة (كما هو الحال فالبنزين) وسيطة بين رابطة واحدة ورابطة مزدوجة ،

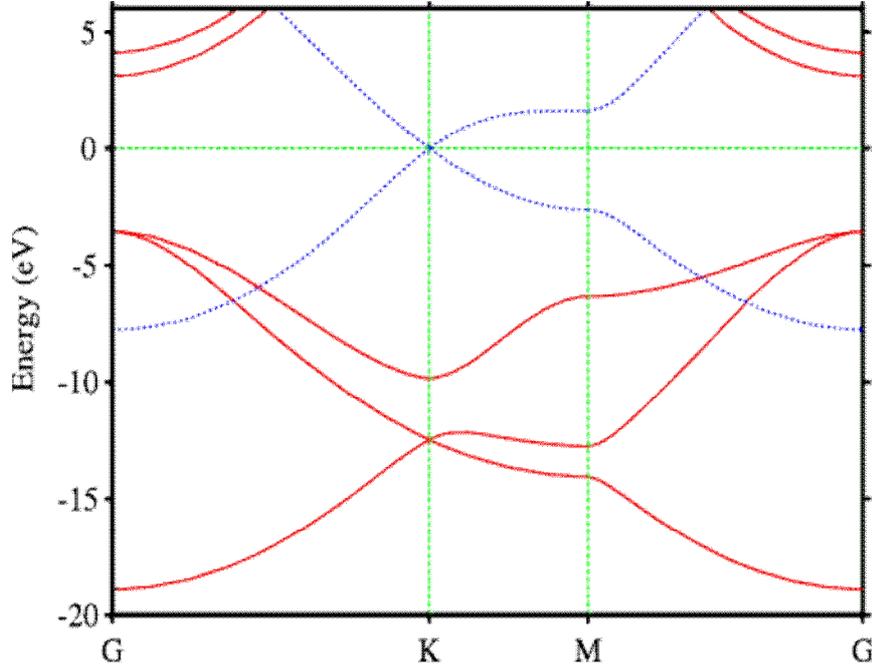
بطول $r_1 \approx 1.54A^\circ$ و $r_2 \approx 1.31A^\circ$ على التوالي .

تحتوي شبكة قرص العسل على ذرتين لكل خلية أولية . ينتمون إلى شبكتين فرعيتين ،

A و B ، كل ذرة من الشبكة الفرعية A محاطة بثلاث ذرات من الشبكة الفرعية B

والعكس صحيح (شعرية ثنائية الأجزاء) . نواقل الجار الأقرب

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_3 = a(-1, 0) \quad (11-2)$$



الشكل (5-2): هيكل الفرقة من الغرافن [47].

الشبكة المتبادلة هي ايضا مثلثة ، مع أشعة أساسية:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3})$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}) \quad (12-2)$$

يتم عرض منطقة بريلوان في الشكل 4-2 (b). تظهر نقاط التناظر العالية الخاصة ،

هناك K, M, K' مع متجهات الموجة

$$\vec{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right),$$

$$\vec{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \quad (13-2)$$

$$\vec{M} = \left(\frac{2\pi}{3a}, 0 \right)$$

تمت مناقشة الهياكل الالكترونية للغرافن و الغرافيت بالتفصيل في Bassani و

[48] Parravicini. في الشكل (5-2) نعرض نتيجة حسابية حديثة للغرافن . تشكل

الحالات المهجنة sp^2 (حالات σ) نطاقات مشغولة وفارغة بفجوة كبيرة ، بينما تشكل

حالات $P_z(\pi)$ نطاقا واحدا مع نقطة عبور ذاتي مخروطي في k (نفس النقطة ، بالتناظر

، موجودة ايضا في K' .

$$\hat{H}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} 0 & tS(\vec{k}) \\ tS^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (14-2)$$

حيث \vec{k} هو شعاع الموجة و :

$$S(\vec{k}) = \sum_{\delta} e^{k\delta} = 2 \exp\left(\frac{ik_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a \sqrt{3}}{2}\right) + \exp(-ik_x a) \quad (15-2)$$

الطاقة هي :

$$E(\vec{k}) = \pm t |S(\vec{k})| = \pm t \sqrt{3 + f(\vec{k})} \quad (16-2)$$

حيث :

$$f(\vec{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right) \quad (17-2)$$

يمكننا أن نرى على الفور أن $S(\vec{k}) = S(\vec{k}') = 0$ مما يعني عبور النطاق عند

توسيع هاميلتوني بالقرب من هذه النقاط يمكننا ان نجد :

$$\hat{H}_{K'}(\vec{q}) \approx \frac{3at}{2} \begin{pmatrix} 0 & a(q_x + iq_y) \\ a^*(q_x - iq_y) & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{H}_k(\vec{q}) \approx \frac{3at}{2} \begin{pmatrix} 0 & a(q_x - iq_y) \\ a^*(q_x + iq_y) & 0 \end{pmatrix} \quad (18-2)$$

حيث $\alpha = e^{\frac{5i\pi}{6}}$ مع $\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}'$ و $\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}$ على التوالي. يمكن استبعاد المرحلة $\frac{5\pi}{6}$ من خلال التحويل الاحادي لوظائف الاساس. وهكذا فان هاميلتونيون المؤثرين بالقرب من النقطتين K' و K ياخذون الشكل:

$$\hat{H}_{k,k'}(\vec{q}) = \hbar\nu \begin{pmatrix} 0 & q_x \pm iq_y \\ q_x \pm iq_y & 0 \end{pmatrix} \quad (19-2)$$

حيث :

$$\nu = \frac{3a|t|}{2\hbar} \quad (20-2)$$

هي سرعة الإلكترون عند النقاط المخروطية . يمكن استبعاد العلامة السلبية المحتملة ل t من خلال ازاحة طور اضافي بواسطة π .

عند الأخذ في الاعتبار التنقل التالي للجوار الأقرب t' نجد بدلا من المعادلة (16.2) :

$$E(\vec{k}) = \pm t|S(\vec{k})| + tf(\vec{k}) = \pm t\sqrt{3 + f(\vec{k})} + tf(\vec{k}) \quad (21-2)$$

يكسر المصطلح الثاني تناظر ثقب الإلكترون ، ويحول النقطة المخروطية من $E = 0$ الى $E = -3t$ ، لكنه لا يغير سلوك هاميلتوني بالقرب من النقاط المخروطية . في الواقع ، هذا السلوك محمي بالتناظر كما سنرى في القسم التالي .

نلاحظ انه ، على عكس العلامة t لا يمكن تغيير علامة t' و t بوصف التنقل داخل نفس الشبكة الفرعية عن طريق التحويل الأحادي .

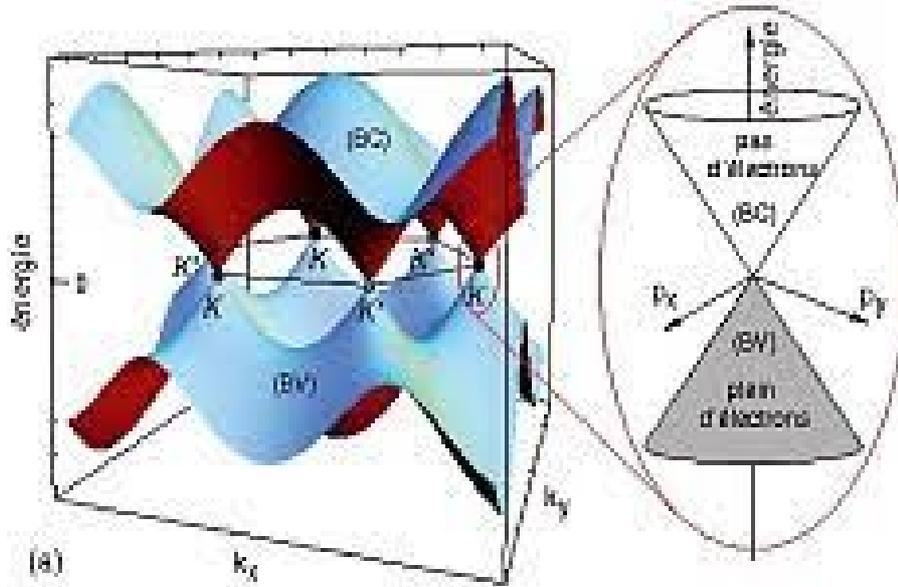
تختلف النقطتان k و k' - عن طريق متجه الشبكة العكسي $\vec{b} = \vec{b}_1 - \vec{b}_2$, وبالتالي فان النقطة k' تعادل $-k$. من الملائم احيانا استخدام خلية واحدة اكبر في الفضاء المتبادل ، بستة نقاط مخروطية . يظهر الطيف (16.2) في الشكل (6.2) .

يمكن العثور على معلمات نموذج الربط المحكم الفعال عن طريق ملائمة نتائج حسابات الهيكل الالكتروني للمبادئ الأولى . و Reich و al [49] . المعلمات الثلاثة الأولى للقفز هي $t' = -0.073\text{eV}$, $t = -2.97\text{eV}$, و $t'' = -0.33\text{eV}$ التقديرات التجريبية [50] تنتج $t' \approx -0,3\text{eV} \pm 15\%$.

يعني صغر t' مقارنة ل t ان تناظر ثقب الالكترون للطيف دقيق تماما ليس فقط بالقرب من النقاط المخروطية ولكن ايضا في جميع انحاء منطقة بريلوان باكملها .

توجد نقاط سرج لطيف طاقة الالكترون عند M (الشكل 2-5) ، مع تفرد Van Hove في كثافة الالكترون للحالات ، $\delta N(E) \propto -\ln|E - E_M|$ [51] مواقف هذه التفردات مع المعلمات من Reich و al [52] . هي :

$$E_{M-} = t + t' - 3t'' \approx -2.05\text{eV}$$



$$E_{M+} = -t + t' + 3t'' \approx 1.91eV$$

الشكل (6-2) طيف طاقة الإلكترون للغرافن في الجوار الأقرب [53].

الهاملتوني (14-2) في التمثيل (15-2) له تناظر مثلث واضح فيما يتعلق بالدوران عند 120 درجة . في الوقت نفسه، فهي ليست دورية في الفضاء المتبادل، مما قد يكون غير مريح لبعض الحسابات (بالطبع قيمتها الذاتية (16-2) دورية). يمكن إصلاح ذلك عن طريق تغيير الأساس، على سبيل المثال، بضرب المكون A لوظيفة الموجة بمعامل $\exp(-i\vec{k}\vec{\delta}_3)$ ثم بدلا من (15-2) سيكون لدينا التعبير :

$$S(\vec{k}) = 1 + e^{i\vec{k}(\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_3)} + e^{i\vec{k}(\vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_3)} \quad (22-2)$$

الذي من الواضح انه دوري لكن تناسقه الثلاثي الزوايا مخفي الآن ، استخدام التمثيل تمليه الملاءمة لمشكلة معينة .

3-2- فرميونات ديراك عديمة الكتلة في الغرافن :

يحتوي الغرافن غير المنضب على طاقة فيرمي تتزامن مع الطاقة عند النقاط المخروطية ، مع شريط تكافؤ ممتلئ تماما ، وشريط توصيل فارغ ، ولا توجد فجوة نطاق بينهما . وهذا يعني انه من وجهة نظر نظرية عامة ، فان الغرافن هو مثال لأشباه الموصلات الخالية من الفجوات[54].

من المعروف أن البلورات ثلاثية الأبعاد ، مثل $HgTe$ و $\alpha - Sn$ (القصدير الرمادي) هي اشباه موصلات بلا فجوات . ما يجعل الغرافن فريدا ليس الحالة الخالية من الفجوات نفسها ، بل الطبيعة الخاصة جدا والمتراوية لحالات الإلكترون . فضلا عن الدرجة العالية من تناظر ثقب الإلكترون .

لأي منشطات واقعية ، تكون طاقة فرمي قريبة من الطاقة عند النقطة المخروطية $|E_F| \ll |t|$. لبناء نموذج فعال يصف الإلكترون وحالات الثقب في هذا النظام يحتاج المرء الى توسيع نطاق هاميلتوني الفعال بالقرب من إحدى النقاط الخاصة K و K' ثم

$$q_x \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial x}, q_y \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial y}$$

الذي يتوافق مع التقريب الشامل الفعال ، أو $\vec{k} \cdot \vec{p}$ نظرية اضطراب [55] من المعادلة (2.19) :

$$\hat{H}_k = -i\hbar v \vec{\sigma} \nabla \quad (23-2)$$

$$\hat{H}_{k'} = \hat{H}_K^T \quad (24-2)$$

حيث :

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (25-2)$$

هي مصفوفات بولي (فقط المركبات - x و - y تدخل المعادلة (22.2)). وتشير T الى مصفوفة منقولة. يتكون الهاميلتونيان الكامل منخفض الطاقة من مصفوفات 4×4 مع

مراعاة كل من شبكتين فرعيتين ونقطتين مخروطيتين (من حيث فيزياء اشباه
الموصلات ، وادين) في الأساس :

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_{KA} \\ \psi_{KB} \\ \psi_{K'A} \\ \psi_{K'B} \end{pmatrix} \quad (26-2)$$

حيث ψ_{KA} تعني مكونا من دالة موجة الالكترون المقابلة للوادي K والشريحة الفرعية A
فان الهاميلتونيان عبارة عن مصفوفة 2×2 فائقة الكتلة .

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_K & 0 \\ 0 & \hat{H}_{K'} \end{pmatrix} \quad (27-2)$$

في بعض الأحيان يكون من الأنسب اختيار الأساس مثل :

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_{KA} \\ \psi_{KB} \\ \psi_{K'A} \\ -\psi_{K'B} \end{pmatrix} \quad (28-2)$$

[56]

ثم الهاميلتوني من المعادلة (26-2) يأخذ شكل التناظر :

$$\hat{H} = -i\hbar v \tau_0 \otimes \vec{\sigma} \nabla \quad (29-2)$$

حيث τ_0 ، هي مصفوفة الوحدة في مؤشرات الوادي (سنستخدم ترميزا مختلفا لنفس
مصفوفات باولي التي تعمل على مؤشرات مختلفة ، أي $\vec{\sigma}$ في مساحة الشبكة الفرعية
و $\vec{\tau}$ في مساحة الوادي) .

في حالة الجرافن المثالي ، يتم فصل الوديان . إذا أضفنا بعض عدم التجانس (المجالات
الكهربائية والمغناطيسية الخارجية ، والاضطراب ، وما إلى ذلك) التي تكون سلسلة

على المستوى الذري ، تظل الوديان مستقلة ، نظرا لان مكون فورييه للجهد الخارجي مع متجه \vec{b} صغير جدا ، والتشتت الفاصل الزمني هو من غير المرجح. سوف نتعامل بشكل أساسي مع هذه القضية ، ومع ذلك ، يجب على المرء أن يضع في اعتباره أن أي عدم تجانس حاد (مقياس ذري) ، على سبيل المثال ، الحدود أو الوظائف الشاغرة ، سوف يخلط الحالات من الوديان المختلفة .

إن التشابه الشكلي بين الجسيمات اللاصقة الفائقة (مع طاقة أكبر بكثير من طاقة باقي الطاقة mc^2 ، بحيث يمكن اعتبار الجسيمات عديمة الكتلة) والالكترونات في الغرافن يجعل الغرافن ملعبا لدراسة التأثيرات النسبية الكمية المختلفة " CERN على مكتب المرء ."

درجة الحرية الداخلية ، والتي هي مجرد دوران لفرميونات ديراك الحقيقية ، هي مؤشر الشبكة الفرعية في حالة الغرافن . تتكون "سبينورز" ديراك هنا من المكونات التي تصف توزيع الالكترونات في الشرائح الفرعية A و B. وسوف نطلق على هذا الرقم الكومومي Pseudospin لذا فان "up" تعني الشبكة الفرعية A و "Down" تعني الشبكة الفرعية B ، على غرار Pseudospin هناك درجتان داخليتان أخريان من الحرية ، وهما تسمية الوادي (تسمى أحيانا Isospin) والدوران الحقيقي . إذن ، أكثر الالكترونات الهاميلتونية منخفضة الطاقة عموما في الغرافن هي مصفوفة 8×8 .

يؤدي اقتران الدوران والمدار إلى مزيج من الدوران الكاذب واللف الحقيقي وفتحة الفجوة [57] ومع ذلك ، من المفترض أن تكون قيمة الفجوة صغيرة جدا ، من اجل $10^{-2}k$ للغرافين الاصلي [58]. السبب ليس فقط خفة ذرات الكربون ولكن أيضا اتجاه اللحظات المدارية ل p_z . تنص عموديا على مستوى الغرافين . في السيسيليسين والجيرمانين ، أي نظائر Ge و Si ، يكون الهيكل ملتويا ، مما يؤدي الى تعزيز كبير لاقتران مدار الدوران [59] . يمكن أن تعزز العيوب بشكل كبير اقتران المدار الدوراني [60] ، والتأثيرات المقابلة لها صلة ، على سبيل المثال من اجل استرخاء الدوران في

الغرافن [61]، ولكن تأثير الدوران اقتران المدار على الهيكل الالكتروني لا يكاد يذكر .
من الآن فصاعدا سنهمل هذه التأثيرات حتى نهاية الكتاب .

بالنسبة لحالة فرميونات ديراك "الحقيقية" في الفضاء ثلاثي الأبعاد ، فان هاميلتونيان
عبارة عن مصفوفة 4×4 ، بسبب اسقاطين من السبينات وقيمتين لدرجة شحنة جسيم
الحرية مقابل الجسيم المضاد . بالنسبة للحالة ثنائية الأبعاد ، فان الاخير ليس مستقلا عن
السابق . الالكترونات والثقوب هي مجرد مجموعات خطية من الحالات من الشرائح
الفرعية A و B . المصفوفة 2×2 $2\nu\hbar\vec{\sigma}\vec{k}$ (نتيجة عمل هاميلتوني (22.2)) على موجة
مستوية مع متجه \vec{k} الموجة مائلة بالتحويل الاحادي :

$$\hat{U}_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + i\vec{m}_{\vec{k}}\vec{\sigma}) \quad (30-2)$$

حيث $\vec{m}_{\vec{k}} = \sin \phi_{\vec{k}i} - \cos \phi_{\vec{k}i}$ هي الزاوية القطبية للشعاع :

الوظيفة الذاتية :

$$\psi_{e,h}^{(k)}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \exp(-\frac{i\phi_{\vec{k}}}{2}) \\ \pm \exp(\frac{i\phi_{\vec{k}}}{2}) \end{pmatrix} \quad (31-2)$$

تتوافق مع حالات الإلكترون (e) والفتحة (h) مع طاقات

$$E_{e,h} = \pm \hbar v k \quad (32-2)$$

بالنسبة للوادي k' الحالات المقابلة (في الاساس) هي :

$$\psi_{e,h}^{(k')}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{i\phi_{\vec{k}}}{2}\right) \\ \pm \exp\left(-\frac{i\phi_{\vec{k}}}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (33-2)$$

بالطبع ، هذا الاختيار للوظائف الموجية ليس فريدا ، يمكن مضاعفته بعامل طور عشوائي ، فقط نسبة مكونات سبينور المقابلة للشرائح الفرعية A و B لها معنى فيزيائي . بالنسبة لحالات الالكترون (الثقب) ، بحكم التعريف :

$$\frac{(\vec{k}\vec{\sigma})}{K} \psi_{e,h} = \pm \psi_{e,h} \quad (34-2)$$

هذا يعني أن الالكترونات (الثقوب) لها اتجاه Pseudospin محدد، أي مواز لاتجاه الحركة . وبالتالي فان هذه الحالات هي حلزونية (حلزونية) ، كما ينبغي أن يكون الحال بالنسبة لفرميونات ديراك عديمة الكتلة [62]. هذا ذو أهمية حاسمة للتأثيرات " النسبية " ، مثل نفق كلاين .

ينتج نموذج ديراك للالكترونات في الغرافن من الامتداد الأقل رتبة لرابطة هاميلتونيان شديدة الترابط (2-14) بالقرب من النقاط المخروطية . إذا أخذنا في عين الاعتبار المصطلح التالي التربيعي (في الأساس 27.2) ، بدلا من (2-28):

$$\hat{H} = \hbar v \tau_0 \otimes \vec{\sigma} \vec{k} + \mu \tau_z \otimes [2\sigma_y k_x k_y - \sigma_x (k_x^2 - k_y^2)] \quad (35-2)$$

حيث $\mu = \frac{3a^2 t}{8}$ ، المصطلح الاضافي في المعادلة (2. 34) . يتوافق مع التواء ثلاثي

الزوايا [51]. يعطي قطري هاميلتوني ($E_{e,h}(\vec{k}) = \pm \varepsilon(\vec{k})$) الطيف اين :

$$\varepsilon^2(\vec{k}) = \hbar^2 v^2 k^2 \pm 2\hbar v \mu k^3 \cos 3\phi_{\vec{k}} + \mu^2 k^4 \quad (36-2)$$

بعلامات \pm المناظرة للوديان k و k' . لميعد قانون التشتت خواص الخواص ولكن له ثلاثة اضعاف (مثلث) تناظر . الاهم من ذلك ،

$$\varepsilon(\vec{k}) \neq \varepsilon(-\vec{k})$$

مما يعني أن الالتواء المثلثي يدمر تناظر انعكاس الوقت الفعال لوادي معين (الخاصية $E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$) يتبع من تناظر الانعكاس الزمني [63] بالطبع ، بالنسبة إلى طيف الإلكترون ككل ، مع الأخذ في الاعتبار الوادين ، فإن التناظر يحمل :

$$\varepsilon(\vec{k} + \vec{K}) = \varepsilon(-\vec{k} - \vec{K}) \quad (37-2)$$

في هذا القسم نوضح ، [64] إن الحالة الخالية من الفجوات مع النقطة المخروطية محمية بالتناظر . لإثبات بسيط جدا ويستند إلى اعتبار عمليتي تناظر : انعكاس الوقت T وانعكاس I سوف نستخدم الأساس (25.2) وتمثيل منطقة بريلوان الممتدة في الشكل (6.2) بافتراض $\vec{K}' = -\vec{K}$. يغير انعكاس الوقت علامة متجه الموجة ، او الوادي

$$T\psi_{K(A,B)} = \psi_{*K(A,B)} = \psi_{K'(A,B)} \quad (38-2)$$

بينما يقوم الانعكاس أيضا بتبادل الشرائح الفرعية :

$$I\psi_{KA} = \psi_{K'B} , I\psi_{KB} = \psi_{K'A} \quad (39-2)$$

يفرض الثبات في ظل هذه التماثلات الشروط التالية ل $\hat{H}_{K'}$ و \hat{H}_K :

$$T: H_K = H_{K'}^* = H_K \quad (40-2)$$

$$I: H_K = \sigma_x H_{K'} \sigma_x = H_K \quad (41-2)$$

في الواقع :

$$\sigma_x \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \sigma_x = \begin{pmatrix} a_{22} & a_{21} \\ a_{12} & a_{11} \end{pmatrix} \quad (42-2)$$

لذا فان العملية في (40.2) تقوم بتبادل الشرائح الفرعية A و B . الشروط (39.2) و (40.2) تؤسس العلاقات بين الهاميلتونيان للوديان المختلفة . إذا استخدمنا كلا تحويلات التناظر هذه ، فإننا نفرض قيودا على H_K و $H_{K'}$ بشكل منفصل على سبيل المثال :

$$TI: H_K = \sigma_x H_K^* \sigma_x = H_K \quad (43-2)$$

إذا كتبنا هاميلتوني كالتالي :

$$H_K = \sum_i \alpha_i \sigma_i$$

يمكننا أن نرى $\alpha_z = 0$ البنية الالكترونية للطبقة الثنائية على الفور ان ، مما يعني عدم وجود مصطلح الكتلة . وبالتالي ، فان الاضطراب في ظل T وإيكن . من حيث المبدأ ، ان يغير النقطة المخروطية . ولكن لا يمكن فتح الفجوة $H_{K11} = H_{K22}$ وتنقسم النطاقات بمقدار $|H_{12}|$. اذا لم تعد الشرائح الفرعية متكافئة ، فلا يوجد تناظر انعكاس ، وستظهر الكتلة بشكل طبيعي وتفتح الفجوة . هذا ، على سبيل المثال ، حالة الغرافن فوق نيتريد البورون السداسي ، [65] .

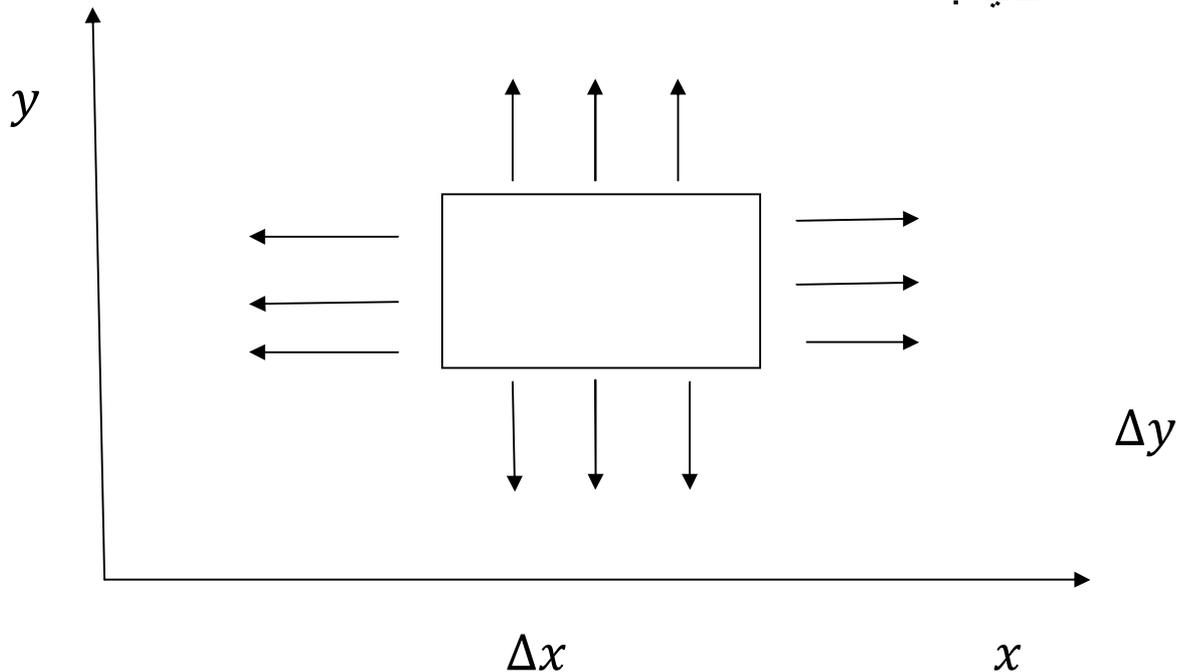
الفصل الثالث : دراسة تغيرات سطح الغرافن

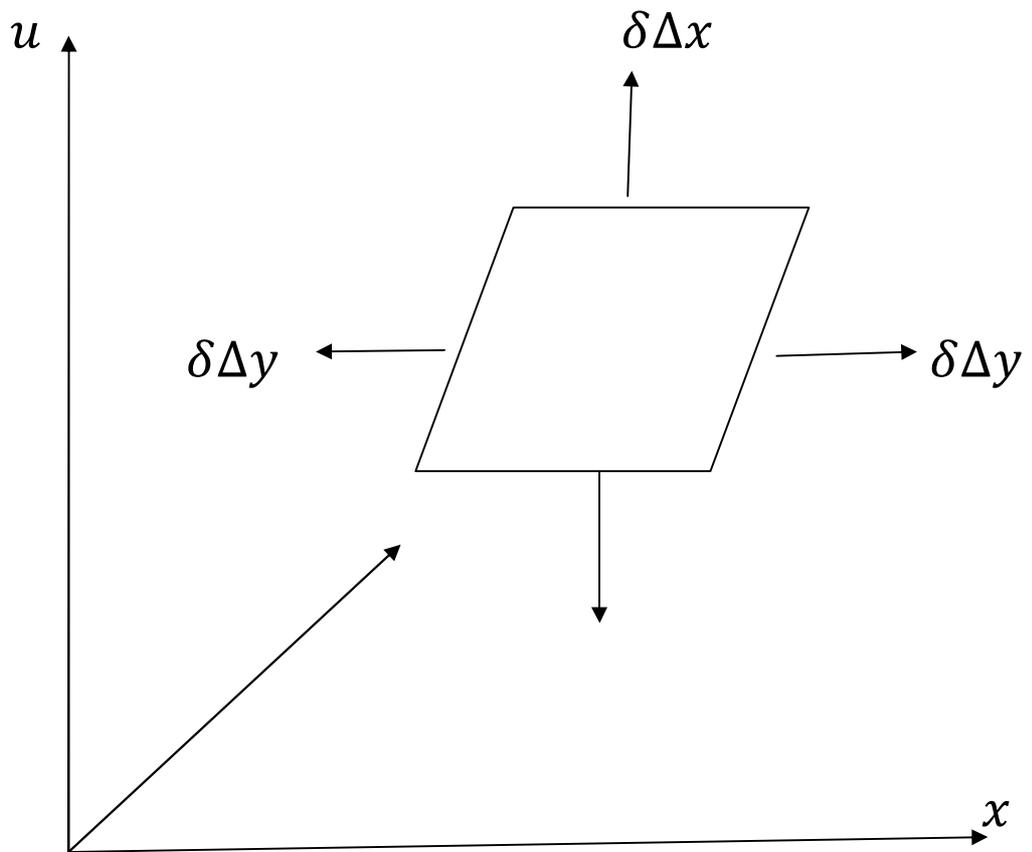
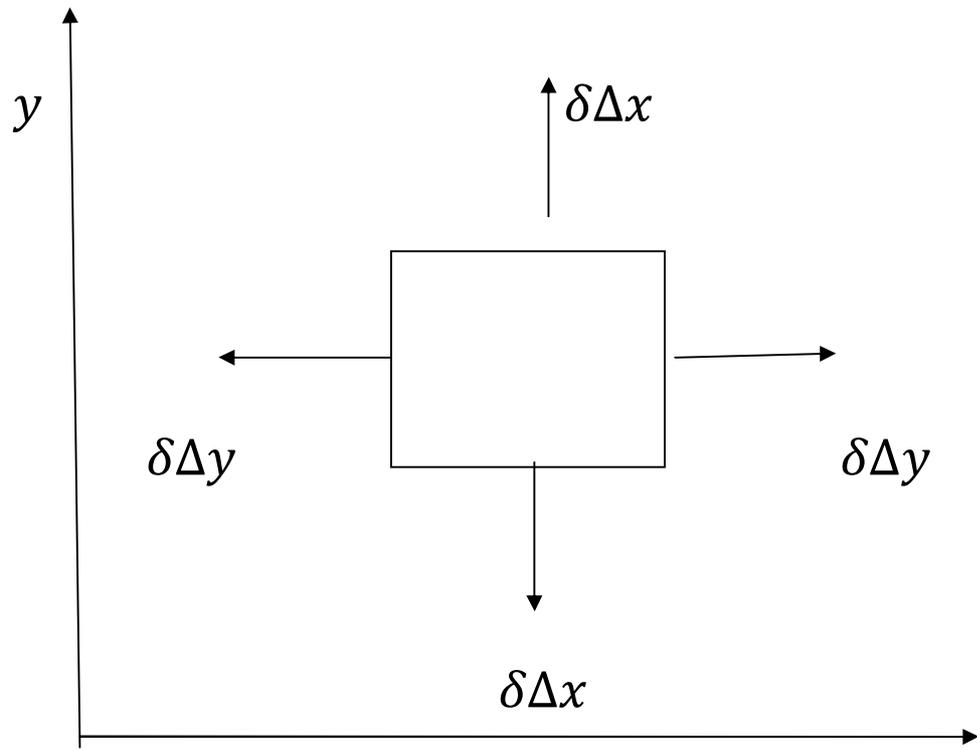
مقدمة

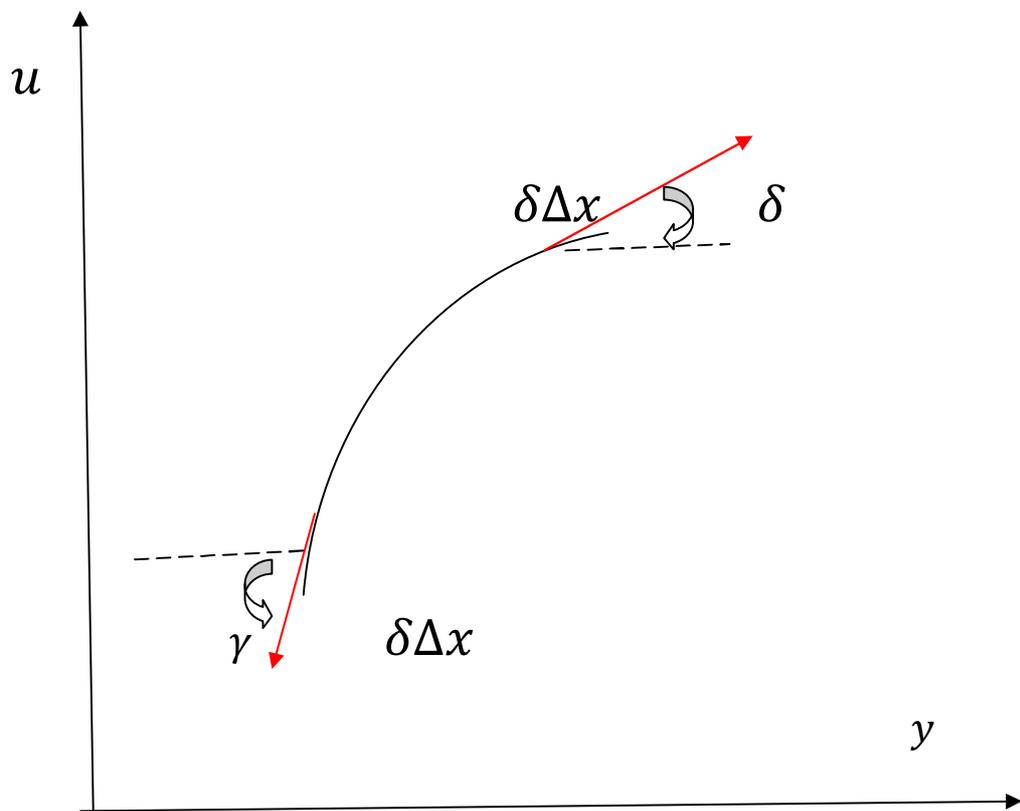
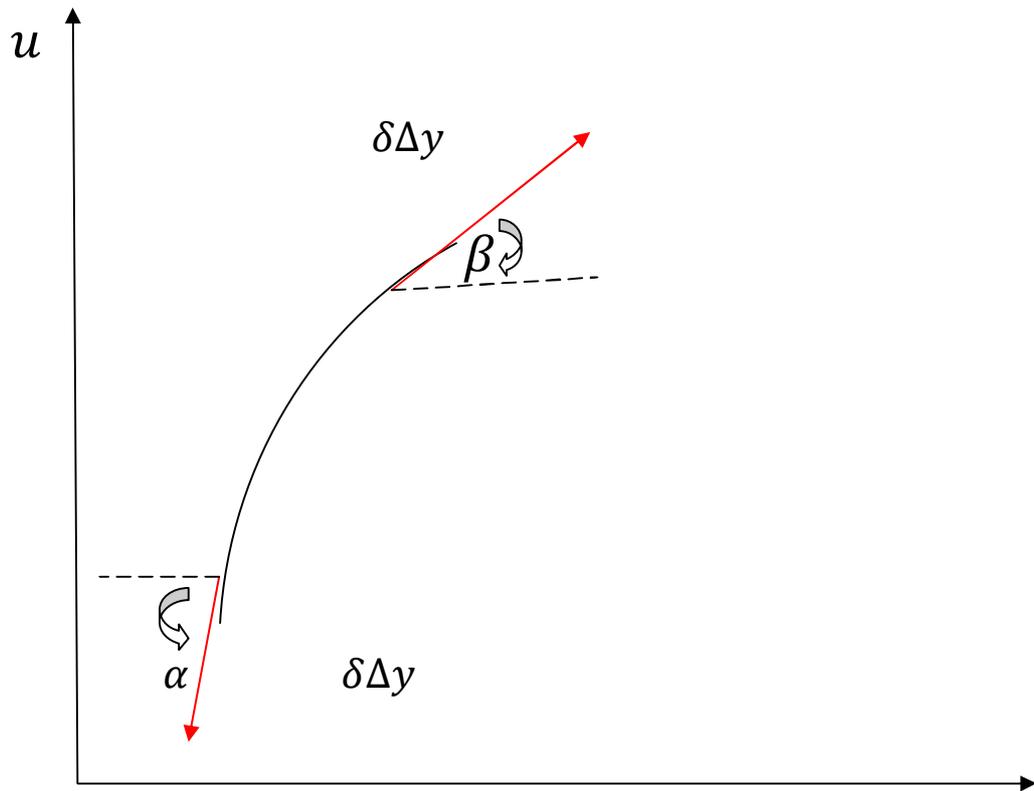
لقد دلت الدراسات الحديثة على أن مادة الغرافن هي من أكثر المواد مرونة ، ومع ذلك فإن التغييرات التي تحدث على سطح الغرافن مهمة جدا وذلك لان المسالة في هذه الحالة أصبحت ثنائية البعد (2D). وحيث أن الخواص الالكترونية للغرافن تعتمد في الأساس على المدارات π العمودية على سطح الغرافن أو بكلام أدق على المسافات الفاصلة بديها والتي سوف تتغير بسبب التشوهات على سطح الغرافن فان الخواص الالكترونية للغرافن سوف تتغير بكل تأكيد.

3-1- شكل سطح الغرافن :

باعتبار قطعة من الغرافن مشدودة فوق إطار مسطح في المستوي xy ، وحيث ان الغرافن شديد المرونة أي انه لا يقام الانثناءات وبأخذ مستطيلا صغيرا جدا من سطح الغرافن أبعاده Δx و Δy ، وبسبب التناظر الشديد لسطح الغرافن سوف نعتبر الشد السطحي $(\frac{F}{L})$ لا يعتمد على المكان وبالتالي سوف تنشأ في كل حافة من المستطيل قوة موزعة δ ، ويمكن أن نقوم بتحليل هذه القوة إلى مجموعة من المركبات كما في الأشكال التالية :







بالإسقاط في المستويين $\gamma\mu$ و $x\mu$ نجد ان محصلة القوى في الاتجاه x هو γ على الترتيب هو :

$$\begin{cases} \delta\Delta x(\cos \delta - \cos \gamma) \\ \delta\Delta y(\cos \beta - \cos \alpha) \end{cases} \quad (1-3)$$

في حالة التشوهات الصغيرة أي $\gamma, \delta, \beta, \alpha$ عبارة عن زوايا صغيرة فان :

$$\tan \alpha = \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2-3)$$

$$\tan \gamma = \frac{\partial u}{\partial y}$$

بتطبيق قانون نيوتن للحركة في الاتجاه العمودي نجد :

$$\Delta\delta y(\sin \beta - \sin \alpha) + \delta\Delta x(\sin \delta - \sin \gamma) = \rho\Delta x\Delta y \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (3-3)$$

حيث ρ هي الكثافة السطحية بوحدة $\left[\frac{m}{L^2}\right]$ ، وحيث أن الزوايا $\delta, \alpha, \beta, \gamma$ صغيرة جدا فيمكننا وضع التقريب التالي :

$$\sin \alpha \cong \tan \alpha = \frac{\partial u}{\partial x}(x, y, t) \quad (4-3)$$

وباعتماد هذا التقريب تصبح المعادلة من هنا فصاعدا :

$$\begin{aligned} & \delta\Delta y \left(\frac{\partial u}{\partial x}(x + \Delta x, y, t) - \frac{\partial u}{\partial x}(x, y, t) \right) + \delta\Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial y}(x, y + \Delta y, t) - \right. \\ & \left. \frac{\partial u}{\partial y}(x, y, t) \right) = \rho\Delta x\Delta y \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \end{aligned} \quad (5-3)$$

بقسمة طرفي هذه المعادلة على السطح الصغير واخذ نهاية صغيرة جدا فالمعادلة السابقة
تؤول إلى :

$$\delta \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (6-3)$$

والتي يمكن كتابتها بالشكل :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (7-3)$$

2-3- شكل سطح الغرافن في وجود التناظر :

نقصد بوجود التناظر هنا ، الحالة البسيطة التي تكون شروطها الابتدائية مسؤولة عن
الزاوية القطبية θ وبالتالي فإزاحة سطح الغرافن تحقق المعادلة المكتوبة في الإحداثيات
القطبية (r, θ) :

$$\begin{cases} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} & 0 < r < a \\ u(a, t) = 0 \\ u(r, 0) = f(r) & 0 < r < a \\ \frac{\partial u}{\partial t} (r, 0) = g(r) & 0 < r < a \end{cases} \quad (8-3)$$

باستخدام طريقة فصل المتغيرات أي :

$$u(r, t) = \Phi(r)T(t)$$

تصبح المعادلة السابقة كما يلي :

$$\frac{1}{r} (r\Phi')'T = \frac{1}{c^2} \Phi T'' \quad (9-3)$$

وبالقسمة على الجداء $\emptyset T$ نجد :

$$\frac{(r\emptyset')'}{r\emptyset} = \frac{T''}{C^2 T} \quad (10-3)$$

وبالتالي حتى تتساوى معادلتين مستقلتين يجب أن تتساويا عددا ثابتا $(-\lambda^2)$:

$$0 < r < a$$

$$\begin{cases} T'' + \lambda^2 c^2 T = 0 \\ (r\emptyset')' + \lambda^2 r\emptyset = 0 \end{cases} \quad (11-3)$$

وتتحقق شروط المحد بالنسبة للدالة \emptyset عندما يكون $\emptyset(a) = 0$ ، والمعادلة (11-3) هي

معادلة معروفة الحل ، وحلها هو كثيرات حدود " بيسل " :

بشرط أن يكون $|\emptyset|$ محدود عند $r = 0$

ولكي يتحقق $\psi(a) = 0$ يجب أن يتحقق $J_0(\lambda a) = 0$ حيث :

$$\lambda_n = \frac{\alpha_n}{a}$$

حيث α_n هي جذور الدالة ψ_0 و بالتالي فان :

$$\psi_n = J_0(\lambda_n r) \quad (12-3)$$

$$\lambda_n^2 = \left(\frac{\alpha_n}{a}\right)^2$$

أما الجزء الزمني فيمكننا أن نرى بان حله بسيط جدا وهو :

$$T_n(t) = a_n \cos \lambda_n Ct + b_n \sin \lambda_n Ct \quad (13-3)$$

وبالتالي من اجل كل $n=1,2,\dots$ نجد أن :

$$U_n = J_n(r)T_n(t) \quad (14-3)$$

والحل العام عبارة عن تركيب خطي للحل

$$U(r,t) = \sum J_0(\lambda_n r) [a_n \cos \lambda_n Ct + b_n \sin \lambda_n Ct] \quad (15-3)$$

والشروط الابتدائية في هذه الحالة

$$U(r,0) = \sum a_n J_0(\lambda_n r) = f(r)$$

$$\frac{\partial U(r,0)}{\partial t} = \sum b_n \lambda_n C J_0(\lambda_n r) = g(r) \quad (16-3)$$

ويمكن إيجاد المعاملات a_n و b_n من خلال علاقات التعامد التي تميز دوال بيسل [66]:

$$a_n = \int_0^a f(r) J_0(\lambda_n r) r dr / I_n$$

$$b_n = \int_0^a g(r) J_0(\lambda_n r) r dr / (\lambda_n C I_n) \quad (17-3)$$

$$I_n = \int_0^a [J_0(\lambda_n r)]^2$$

3-3- شكل سطح الغرافن في حالة عدم وجود التناظر :

نقصد بعدم وجود التناظر في هذه الحالة ، تعلق شكل سطح الغرافن بالاتجاه ، أي وجود الزاوية "θ" في المعادلة . التي تكتب في الإحداثيات القطبية بالشكل :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial U}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} \quad (18-3)$$

$$-\pi < \theta < \pi \quad , \quad 0 < r < a$$

$$U(a, \pi, t) = 0$$

$$U(0, \theta, t) = \text{محدودة} \quad (19-3)$$

$$U(r, -\pi, t) = U(r, \pi, t) \quad (20-3)$$

$$\frac{\partial U}{\partial \theta} (r, -\pi, t) = \frac{\partial U}{\partial \theta} (r, \pi, t) \quad (21-3)$$

$$U(r, \theta, 0) = f(r, \theta)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} (r, \theta, 0) = g(r, \theta) \quad (22-3)$$

ملاحظة: الشرط (3-19) المعادلة التفاضلية تملك نقطة شاذة عند $r=0$.

باستخدام فصل المتغيرات أي $U = \psi(r, \theta)T(t)$ نجد أن المعادلة تنفصل إلى معادلتين مرتبطتين :

$$\begin{cases} T'' + \lambda^2 C^2 T = 0 \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \theta^2} = -\lambda^2 \square \end{cases}$$

كما انه يمكننا فصل المتغيرات للدالة \square بافتراض أن :

$$\square(r, \theta) = R(r)\theta(\theta)$$

و بالتالي نحصل على:

$$\frac{1}{r} (rR')'\theta + \frac{1}{r^2} R\theta'' = -\lambda^2 R\theta \quad (24-3)$$

نضرب الطرفين في r^2 و القسمة على $R\theta$ نحصل على :

و بالتالي سوف نحصل على معادلتين تفاضليتين أيضا :

$$-\pi < \theta < \pi$$

$$\begin{cases} \theta'' + \mu^2\theta = 0 \\ \theta(-\pi) = \theta(\pi) \\ \theta'(-\pi) = \theta'(\pi) \end{cases} \quad (26-3)$$

$$(r'R)' - \frac{\mu^2}{r}R + \lambda^2 rR = 0 \quad 0 < r < a \quad (27-3)$$

$$|R(0)| = \text{محدودة} \quad (28-3)$$

$$|R(a)| = 0$$

من المعادلة (28-3) نجد مايلي :

$$\mu^2 = 0 \rightarrow \theta_0 = 1 \quad (29-3)$$

$$\mu^2 = m^2 \rightarrow \theta_m = \cos m\theta \quad V \sin \theta_m \quad (30-3)$$

$$m = 1, 2, 3 \dots$$

إن المعادلة (26-3) هي عبارة عن معادلة "بيسل" وحلها العام من اجل $\mu = m$ هو :

$$R(r) = C J_m(\lambda r) + D y_m(\lambda r) \quad (31 - 3)$$

وحسب شروط الحدود نجد أن $D=0$ أي $R(a)=0$ وبالتالي الحل يكتب على الشكل:

$$\begin{cases} R(r) = J_m(\lambda r) \\ R(a) = J_m(\lambda a) = 0 \end{cases} \quad (32-3)$$

وبالتالي λa هو حل للمعادلة $J_m(\alpha) = 0$ ، لكل عدد صحيح ثابت m يكون لدينا :

$$\dots\dots\dots, \alpha_{m1}, \alpha_{m2}, \alpha_{m3}$$

عبارة عن الحل الأول و الثاني و الثالث للمعادلة وتكتب بشكل عام :

$$\lambda_{mn} = \frac{\alpha_{mn}}{a} \quad m=0,1,2, \dots \quad n=1, 2, 3\dots$$

[67]

الفصل الرابع : دراسة
تأثير التغيرات في حالة
تناظر كروي

مقدمة :

لقد دلت الدراسات النظرية على أن التغيرات التي تطرأ على سطح الغرافن تؤدي إلى نشوء حقول مغناطيسية والتي بدورها سوف تؤثر بشكل جذري أو جزئي على الخواص المغناطيسية للغرافن مثل المنطقة الممنوعة و مستويات Landau وبالتالي سوف ينعكس هذا على الطيف .

يهدف عملنا في هذه المذكرة إلى دراسة كيفية تأثير التغيرات على سطح الغرافن على الخواص الالكترونية من خلال ظهور شكل الحقول المغناطيسية الناشئة وتوزعها على سطح ذو تناظر دائري .

1-4: دراسة الحقول المغناطيسية في حالة التناظر الدائري :

لقد رأينا في الفصل الثالث أن الدراسة الرياضية تسمح لنا بتعيين الدوال R وكذلك نستطيع بواسطتها بناء \square من أجل الأعداد الصحيحة $n=1,2,3,\dots$ ، حيث نحصل على الدالتين :

$$\begin{cases} J_m(\lambda_{mn}r) \cos m\theta \\ J_m(\lambda_{mn}r) \sin m\theta \end{cases} \quad (1-4)$$

حيث يقابل كلتا الحلين نفس القيمة الذاتية λ_{mn}^2 من أجل $m=0$ و $n=1,2,3,\dots$ أي $J_0(\lambda_{0n}r)$, وبالتالي عند ادخال الجزء الزمني $T(t)$ في الحساب أي اخذ $\cos \lambda_m ct$ و $\sin \lambda_m ct$ سوف نحصل على الصيغ التالية :

$$J_m(\lambda_{mn}r) \cos m\theta \cos \lambda_{mn} ct$$

$$J_m(\lambda_{mn}r) \sin m\theta \cos \lambda_{mn} ct$$

$$J_m(\lambda_{mn}r) \cos m\theta \sin \lambda_{mn} ct$$

$$J_m(\lambda_{mn}r) \sin m\theta \sin \lambda_{mn} ct$$

كما يصبح لدينا الحالة الخاصة $m=0$ والتي حلولها

$$J_0(\lambda_{0n}r) \cos \lambda_n ct \quad , \quad J_0(\lambda_{0n}r) \sin \lambda_{0n} ct$$

وبالتالي الحل العام سوف يكون عبارة عن تركيب خطي للمعادلات السابقة كما يلي :

$$\begin{aligned}
U(r, \theta, t) = & \\
& \sum_n a_{0n} J_0(\lambda_{0n} r) \cos \lambda_{0n} ct + \\
& \sum_{m,n} a_{mn} J_m(\lambda_{mn} r) \cos m\theta \cos \lambda_{mn} ct + \\
& \sum_{m,n} b_{mn} J_m(\lambda_{mn} r) \sin(m\theta) \cos \lambda_{mn} ct + \\
& \sum_n A_{0n} J_0(\lambda_{0n} r) \sin \lambda_{0n} ct + \\
& \sum_{m,n} A_{mn} J_m(\lambda_{mn} r) \cos m\theta \sin \lambda_{mn} ct + \\
& \sum_{m,n} B_{mn} J_m(\lambda_{mn} r) \sin m\theta \sin \lambda_{mn} ct
\end{aligned}$$

وبسبب تعقيد المسألة عند دراستها متعلقة بالزمن ، سوف نأخذ فقط اللحظة الابتدائية عند اللحظة $t=0$ أي تصبح :

$$\begin{aligned}
U(r, \theta, 0) = & \sum_n a_{0n} J_0(\lambda_{0n} r) + \sum_{m,n} a_{mn} J_m(\lambda_{mn} r) \cos m\theta + \\
& \sum_{m,n} b_{mn} J_m(\lambda_{mn} r) \sin m\theta
\end{aligned}$$

وهذه عبارة عن دالة ثلاثية الأبعاد ولكن الدراسات النظرية والتجريبية [68] إن التغيرات على سطح الغرافن تؤدي إلى ظهور شعاع كمون مغناطيسي $\vec{A}(A_x, A_y)$ يعطى بالعلاقة التالية :

$$\left\{ \begin{array}{l} A_x = \frac{\sqrt{3}}{2} (t_1 - t_2) \\ A_y = \frac{1}{2} (2t_3 - t_1 - t_2) \end{array} \right. \quad (3-4)$$

حيث إن معاملات القفز أو الانتقال بين المدارات التي تصبح غير متكافئة بسبب التغيرات التي تحدث على سطح الغرافن وتسمى t_3, t_2, t_1 ، حيث يمكن حساب الحقل المغناطيسي من خلال العلاقة [69] التالية

$$\left\{ \begin{array}{l} B_r = B_r^0 \frac{\partial u}{\partial r} \\ B_\theta = B_\theta^0 \frac{\partial u}{r \partial \theta} \end{array} \right.$$

حيث سوف يؤخذ B_r^0, B_θ^0 كوحدة قياس لشدة الحقل فيما بعد ، وهما يتعلقان بشدة التشوهات وبنيتها الهندسية المعقدة ل [70] .

باستعمال العلاقة السابقة لـ u في المعادلة نجد :

$$\frac{B_r}{B_r^0} = \sum_n a_{0n} \frac{\partial J_0(\lambda_{0n}r)}{\partial r} + \sum_{m,n} a_{m,n} \frac{\partial J_m(\lambda_{mn}r)}{\partial r} (\lambda_{mn}r) \cos m\theta +$$

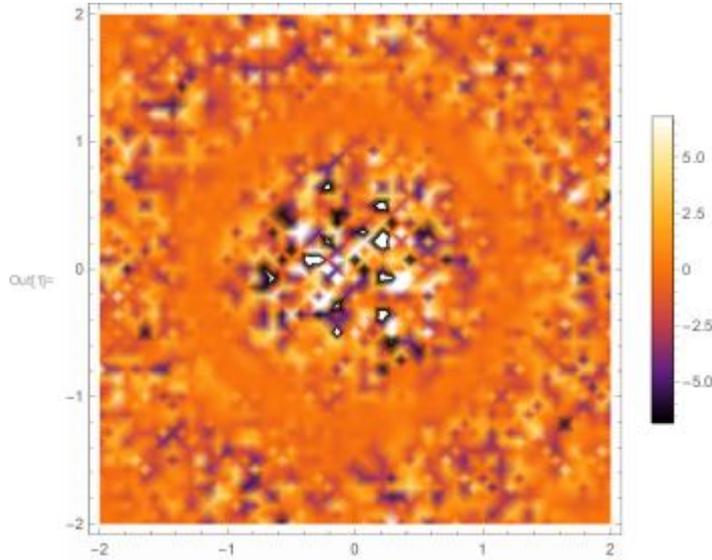
$$\sum_{m,n} b_{m,n} \frac{\partial J_{m,n}(\lambda_{mn}r)}{\partial r} \sin m\theta$$

$$\frac{B_\theta}{B_\theta^0} =$$

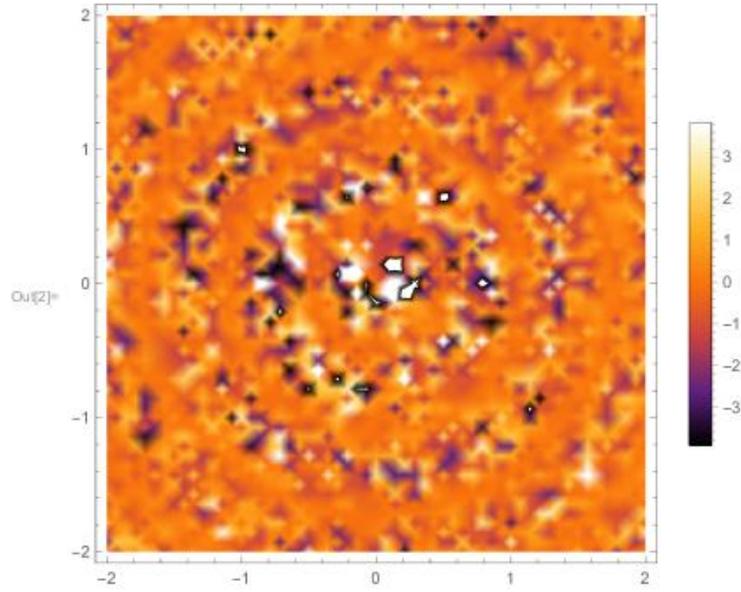
$$\sum_n -a_{mn} m J_m(\lambda_{mn}r) \sin(m\theta) + \sum_{m,n} b_{m,n} m J_{mn}(\lambda_{mn}r) \cos \theta$$

2-4- دراسة النتائج :

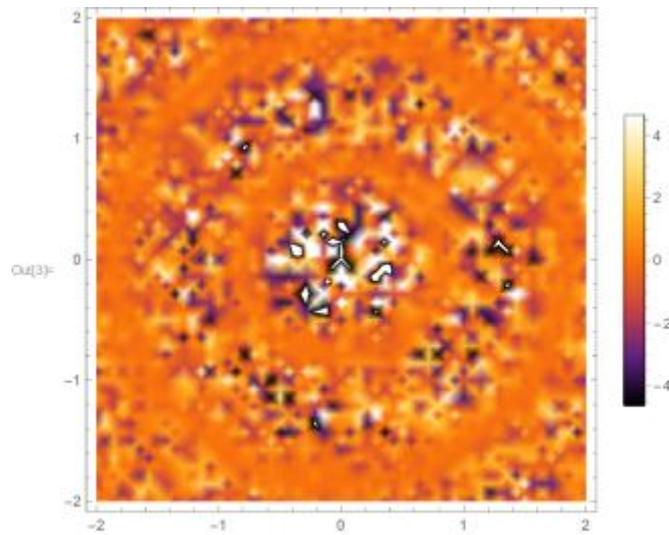
لقد قمنا باستخدام برنامج Mathematica من اجل محاكاة حالة سطح الغرافن في حالة التناظر الدائري من اجل بعض القيم العشوائية λ_m والوسائط $a_{mn}, a_{0n}, b_{m,n}$. والنتائج موضحة في الاشكال التالية :



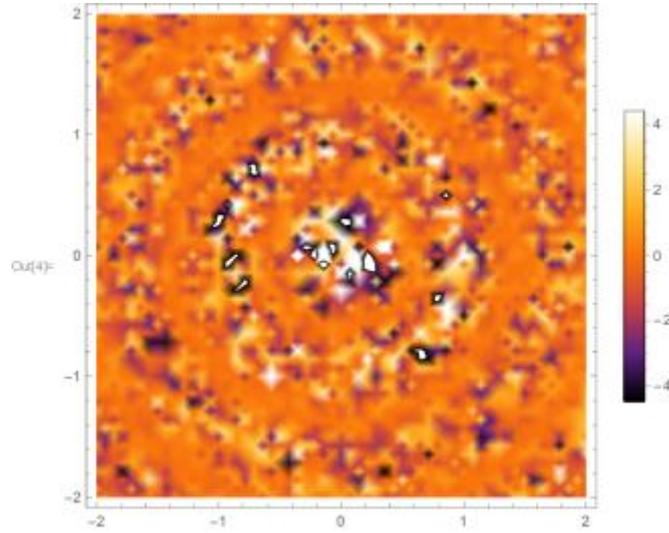
الشكل (1-4) : توزيع كثافة شدة المركبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 1$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 .



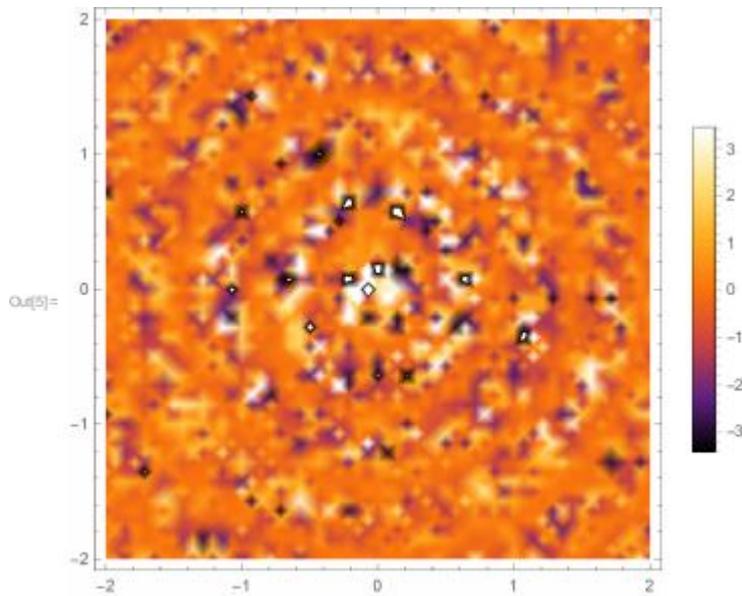
الشكل (2-4): توزيع كثافة شدة المركبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 2$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 .



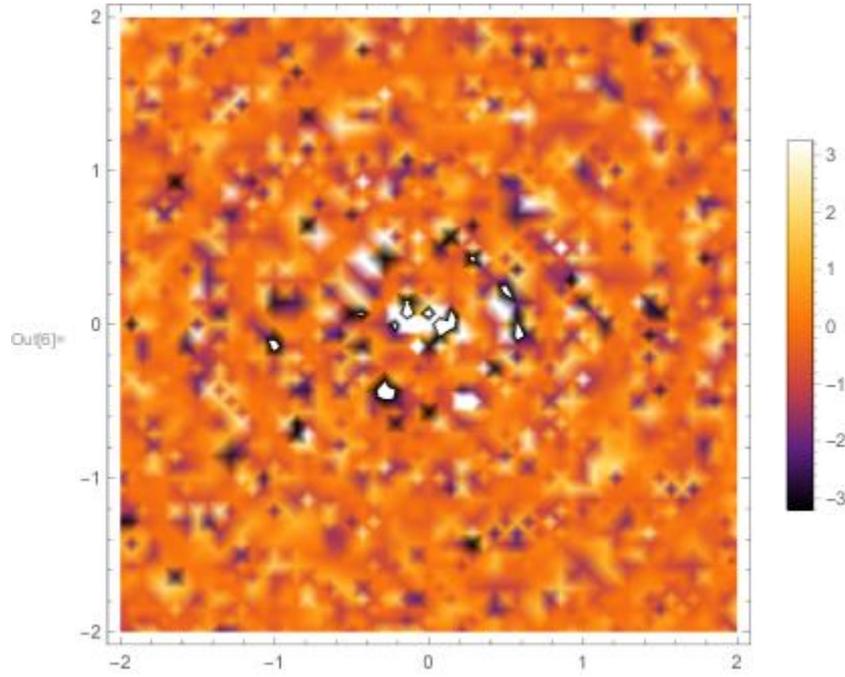
الشكل (3-4): توزيع كثافة شدة المركبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 3$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 .



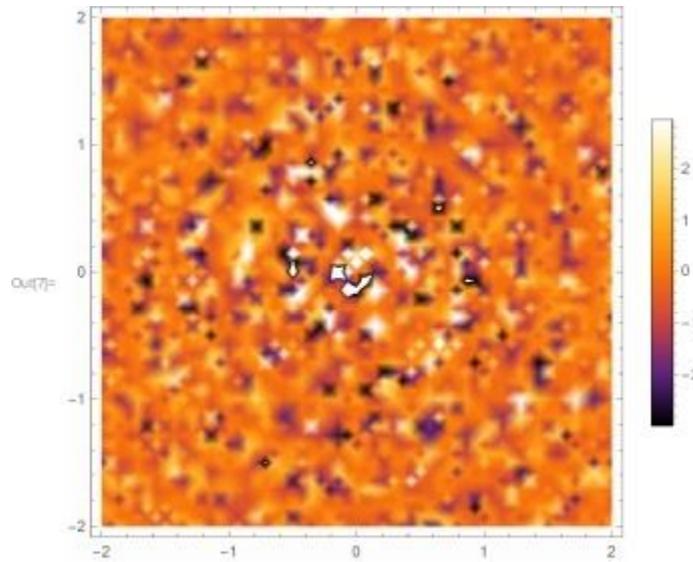
الشكل (4-4): توزيع كثافة شدة المركبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 4$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 .



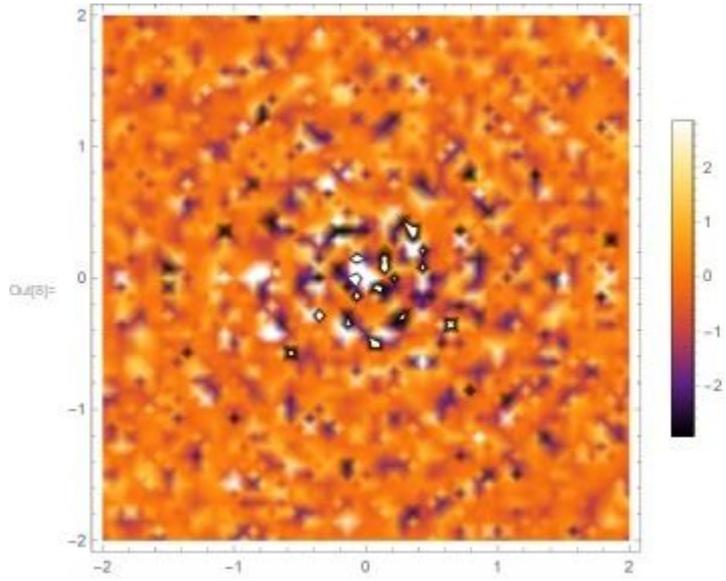
الشكل (5-4): توزيع كثافة شدة المركبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 5$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 .



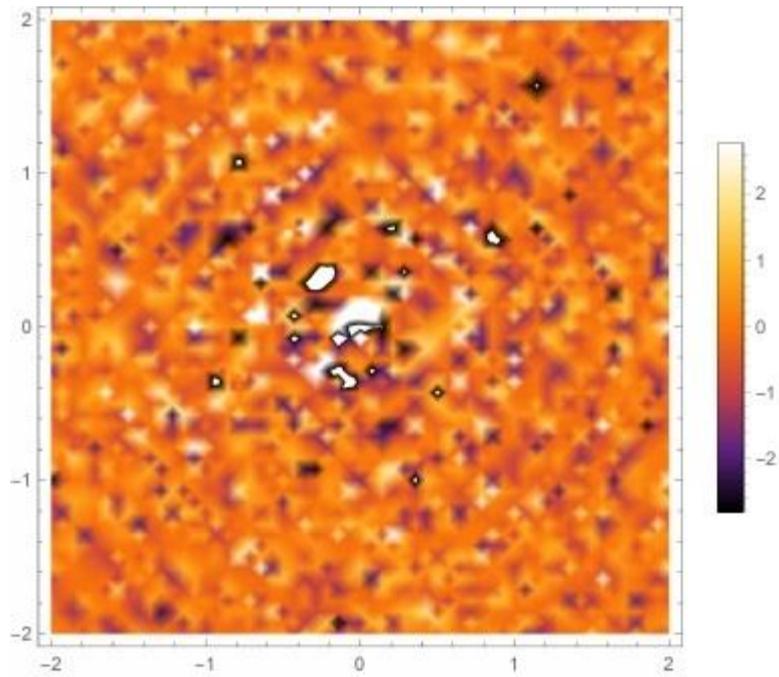
الشكل (6-4): توزيع كثافة شدة المركبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 6$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 .



الشكل (7-4): توزيع كثافة شدة المركبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 7$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 .



الشكل (8-4): توزيع كثافة شدة المركبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 8$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 .

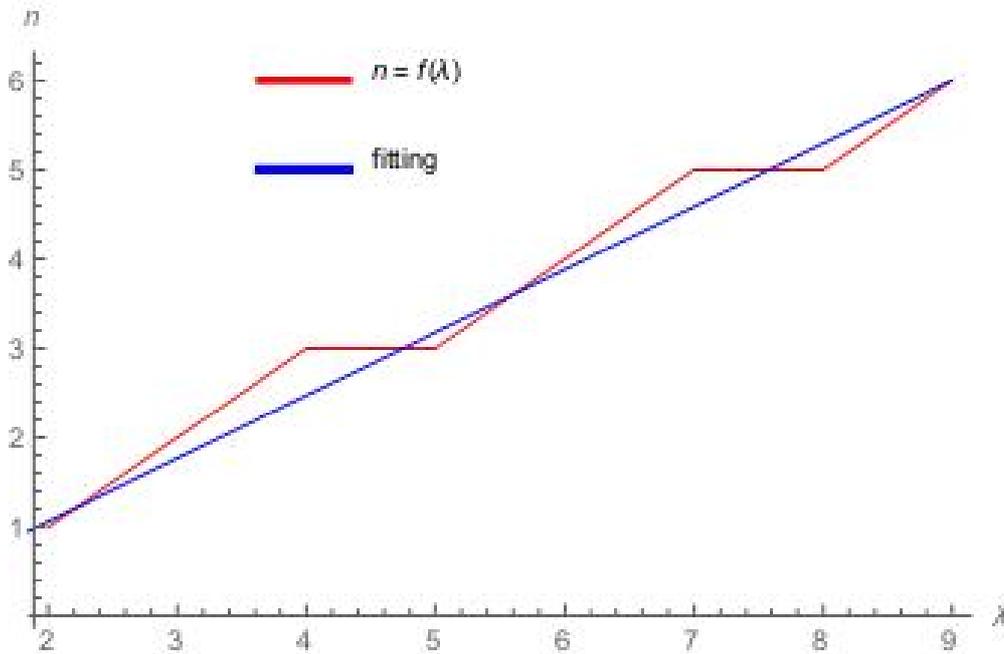


الشكل (9-4): توزيع كثافة شدة المركبة الزاوية للحقل المغناطيسي من اجل $\lambda = 9$ ومعاملات عشوائية في المجال -10 الى 10 .

أولاً: نلاحظ وجود دوائر ذات شدة عظمى متناوبة مع دوائر أخرى ذات شدة اقل وهذا يعود إلى الشكل الموجي المستقر لسطح الغرافن وبالتالي نرى بوضوح أن شدة المرتبة الزاوية للحقل المغناطيسي تتأثر بشكل كبير بشدة التغيرات على سطح الغرافن .

ثانياً: نلاحظ عدد الدوائر التي تعبر عن الشدة المساوية للموجة B_0 بالموجب (+) او بالسالب (-) متعلقة بشدة دورية التغيرات على سطح الغرافن والذي يعبر عنه في هذه الحالة العدد λ

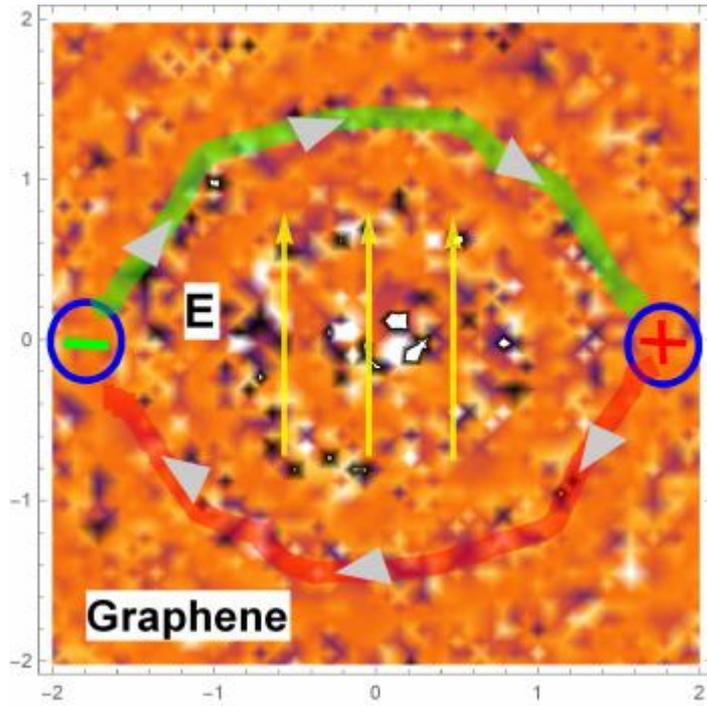
، والشكل التالي يعبر عن ذلك بوضوح ، وهذا دليل قاطع على تأثير شدة الانحناءات على سطح الغرافن على شكل الحقل المغناطيسي الناتج حيث كلما زادت λ يزداد عدد الدوائر إلى درجة عدم التمييز بينها .



الشكل (4-10): مخطط يوضح عدد الدوائر الكاملة ذات الكثافة العظمى أو الصغرى بدلالة λ .

ثالثا إن التباين في شدة هذا الحقل المغناطيسي الناتج بواسطة التغيرات على سطح الغرافن سوف ينتج عنه القوة المعروفة جيدا بقوة لورنتز Lorentz.

حيث q هي الشحنة الكهربائية، \vec{v} سرعة الشحنة، \vec{B} الحقل المغناطيسي المولد. وبالتالي عند مرور تيار كهربائي سوف تقوم القوة \vec{F} بجرفه نحو اليمين اذا كانت q سالبة أي تحت تأثير القوة $F^{(-)}$ والعكس بالعكس تحت تأثير $F^{(+)}$ كما هو موضح في الشكل:



شكل(4-11): ظهور مفعول هول ذاتي بسبب الحقل المغناطيسي المولد بتغيرات سطح الغرافن.

و بالتالي سوف ينشا عنه أيضا حقل كهربائي ذاتي التوليد . وبالتالي حدوث مايسمى بمفعول هول Hall لكنه في هذه الحالة ذاتي التوليد .

رابعا: سوف يولد الحقل المغناطيسي الناشئ بواسطة التغيرات الحادثة على سطح الغرافن مايسمى بمستويات Landau [71] التي تتولد في وجود حقول مغناطيسية و تعطى بالعبرة الشهيرة .

$$n \in \{0,1,2 \dots\}$$

بينما $w_c = \frac{qB}{m}$ تسمى تواتر Cyclotron وهي متناسبة مع الحقل المغناطيسي المولي .

ولكن في حالتنا هذه سوف يكون هناك نوعين من المستويات بسبب وجود $B_r B_\theta$.

الخلاصة العامة

الخلاصة العامة:

يعتبر اكتشاف الغرافن ، ثورة جديدة في فيزياء المواد ثنائية الأبعاد ، وذلك بسبب الخصائص المذهلة التي يمتلكها من ناحية الناقلية الكهربائية والحرارية بالإضافة إلى مرونته الشديدة .

تؤدي التغيرات (التشوهات) والانحناءات على سطح الغرافن إلى نشوء ظواهر جديدة تؤثر على الخواص الإلكترونية .

قمنا في هذه المذكرة بدراسة تأثير التغيرات ذات التناظر الدائري على بعض الخصائص مثل مفعول Hall و مستويات Landau.

حيث وجدنا ارتباط وثيق بين دورية الانحناءات على سطح الغرافن ، وتغيرات شدة الحقل المغناطيسي وقد نتج عن عدم التماثل نشوء تيارات وحقول كهربائية متعلقة أيضا بشكل الانحناءات وهذا يؤثر بشكل جذري على مستويات Landau وكذلك مفعول Hall .

قائمة

المصادر

والمرجع

[01] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morosov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A.A. Firsov, *Nature* 438, 197 (2005).

[02] Y. Zhang, Y.W. Tan, H.L. Stormer, and P. Kim, *Nature* 438, 201 (2005).

[03] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morosov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, and A.A. Firsov, *Science* 306, 666 (2004).

[04] nano transistor IBM

[05] Fuchs, J.N., & Goerbig, M.O. (2008). Introduction to the physical properties of graphene. Lecture notes, 10, 11-12.

[06] H. P. Boehm, R. Setton, and E. Stumpp, "Nomenclature and terminology of graphite intercalation compounds," *Pure and Applied Chemistry*, vol. 66, no. 9, pp. 1893–1901, 1994.

[07] B.Y. Zhu, S. Murali, W. Cai et al., "Graphene and graphene oxide: synthesis, properties, and applications," *Advanced Materials*, vol. 22, no. 35, pp. 3906–3924, 2010.

[08] C. Soldano, A. Mahmood, and E. Dujardin, "Production, properties and potential of graphene," *Carbon*, vol. 48, no. 8, pp. 2127–2150, 2010.

[09] J. S. Y. Chia, M. T. T. Tan, P. SimKhiew et al., "Facile synthesis of few-layer graphene by mild solvent thermal exfoliation of highly oriented pyrolytic graphite," *Chemical Engineering Journal*, vol. 231, pp. 1–11, 2013.

[10] R. van Noorden, "Production: beyond sticky tape," *Nature*, vol. 483, no. 7389, pp. 32–33, 2012.

[11] H. Y. Mao, S. Laurent, W. Chen et al., "Graphene: promises, facts, opportunities, and challenges in nanomedicine," *Chemical Reviews*, vol. 113, no. 5, pp. 3407–3424, 2013.

[12] <http://ec.europa.eu/enterprise/policies/raw-materials/critical/index>.

[13] Skoda, M., Dudek, I., Jarosz, A., & Szukiewicz, D. (2014). Graphene: one material, many possibilities—application difficulties in biological systems. *Journal of Nanomaterials*, 2014.

[14] Jinzhu Wu, Jun Dai, Yanbin Shao, Meiqi Cao and Xiaohong Wu/ *RSC Adv.*, 2016, 6, 77999 /DOI: 10.1039/C6RA15074H

[15] PATRICK BRISEBOIS, thèse de doctorat, synthèse et fonctionnalisation chimique de l'oxyde de graphène: préparation de matériaux hybrides à base d'oxyde de graphène et de nanoparticules métalliques, UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À MONTRÉAL, juillet 2017.

[16] Poh, T.Y., Ali, N.A.B.M., Mac Aogáin, M. et al. Inhaled nanomaterials and the respiratory microbiome: clinical, immunological and toxicological perspectives. *Part Fibre Toxicol* 15, 46 (2018). <https://doi.org/10.1186/s12989-018-0282-0>.

[17] Zhidan Zeng et al., *Nature Communications* (2017); doi: 10.1038/s41467-017-00395-w.

[18] TopBrainScience.com

[19] Zhang, X. (2017). Synthesis and Characterization of 2H and 1T' Molybdenum Diteleuride (MoTe₂) (Doctoral dissertation).

[20] <http://cqse.ntu.edu.tw/cqse/paper/BYJIN/BYJ22.pdf>

[21] https://www.perkinelmer.com/lab-solutions/resources/docs/WHP_011513A-CHN_01.pdf

[22] T1 - A review on the challenges and possibilities of using CNTs in organic solar cells/VL - 10/DO - 10.1166/sam.2018.3260/JO - *Science of Advanced Materials*

[23] Razika, O., & Sylia, L. (2018). Le graphène et ses applications en électronique (Doctoral dissertation, Université Mouloud Mammeri).

[24] <https://www.ahbmoda.com.br/colecao/141217-45>.

[25] <https://www.thoughtco.com/why-is-graphene-important-603950>.

[26]<https://www.includehelp.com/nanotechnology/methods-of-graphene-synthesis.aspx>.

[27] https://www.nanowerk.com/what_is_graphene.php.

[28]<https://www.greelane.com>

[29]<https://www.engadget.com/amp/2016/10/29/six-amazing-uses-for-the-wonder-material-graphene>.

[30]<https://www.unlimit-tech.com>

[31]<https://www.aljarida.com/articles/1607845627385116700>.

[32-35]<https://www.unlimit-tech.com>

• [36]مراجععدل

• [أبتقرير من موقع روسيا اليوم. نسخة محفوظة 07 يناير 2015 على موقع واي باك مشين](#) ↑

[37]Radzig, A. A., & Smirnov, B. M. (1985). Interaction potentials between atomic and molecular species. In *Reference Data on Atoms, Molecules, and Ions* (pp. 307-315). Springer, Berlin, Heidelberg.

[38]Fowler, W. A. (1984). Experimental and Theoretical Nuclear Astrophysics; The Quest for the Origin of the Elements (Nobel Lecture). *Angewandte Chemie International Edition in English*, 23(9), 645-671.

[39]Radzig, A. A., & Smirnov, B. M. (1985). Interaction potentials between atomic and molecular species. In *Reference Data on Atoms, Molecules, and Ions* (pp. 307-315). Springer, Berlin, Heidelberg.

[40]Radzig, A. A., & Smirnov, B. M. (1985). Interaction potentials between atomic and molecular species. In *Reference Data on Atoms, Molecules, and Ions* (pp. 307-315). Springer, Berlin, Heidelberg.

[41]Katsnelson, M. I., & Katsnelson, M. I. (2012). *Graphene: carbon in two dimensions*. Cambridge university press.

[42]morpheo.inrialpes.fr

[43]Jeremiteyssier.files.wordpress.com

[44]Katsnelson, M. I., & Katsnelson, M. I. (2012). *Graphene: carbon in two dimensions*. Cambridge university press.

[45] Peschel, G. (2011). Carbon-carbon bonds: hybridization. Obtained online from: http://www.physik.fu-berlin.de/einrichtungen/ag/ag-reich/lehre/Archiv/ss2011/docs/Gina_Peschel-Handout.pdf, published on, 5(5).

[46]Brunch.co.kr

[47]Oberhuber, F. (2015). *Untersuchung kristallographisch definierter Graphen-Ränder* (Doctoral dissertation).

[48]Bassani, F. G., & Parravicini, G. P. (1975). Interband transitions and optical properties. *Electronic States and Optical Transitions In Solids*.

[49]Reich, S., Maultzsch, J., Thomsen, C., & Ordejon, P. (2002). Tight-binding description of graphene. *Physical Review B*, 66(3), 035412.

[50]Kretinin, A., Yu, G. L., Jalil, R., Cao, Y., Withers, F., Mishchenko, A., ... & Guinea, F. (2013). Quantum capacitance measurements of electron-hole asymmetry and next-nearest-neighbor hopping in graphene. *Physical Review B*, 88(16), 165427.

[51]Bassani, F. G., & Parravicini, G. P. (1975). Interband transitions and optical properties. *Electronic States and Optical Transitions In Solids*.

[52]Reich, S., Maultzsch, J., Thomsen, C., & Ordejon, P. (2002). Tight-binding description of graphene. *Physical Review B*, 66(3), 035412.

[53]Saini, A. (2014). EU Graphene Flagship project aims for technological breakthroughs. *Mrs Bulletin*, 39(5), 393.

[54]Neifeld, E. A., Demchuk, K. M., Harus, G. I., Boubnova, A. E., Domanskaya, L. I., Shtrapein, G. L., & Yu. Paranchich, S. (1996).

Shubnikov-de Haas Oscillations in Fe-and Co-Doped HgSe under Pressure. *physica status solidi (b)*, 198(1), 143-148.

[55]Mikheev, V. M. (1989). Impurity scattering in weakly compensated gapless semiconductors at low temperatures. *physica status solidi (b)*, 156(2), 577-582.

[56]Peres, N. M. R. (2010). Colloquium: The transport properties of graphene: An introduction. *Reviews of modern physics*, 82(3), 2673.

[57]Kane, M. J., & Buysse, J. A. (2005). Intercollegiate media guides as contested terrain: A longitudinal analysis. *Sociology of Sport Journal*, 22(2), 214-238.

[58]Huertas-Hernando, D., Guinea, F., & Brataas, A. (2009). Spin-orbit-mediated spin relaxation in graphene. *Physical review letters*, 103(14), 146801.

[59]Acun, A., Zhang, L., Bampoulis, P., Farmanbar, M. V., van Houselt, A., Rudenko, A. N., ... & Zandvliet, H. J. (2015). Germanene: the germanium analogue of graphene. *Journal of physics: Condensed matter*, 27(44), 443002.

[60]Neto, A. C., & Guinea, F. (2009). Impurity-induced spin-orbit coupling in graphene. *Physical review letters*, 103(2), 026804.

[61]Huertas-Hernando, D., Guinea, F., & Brataas, A. (2009). Spin-orbit-mediated spin relaxation in graphene. *Physical review letters*, 103(14), 146801.

[62]Bjorken, J. D., & Paschos, E. A. (1969). Inelastic electron-proton and γ -proton scattering and the structure of the nucleon. *Physical Review*, 185(5), 1975.

[63]Vonsovskii, S. V., & Katsnelson, M. I. (1989). ONE-ELECTRON DENSITY-MATRIX AND THE METAL-NONMETAL CRITERIUM FOR CRYSTALLINE SOLIDS. *USPEKHI FIZICHESKIKH NAUK*, 158(4), 723-728.

[64]Mañes, J. L., Guinea, F., & Vozmediano, M. A. (2007). Existence and topological stability of Fermi points in multilayered graphene. *Physical Review B*, 75(15), 155424.

[65]Mikhail I.Katsnelson-the physics of the graphene.

[66]Sagan, H. (1989). *Boundary and eigenvalue problems in mathematical physics*. Courier Corporation.

[67]Perry, J. M. (1968). Numerical Solution of Partial Differential Equations (GD Smith). *SIAM Review*, 10(3), 396.

[68]Guinea, F, Katsnelson. M. I, Vozmediano, M. A. H,(2008), phys. Rev. B11,075422.

[69]Kane, C, L, Mell, E, J.(1997), phys, rev. Left, 78,1932.

[70]Katsnelson, M, I. Novoslov, K. S,(2007), solide state commune 143,3

[71]Guinea, F, Katsnelson. M. I, Vozmediano, M. A. H,(2008), phys. Rev. B11,075422.