



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



قسم : علوم المادة

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر

الميدان : علوم المادة

التخصص : فيزياء المادة المكثفة

العنوان:

دراسة تأثير شكل الحدود
على الخواص الالكترونية
للغرافين

إعداد الطالبتين:

حناشي كنزة

عسال حنان

لجنة المناقشة:

جامعة العربي التبسي

رئيسة اللجنة

استاذة محاضرة أ

بوخالفة راضية

جامعة العربي التبسي

مقرر

أستاذ محاضر أ

بوديار عبيد

جامعة العربي التبسي

ممتحن

أستاذ محاضر أ

طق محمد امين

السنة الجامعية : 2020 - 2021



Université Larbi Tébessi- Tébessa

Faculté des sciences exactes et des sciences de la nature et de la vie

Département : Sciences de la Matière

Filière : Physique

Spécialité : Physique de la Matière Condensée

Année universitaire 2020/2021



Formulaire de levée de réserves après soutenance d'un Mémoire de Master



Données d'identification du candidats(es) :

Nom et prénom du candidat : Issal Hamane
Hannachi Kenza

Intitulé du Sujet : دراسة تأثير شكل الصوت على خواص الطور
للجرافيت

Données d'identification du membre de jury :

Nom et prénom : Boukhalifa Radhia

Grade : PTCA

Lieu d'exercice : Université Larbi Tébessi- Tébessa

Vu le procès-verbal de soutenance du Mémoire sus citée comportant les réserves suivantes :

RAS

Et après constatation des modifications et corrections suivantes :

RAS

Je déclare en ma qualité de président de jury de soutenance que le mémoire cité remplit toutes les conditions exigées et permet au candidat de déposer son mémoire en vue de l'obtention de l'attestation de succès.

[Signature]
1207 12
وَقَدْ قَرَأْتُ
الْبَابَ الْإِلَهِيَّ
الْمَعْلُومَ بِالنَّهْجِ
الْمَعْلُومِ بِالْمَعْلُومِ
الْمَعْلُومِ بِالْمَعْلُومِ

Le 12/07/2021

Président de jury de soutenance : (Nom/Prénom et signature)

Boukhalifa Radhia
[Signature]



Déclaration sur l'honneur de non-plagiat

(à joindre obligatoirement au mémoire, remplie et signée)



Je soussigné(e),

Nom, Prénom : *Assal Hanane, Hannachi Kenza*

Régulièrement inscrit(e) en Master au département : *Sciences de la matière*

N° de carte d'étudiant : *14.14.34.024.148 / 15.15.34.028.103*

Année universitaire : *2020/2021*

Domaine : *Sciences de la matière*

Filière : *Physique*

Spécialité : *Physique de la matière condensée*

Intitulé du mémoire :

دراسة تأثير شكل الجهد على الخواص الإلكترونية
الذرية

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 :

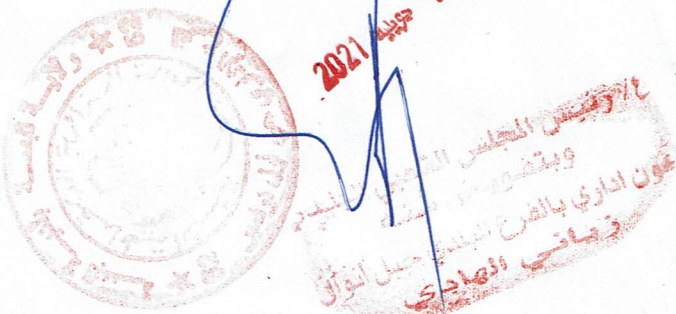
L'étudiant sera convoqué devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont :

- 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 : *12/07/2021*

Signature de l'étudiant(e) :

[Signature]



بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

تشكرات

قال الله تعالى: { رَبِّ أَوْزِعْنِي أَنْ أَشْكُرَ نِعْمَتَكَ الَّتِي أَنْعَمْتَ عَلَيَّ وَعَلَىٰ وَالِدَيَّ وَأَنْ

أَعْمَلَ صَالِحًا تَرْضَاهُ وَأَذِّنْ لِي بِرَحْمَتِكَ فِي عِبَادِكَ الصَّالِحِينَ } صدق الله العظيم سورة

الزمل الآية 19.

اول من يشكر ويحمد انا والليل و اطرافه النهار ، هو العلي القهار ، الأول و الآخر والظاهر

والباطن ، الذي افرقنا بنعمه التي لا تحصى ، و امدق علينا برزقه الذي لا يفنى ، وانار دروبنا

، فله جزيل الحمد و الثناء العظيم ، ، و اعطانا القوة والمقدرة ما نحتاجه للوصول إلى هذا

المستوي و إتمام عملنا المتواضع ، وما التوفيق إلا بالله.

ونصلي ونسلم على خاتم الأنبياء والمرسلين صاحب الخلق العظيم محمد صلى الله عليه و سلم ،

الذي أدي الأمانة وبلغ الرسالة ونحن على ذلك شاهدين.

والشكر موصول الى كل من كان سببا في تعلمنا وتربيتنا بدءا بالوالدين الكريمين اللذان

هما اول مدرسة ينهل منها الأستاذ أصول العلم والمعرفة والأخلاق.

و كل معلم افادنا بعلمه ، من أولى المراحل الدراسية حتى هذه اللحظة كما نرفع كلمة شكر

الى الدكتور "عبيد بوديار " ، الذي ساعدنا على انجاز بحثنا و انار طريقنا بتوجيهاته القيمة

فجزاه الله خير الجزاء ووقفه لما يرضاه وأبلغه غايته ومبتغاه إن شاء الله.

كما نتقدم بالشكر والامتنان إلى أعضاء اللجنة :

_ الأستاذة بوخالفة راضية :على قبولهم ترأس لجنة المناقشة

_ الأستاذ محمد امين طق:على موافقته للمشاركة كعضو ممتحن في لجنة المناقشة

وفى الأخير لا يسعنا إلا ان ندعو الله عز وجل ان يرزقنا السداد ،والرشاد،والعفاف ،و

الغنى ،وان يجعلنا هداة مهتدين.

الاهداء

قال الله تعالى { وَانْفِضْ لَهُمَا جَنَاحَ الذَّلِّ مِنَ الرَّحْمَةِ وَقُلْ رَبِّ ارْحَمْنَاهُمَا كَمَا رَّبَّيْنِي

صَغِيرًا } صدق الله العظيم سورة الاسراء الآية 24

الى من تمنيت ان يراني في هذا الموقف لكن مشيئة الله سبقته والذي العزيز رحمه
الله بحسب علي

الى من تعجز كلماتي وتشجعني هامتي لعظيم عطائها الي شمس حياتي التي لا تغيب
خاليتي امي عوايشية عائشة

الى القلوب الكبيرة التي الجا اليها وقت الشدائد الي من اشد لهم ازري وأشاركم
امري الي قدوتي ومفخرتي اخوتي محمد ، بوزيد ، رمزي ، طارق ، منير ، عادل .

الى اخواتي نجية ، عواطف ، نورة ، جميلة ، بسمة .

الى من تذوقته معهم اجمل اللحظات صديقاتي نعيمة ، نور.

الى من شاركتني في اتمام هذه المذكرة كمنزة.

الى استاذي الفاضل الذي اعانني على اكمال هذه المذكرة الدكتور عميد بوديار.

الى كل من معرفتهم في مشواري الدراسي الي كافة طلاب العلم والمعرفة

بحسب حنان

الاهداء

اسجد أولا بخشوع حمدا لله على توفيقه لنا في إتمام وانجاز هذا البحث المتواضع، راجين

منه أن ينفعنا بما علمنا ويزيدنا علما، فإن أصبنا فمن الله وإن أخطانا فمن أنفسنا .

إلى امرئ ما املك في هذا الوجود والداي الكريمين.

قال الله تعالى: { وَأَنْفُسٌ كَفَمَا بَنَاتٍ مِنَ الرَّحْمَةِ وَقُل رَّبِّ ارْحَمْهُمَا كَمَا رَبَّيَانِي

صَغِيرًا } صدق الله العظيم سورة الاسراء الآية 24

إلى أبي الذي كان سدي في هذه الحياة .

إلى أمي التي هي رمز المحبة ومنبع العطف والحنان.

إلى إخوتي الأعماء مصدر فخري مبروك وجهاد.

إلى مصدر فرحتي وحقيبة أسراري أخواتي: سعاد ، سلوى ، وسيلة ، عقيلة ، شيما.

و اوجه خالص حزني واشتياقي الى المغفورة لها ياذن الله اختي محبة وان يجعل الله قبرها

روضة من رياض الجنة ويدخلها فسيح جناته.

إلى براعم بيتنا اكرم ، عدي ، امجد .

إلى اميرتينا بيتنا ليان ، رانيا.

إلى صديقتي دربي عمال حنان .

إلى من ساعدنا من قريب او بعيد ولو بابتسامة.

حناشي كنزة

الفهرس

III	فهرس الأشكال
VI	فهرس الرموز
1	مقدمة عامة

الفصل الاول : عموميات حول الغرافين

2	1.1. اكتشاف الغرافين
3	2.1. تعريف الغرافين
4	3.1. بنية الغرافين
4	1.3.1. بنية البلورية الغرافين
6	2.3.1. البنية الالكترونية
7	4.1. مقارنة بين الغرافين والغرافيت
8	5.1. تقنيات إنتاج الغرافين
8	1.5.1. تقنية الترسيب الكيمائي لطور البخار CVD
9	2.5.1. تقنية التقشير الميكانيكي
10	3.5.1. فتح الانابيب النانوكربونية
10	4.5.1. تحويل أكسيد الغرافين
11	6.1. خصائص الغرافين
13	6.1. استخدامات في تطبيقات الغرافين

الفصل الثاني : خواص الالكترونية للغرافين

16	1.2. الهيكل الالكتروني
17	2.2. نموذج الربط المحكم
27	3.2. الكترونات ديراك عديمة الكتلة
29	4.2. معادلة ديراك عديمة الكتلة
31	5.2. كثافة الحالات DOS
33	6.2. حد هاملتون الفعال
34	1.6.2. حد الاستمرارية
37	7.2. النقل شبه الكلاسيكي لبولتزمان
38	8.2. نظرية لاندوار لنقل الالكتروني
40	9.2. تناقض كلاين

1.9.2. تناقض كلاين وفق الانفاق الوبية 40

الفصل الثالث : دراسة تأثير شكل الحدود على خواص الالكترونية

1.3. مغناطيسية الحدود 47

2.3. الحسابات 48

3.3. النتائج والمناقشة 51

4.3. دراسة النتائج 56

نتيجة عامة

نتيجة العامة 59

قائمة المصادر والمراجع

قائمة المصادر والمراجع 61

فهرس الأشكال

الصفحة	العنوان	الشكل
04	البنية العامة للجرافين	الشكل (1-1)
05	ابعاد الخلية للجرافين	الشكل (2-1)
06	ابعاد الخلية للجرافين في منطقة بريلون الاولى	الشكل (3-1)
07	البنية الالكترونية للجرافين	الشكل (4-1)
09	تقنية التفشير المايكرو ميكانيكية	الشكل (5-1)
10	تشكل الجرافين من الانابيب النانوكربونية	الشكل (6-1)
11	تقنية تحويل اكسيد الجرافين	الشكل (7-1)
14	نظرة عامة حول تطبيقات الجرافين	الشكل (8-1)
16	تخطيطي يشرح التهجين sp^2 في الجرافين	الشكل (1-2)
17	تخطيطي يوضح تكوين الروابط σ و π في الجرافين	الشكل (2-2)
21	التركيب البلوري على شكل قرص العسل من الجرافين أحادي الطبقة.	الشكل (3-2)
26	هيكل النطاق منخفض الطاقة من الجرافين احادي الطبقة	الشكل (4-2)
27	مقطع من هيكل النطاق منخفض الطاقة من الجرافين احادي الطبقة.	الشكل (5-2)
29	يمثل قرص العسل ومنطقة بريلون الاولى ومخروط ديراك	الشكل (6-2)
32	يمثل مخروط ديراك	الشكل (7-2)
33	جزء من الجرافين بطول وعرض	الشكل (8-2)
36	هيكل نطاق الجرافين	الشكل (9-2)
42	الالكترن والبوزيترون على الجانبين الايسر والأيمن من الجدار	الشكل (10-2)
45	قطعة الجرافين تأخذ احد الاشكال الرئيسية Zigzag او Armchair	الشكل (1-3)
46	قطعة الجرافين اخذ النمط Armchair	الشكل (2-3)

46	الغرافين اخذ النمط Zigzag	الشكل (3-3)
47	رسم تخطيطي للتفاعل RKKY بدلالة K_{Fr}	الشكل (4-3)
48	رسم تخطيطي يوضح تقسم حدود قطعة الغرافين الى قطع صغيرة النمط من Z و A أطوال عشوائية I_Z و I_A	الشكل (5-3)
49	الشكل (6-3): رسم تخطيطي يوضح دوائر تساوي التفاعل في الشكل شبه الدائري بسبب التفاعل RKKY في حالة نوع واحد Z او A .	الشكل (6-3)
51	توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 2$ و اعداد عشوائية Random[1 – 500]	الشكل (7-3)
51	توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 1.75$ و اعداد عشوائية Random[1 – 500]	الشكل (8-3)
52	توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 1.5$ و اعداد عشوائية Random[1 – 500]	الشكل (9-3)
52	توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 1.25$ و اعداد عشوائية Random[1 – 500]	الشكل (10-3)
53	توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 1.125$ و اعداد عشوائية Random[1 – 500]	الشكل (11-3)
53	توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 1$ و اعداد عشوائية Random[1 – 500]	الشكل (12-3)
54	توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 0.75$ و اعداد عشوائية Random[1 – 500]	الشكل (13-3)

54	الشكل (14-3) توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 0.5$ و اعداد عشوائية Random[1 – 500]
55	الشكل (15-3) توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 0.25$ و اعداد عشوائية Random[1 – 500]
55	الشكل (16-3) توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 0.125$ و اعداد عشوائية Random[1 – 500]
56	الشكل (17-3) توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 0.0125$ و اعداد عشوائية Random[1 – 500]
57	الشكل (18-3) الشكل (18-3): رسم تخطيطي لتغير عدد الدوائر المتساوية لطاقه CCN بدلالة نصف القطر R

الرموز

الرمز	التسمية
$\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3$	اشعة الاساسية للشبكة الحقيقية.
$\vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2 \cdot \vec{b}_3$	اشعة الاساسية للشبكة المتبادلة
$ \Phi(\vec{k}, \vec{r})\rangle$	دوال بلوخ
a_{cc}	المسافة C-C في الانابيب النانوية
R	المتجهات الشبكية للفضاء الحقيقي لذرات
C_{jl}	معاملات النشر
H	هاميلتوني
HC	المرافق الهرميتي
$H_i L$	عناصر مصفوفة النقل المتكاملة
ψ_j	متجه العمود
t_0	سعة احتمال الالكترونات
H_{AA}	مصفوفة قطرية
E_P	طاقة المميزة للروابط π
K	متجه الموجة
E_+	نطاق التوصيل
E_-	نطاق التكافؤ
$(b_{j\sigma}^\dagger, b_{j\sigma}) \cdot (a_{i\sigma}^\dagger, a_{i\sigma})$	عوامل الانشاء للمواقع A و B
V_F	سرعة فرمي لالكترونات
C	سرعة الضوء
τ°	مصفوفة الوحدة
$F_A^\pm(\mathbf{r})$	الدوال القريبة من نقطة K لموقع A
$F_B^\pm(\mathbf{r})$	دوال القريبة من نقطة K لموقع B
Dos	كثافة الحالات
F_q	تشتت الطاقة المكافئ
δ_i	مصفوفات باولي
$\tau_{D\alpha}^z$	دوران الاعلى للمواقع A و B
$V(k)$	سرعة الالكترون
m^*	الكتلة الفعالة لالكترون في البلورة
I_L	تيار الالكترون في شريط بالستي
\vec{E}	حقل كهربائي خارجي
\vec{M}	المغطة
H_{RKKY}	هاميلتوني تفاعل RKKY
$J(\mathbf{r})$	دالة تفاعل التبادل
\vec{S}_e	سبين الالكترون في نقطة كيفية على سطح الغرافين داخل الحدود

مقدمة عامة

في بداية القرن العشرين حدثت ثورة في فهم فيزياء المواد كان هذا راجع بشكل رئيسي الى استخدام الاشعة السينية في علم البلورات واستخدام ميكانيكا الكم المكتشفة حديثا في علم المواد، كانت هذه هي المرة الاولى التي يفهم فيها البشرية البنية الداخلية للمواد في ثلاثة ابعاد، مما يسمح لدراسة هندسة خصائص المواد، وبفضل الاكتشافات والتطورات استطاع العالمان أندريه جيم و كوستيا نوفوسيلوف سنة 2004 من اكتشاف الغرافين وذلك من خلال عزل ورقة الغرافين عن الغرافيت باستخدام تقنية الشريط اللاصق . تتكون ورقة الغرافين من ذرات الكربون المترتبة في شبكة سداسية الابعاد التي لها خصائص الكترونية وميكانيكية ادت الى اهتمام كل من المجتمع العلمي والصناعي بها ، ولذلك فنحن نهدف من خلال هذا العمل الى دراسة تأثير الحواف على الخصائص الالكترونية للغرافين ، وقد قمنا بتقسيم هذه المذكرة الى ثلاثة فصول كما يلي :

في حين قدمنا في الفصل الاول الى عموميات حول الغرافين ، حيث تطرقنا الى تعريف الغرافين وبنيته البلورية والالكترونية ، بالإضافة الى عرض تقنيات انتاج الغرافين وتطبيقات في المجالات المختلفة.

اما في الفصل الثاني قمنا باختصار اهم الحسابات النظرية لأهم الخصائص الالكترونية للغرافين وخاصة مخاريط ديراك حيث يظهر المفعول النسبي لفرميونات ديراك.

وفي الأخير قمنا في الفصل الثالث بدراسة تأثير شكل الحواف من النمطين Zigzag و Armchair من خلال انتقال الخواص المغناطيسية للحواف عن طريق التفاعل (RKKY) وبسبب التعقيد الهندسي للمسألة فقد استخدمنا التناظر شبه الدائري و بسيط . وقد ظهرت العشوائية في ترتيب القطع من النمط Z و A وهذا ما دعنا الى استخدام متغيرات عشوائية Random في الحسابات قمنا باستخدام برنامج Mathematica باستخراج توزيع كثافة طاقة التفاعل على سطح الغرافين. في الاخير قمنا بمحاولة بتفسير هذه النتائج ومدى تأثيرها على الخواص الالكترونية للغرافين .

الفصل الأول:

عموميات

حول الخرافيين

اصبح الغرافين (graphene) مادة فريدة من نوعها نظرًا لخصائصه غير العادية . مثل التوصيل الكهربائي والحراري والتوصيل البصري بعض الخواص الميكانيكيةالخ ، ومن ثم فقد وجد اهتماما غير مسبوق بالبحث والصناعة. لاستخدامه كمواد الكترونية وضوئية من الجيل التالي ، واعتبر الغرافين مادة اكااديمية حيث تم التعامل مع هيكله احادي الطبقة المثالي من ذرات الكربون على انه نموذج نظري ، لوصف خصائص المواد المختلفة القائمة على الكربون سوف نتطرق في هذا الفصل لدراسة معلومات عامة حول الغرافين واستخداماته وكذا تطبيقاته في مختلف المجالات.

1.1. اكتشاف الغرافين :

لم تكن الاثارة وراء اكتشاف الغرافين بسبب خصائصه او هيكله فقد كان العلماء يعرفونه . لان الغرافين سيكون موصلا في وقت مبكر 1939 حيث تم موصلية الغرافين ، مما جعل الغرافين مثيرا في البداية هو مقدار توصليه اكثر مما كان متوقع . يعد الغرافين موصلا اكثر بعشرات مرات من الحديد النقي وحوالي مرة ونصف موصلة للفضة ثاني اكثر المعادن موصلة للكهرباء ، و لقد كان هيكل الغرافين معروفا منذ عشرينات القرن الماضي ولكن الاهتمام جاء في المشتقات والتأصيل . في ان الكربون يمكن ان يصنع الفوليرين والأنابيب النانوية الكربونية وهي من اقارب الغرافيت ، وقد تم اكتشاف هذه المواد ذات الصلة في الثمانيات من قرن الماضي. وأكدت الفرضية القائلة بان طبقة الجرافيت كانت الى حد ما غير مستقرة ومتفاعلة . ربما استخدم بعض النقاد اكتشاف الفوليرين والأنابيب كمؤشر على وجود الغرافين او عدم وجوده.

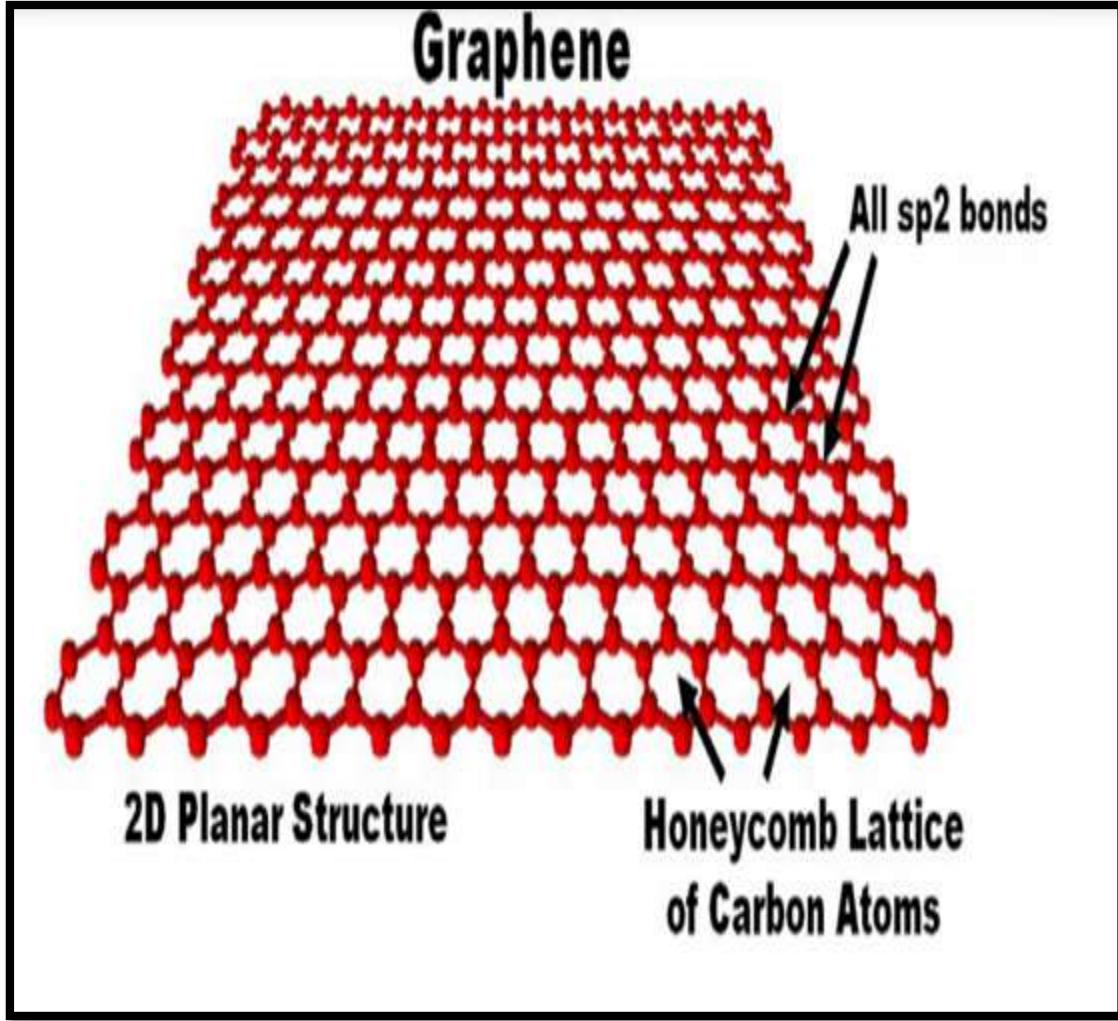
سنة 2004 في جامعة مانشستر قام العالمين كونستانتين نوفوسيلوف Konstantin Novoselov و أندريه جيم Andre geim ، بعزل الغرافين عن الغرافيت ، وذلك بسحب طبقات الغرافين عن الغرافيت باستخدام شريط لاصق ، في عملية تسمى الانقسام الميكانيكي او تقنية الشريط اللاصق ، وتم ذلك بنقل رقائق الغرافين الى طبقة رقيقة من ثاني اكسيد السيلكون . في عام 2010 تحصل كل من العالمين على جائر نوبل في الفيزياء لقيامهما بتجارب على بنية الغرافين . وذلك لاكتشاف خصائص وإمكانيات المادة الجديدة . و بذلك اصبح الغرافين اهم موضوع في علم المواد وذلك بتميزه عن بقية المعادن كالألماس و النحاس ويتوقع مستقبلا ان تتمكن الترانزستورات المركبة من الغرافين من العمل بسرعة اكبر و التأقلم مع درجة حرارة اعلى من رقاقات الكمبيوتر المستخدمة حاليا [1] .

2.1. تعريف الجرافين:

يعرف الجرافين بأنه احد المواد المتأصلة للكربون ويعتبر مادة احادية الطبقة المستوية ذات التهجين من نوع sp^2 . فالجرافين هو بلورة ثنائية الابعاد (2D Bidimensionnel) ، و يتألف من ذرات الكربون النقية فقط التي تكون مرتبة في شبكة سداسية منتظمة متشابهة كيبوت النحل المتراسة او قرص العسل . فالجرافين يعد وحدة البناء الاساسية لمادة الجرافيت sp^3 وبنيته الالكترونية مختلفة عن بنية الجرافيت ، لان الجرافين هو احد المواد النانوكربونية [2].

عند تجمع العديد من مستويات الجرافين نحصل على مادة الجرافيت ثلاثي الابعاد ومتعددة الطبقات الموجودة في قلم الرصاص . فنتحصل على الجرافين من الجرافيت بفصل مستويات متباعدة عن بعضها البعض، ان القوى التي تربط هذه المستويات هي قوة فان دير فال الضعيفة التي تعطي التماسك والالتصاق لصفوف الجرافين عديدة الطبقات ، و ترتبط ذرات الكربون في الطبقة الواحدة بروابط تساهمية مكونة حلقات سداسية من ذرات الكربون وتسمى الطبقة الواحدة منه الجرافين.

ورغم ذلك تعتبر احدى اقوى واخف المواد المعروفة ، وتعتبر من موصلات الكهرباء وكفاءتها ذات كفاءة النحاس ، وهي افضل موصل للحرارة على الاطلاق ، تكاد مادة الجرافين تكون شفافة تماما ، ورغم ذلك فهي ايضا كثيفة للغاية لدرجة عدم سماحها بعبور اصغر ذرة للهيليوم من خلال هيكلها السداسي .



الشكل (1-1): البنية العامة لجرافين [3]

3.1. بنية الجرافين:

1.3.1. بنية البلورية الجرافين :

ان مادة الجرافين ثنائي الابعاد ذات البنية البلورية سداسية الشكل ، وتتألف من ذرات كربون مترابطة ومتراصة ، تظهر على شكل خلية نحل او قرص عسل تحتوي خلية الوحدة في الجرافين على ذرتين A و B حيث تقدر المسافة $a_{cc} = 1.42A^\circ$ ، ويتكون من شبكتين ثلاثيتين متطابقتين وله متجه الشبكات في الفضاء كما موضح في الشكل (1- 2) . [4]

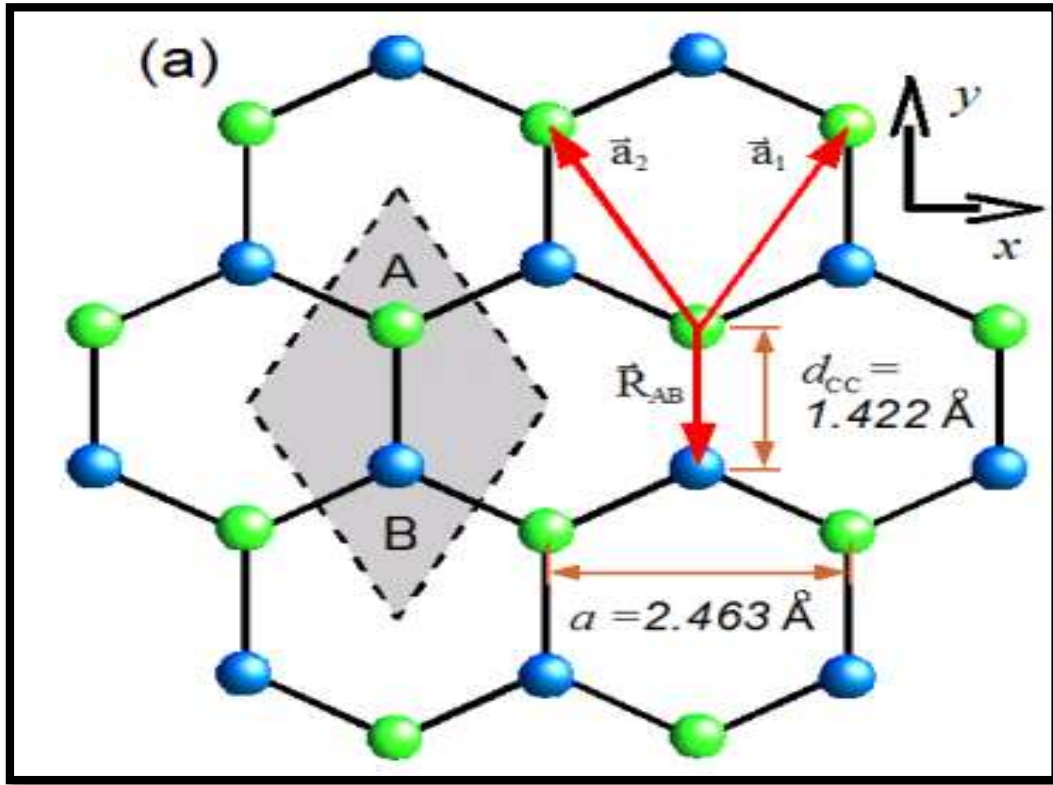
لحساب كل a_1 و a_2 من نستخدم العلاقتين التاليتين :

$$\begin{cases} a_1 = \frac{a_{c-c}}{2} (3, \sqrt{3}) \\ a_2 = \frac{a_{c-c}}{2} (3, -\sqrt{3}) \end{cases} \dots \dots \dots (1.1)$$

ثابت الشبكة في المستوى كما موضح في العلاقة التالية

$$\begin{cases} a = \|\vec{a}_1\| = \|\vec{a}_2\| \\ a = \sqrt{3}a = 2.456\text{Å} \end{cases} \dots \dots \dots (2.1)$$

كما موضح في الشكل التالي :



الشكل (1- 2): ابعاد الخلية للجرافين [5]

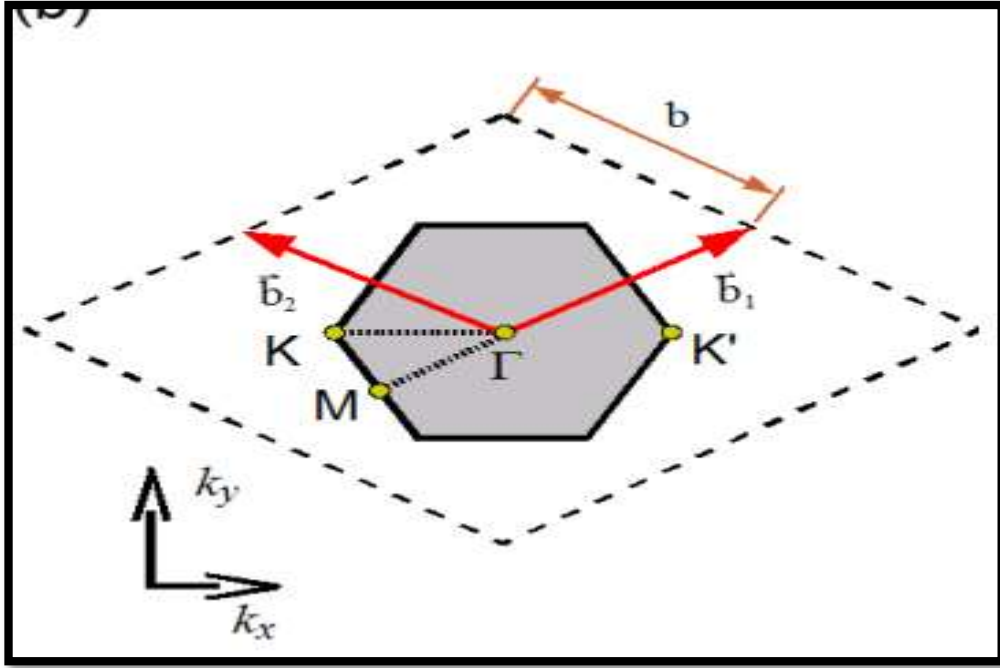
في الفضاء المتبادل يتم تعريف المتجهين الأساسيين كما موضح في العلاقة التالية

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a_{c-c}} (1, \sqrt{3}) \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a_{c-c}} (1 - \sqrt{3}) \end{cases} \dots \dots \dots (3.1)$$

يوجد عندنا متجه الوحدة K و K' كما موضح في العلاقة التالية :

$$\begin{cases} K = \left(\frac{2\pi}{3a_{c-c}}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_{c-c}} \right) \\ K' = \left(\frac{2\pi}{3a_{c-c}}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_{c-c}} \right) \end{cases} \dots \dots \dots (4.1)$$

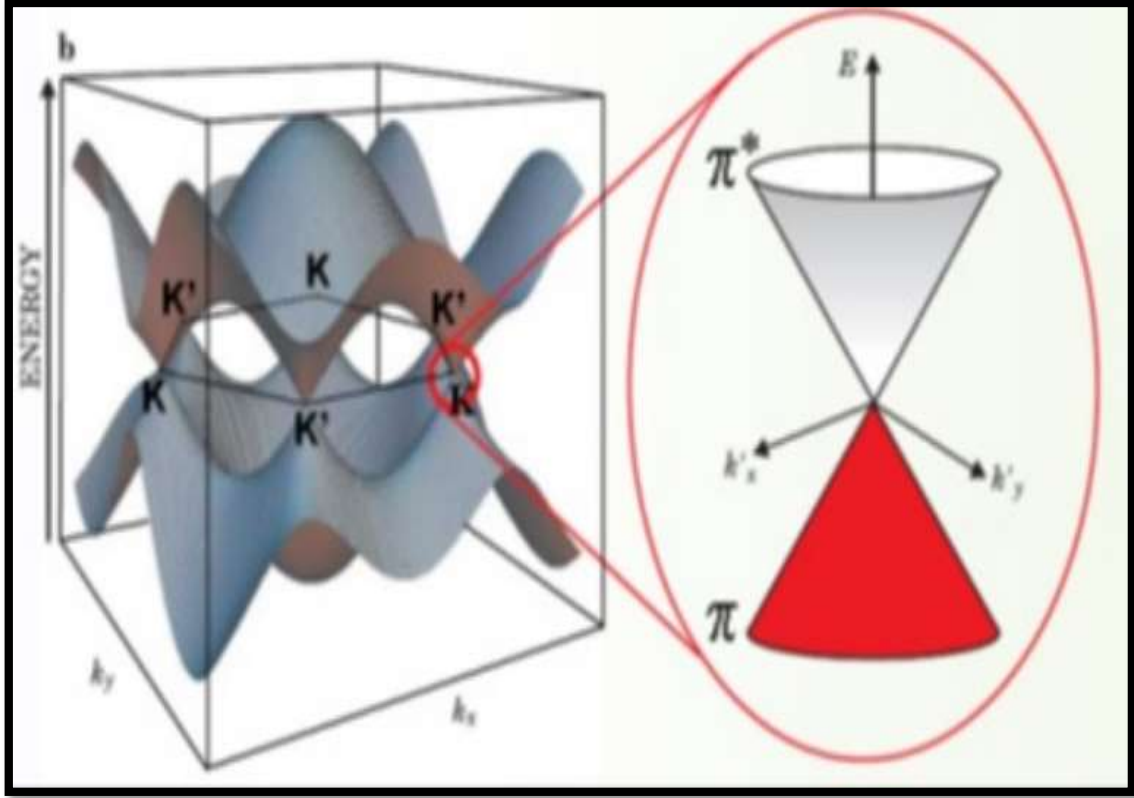
لدنيا الشكل التالي يمثل ابعاد الخلية في وحدة الجرافين ومنطقة بريلووان الاولى .



الشكل (1- 3): ابعاد الخلية للجرافين في منطقة بريلووان الاولى [5]

2.3.1. البنية الالكترونية :

ان التشكل الالكتروني له اربعة الكترونات تكافؤ في الجرافين اثنين في المدار S واثنين في المدار P من ذرة الكربون C نوع التهجين SP^2 . ويتم توجيه هذه المدارات بحوالي 120° كما يتم ربط ذرات الكربون بروابط قوية σ و σ^* التي تكون مسؤولة عن تماسك الشبكة وروابط π و π^* ، ان التركيب الالكتروني المميز للجرافين يعطيه خصائص الكترونية مهمة. حيث ان حركية الالكترون في الجرافين يمكن ان تصل الى قيمة $U = 23000(cm^2/vs)$ عند درجة حرارة الغرفة في الجرافين المنتج [4].



الشكل (1- 4) : البنية الالكترونية للجرافين [6].

4.1. مقارنة بين الجرافين والجرافيت:

الجدول التالي يوضح الفرق بين الجرافين والجرافيت:

الاسم	الجرافيت (graphite)	الجرافين (graphene)
تعريف	الجرافيت هو المادة الكربونية المرنة والجرافيت تاصل ثابت من الكربون له هيكل بلوري وشكل الفحم	طبقة واحدة من طبقات متعددة في الجرافيت
نظام	ثلاثي الأبعاد لا نهائية مصنوعة من طبقات مرصوفة تتألف من ذرات الكربون sp ² المهجنة	طبقة ثنائية الأبعاد لانهاية تتألف من ذرات الكربون sp ² المهجنة

الكربون	تتراكم من الكربون يحتوي على عدد كبير من صفائح الكربون	لوح كربون واحد من الغرافيت
قوة	هش	اقوي مادة تم اختبارها من الفولاذ
اللون	يظهر باللون الاسود	شبه شفافة
رابطة كيميائية	لديه اربع روابط بما في ذلك ثلاث روابط ستكون حول ذرة كربون ورابطة واحدة موجهة خارج المستوى	مرتبطن ببعضهم البعض عن طريق روابط تساهمية ذرة كربون واحدة بها ثلاث روابط تساهمية حولها ويوجد الكترولون حر
الاستخدامات	تستخدم في اقلام الرصاص و الحرارية والبطاريات وصناعة الفولاذ والجرافيت الممتد وبطانات الفرامل	تستخدم في انتاج الانابيب النانوية الكربونية والخلايا الشمسية و في الترانزستورات ذات تردد عالي

5.1. تقنيات إنتاج الغرافين:

يمكن انتاج مادة الغرافين باستخدام مجموعة متنوعة من التقنيات الحديثة نذكر منها :

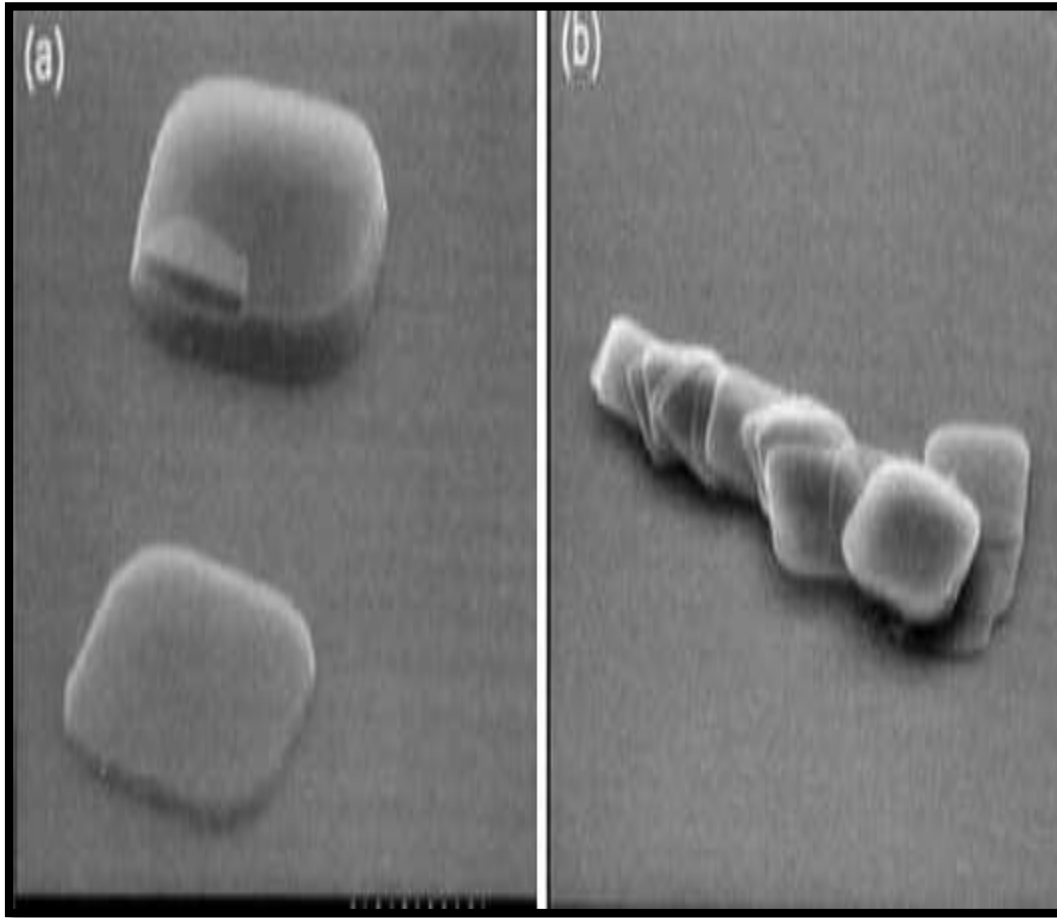
1.5.1. تقنية الترسيب الكيميائي لطور البخار CVD chemical vapor depositio:

يتم انتاج الغرافين بهذه التقنية بكميات كبيرة ، وهذا يعتمد على مبدأ الترسيب الكيميائي لطور الغازي على شكل طبقة صلبة من الطور الغازي نتيجة التفاعل كيميائي على سطح الركيزة ، وتجري هذه العملية بتعويض رقاقة (الركيزة) الى مركب او عدة مركبات ، والتي تتفكك لتتفاعل على سطح الركيزة ، و في هذه التقنية يتم تسخين المعدن المراد عمل الترسيب عليه (النحاس أو النيكل) إلى درجات عالية ثم إمرار غاز يحتوي على الكربون فيترسب الغرافين على سطح المعدن ثم نستخدم بوليميرا ونقوم بنفس ما قمنا بعمله في حالة التقشير الميكانيكي وهي طريقة لانتزاع الغرافين من سطح المعدن ونقل الغرافين من البوليمير إلى سطح الركيزة ثم يتم ازلتها بعد تشكل الغرافين على سطحها

وينقل الغرافين الى معدن اخر عبر مراحل معينة فهذه التقنية ، كما تكون الطبقات المنتجة الغرافين ذات جودة عالية [7].

2.5.1. تقنية التقشير الميكانيكي Exfoliation micromécanique:

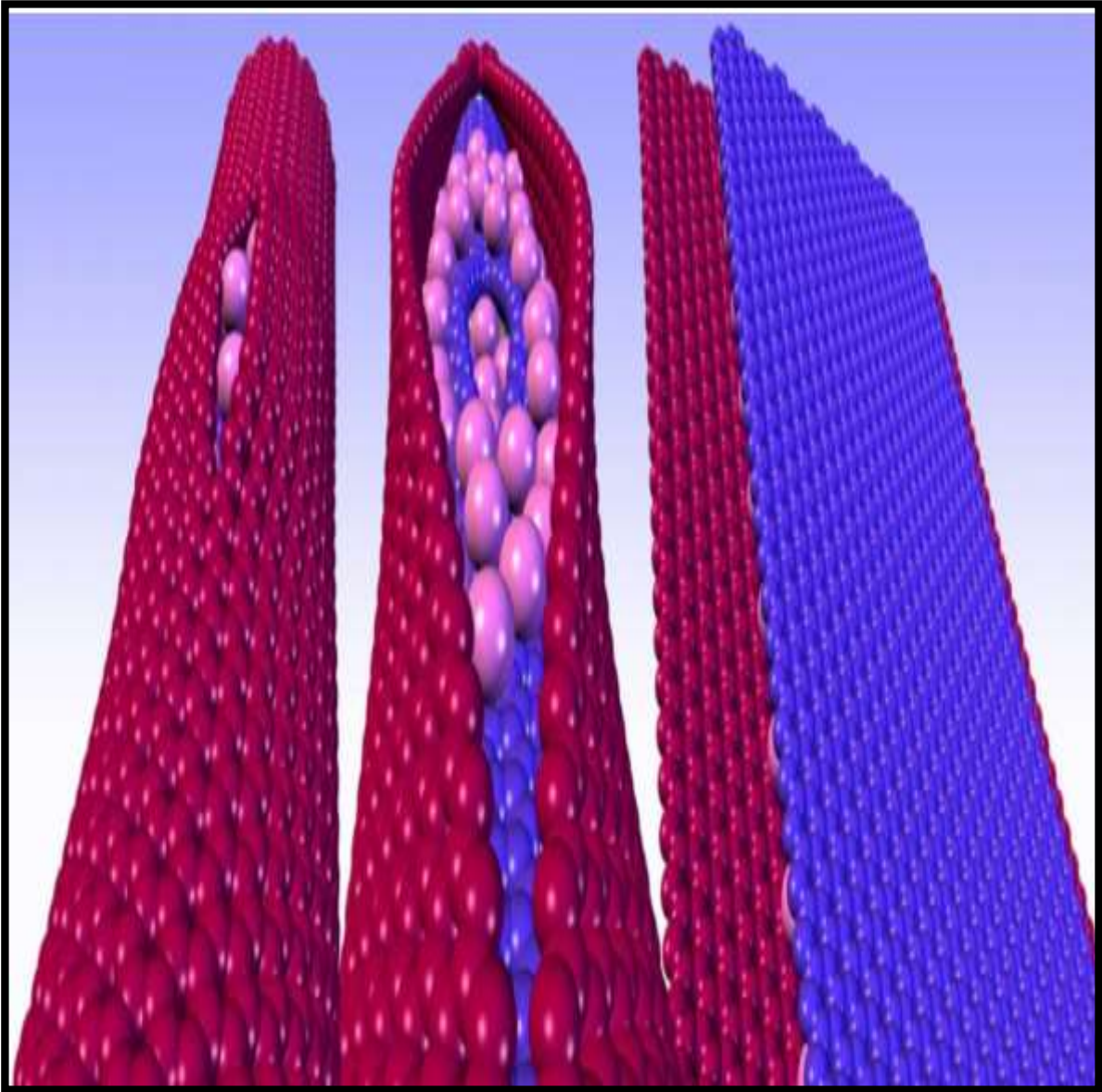
في 2004 تم انتاج الغرافين من الغرافيت وذلك بتقنية من طرف Ruoff. all بأبسط الطرق المستعملة [8]، وهي طريقة الشريط اللاصق حيث انها لا تحتاج الى حرارة عالية . كما انها تقوم بحد من قوة فاندرفالز الضعيفة بين الصفائح وذلك بكسر الروابط بين المستويات لان القوة بين الذرات اكبر من القوة بين المستويات ، مما جعل طبقات الغرافين المنتجة عالية الجودة . ثم تم إعادة تقشير الطبقات الموجودة على سطح الشريط اللاصق باستخدام شريط لاصق آخر المفرد ثم يتم نقل الغرافين على الركيزة substrate المناسبة لرؤيتها على الميكروسكوب وتلك الطريقة هي التي تم عزل الغرافين بواسطتها لأول مرة ، وهي تمتاز بسهولة وجود الغرافين الناتج ، وهكذا حتى يتم الحصول على الغرافين إلا ان العيب فيها انها تنتج كميات قليلة جدا من الغرافين [7] .



الشكل (1-5):تقنية التقشير الميكانيكي [8].

3.5.1. فتح الانابيب النانوكربونية (Ouverture de nanotubes de carbon):

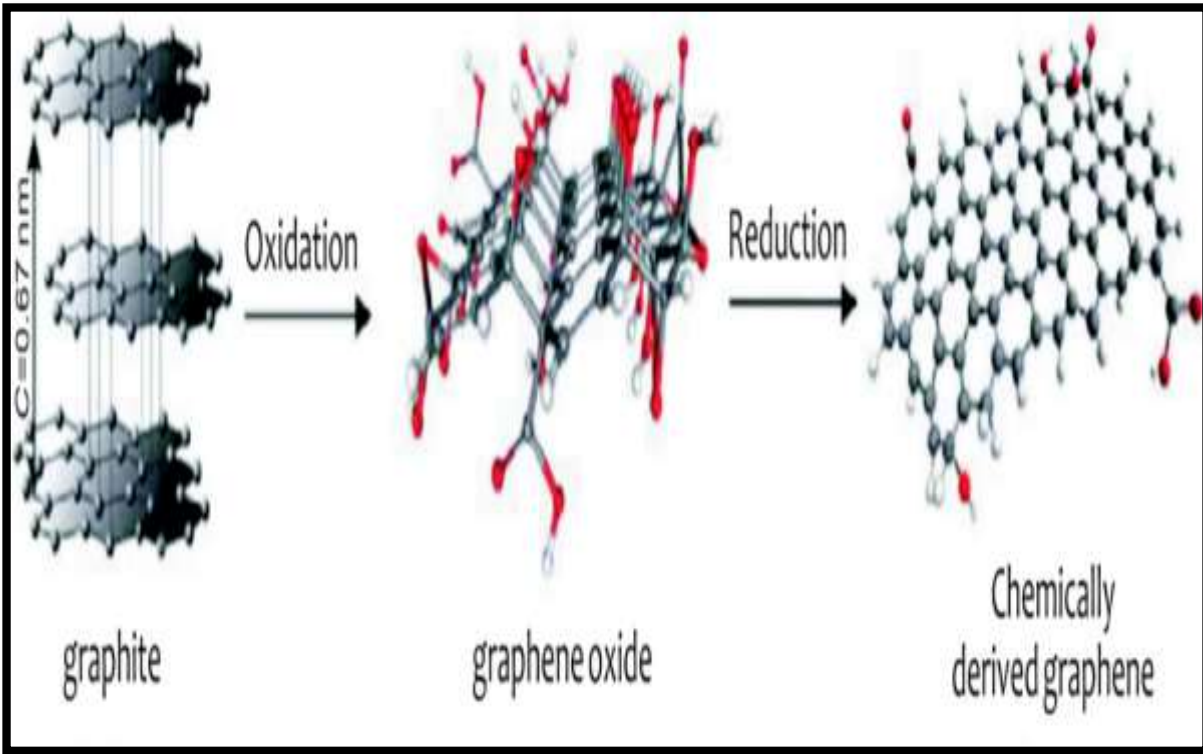
في هذه التقنية يتم فتح الانابيب النانوكربونية في انتاج الغرافين وذلك عن طريق اكسدة الانابيب في محلول بيرمنغنات البوتاسيوم (KMn_2O) في وسط حامض (H_2SO_4) حيث تضعف الروابط الكربونية وتتأكسد ايضا، ويحدث تفاعل بين جميع الروابط المزدوجة وبالتالي يفتح الانبوب النانو كربوني. وفي عام 2014 تم تصنيع الغرافين المقوى بأنابيب الكربون النانوية عن طريق طلاء الدوران وتصلب الأنابيب النانوية الكربونية الوظيفية ، و بذلك نحصل على كميات صغيرة جدا كما هو في الشكل التالي [9].



الشكل (1- 6) : تشكل الغرافين من الانابيب النانوكربونية [10].

4.5.1. تقنية تحويل أكسيد الجرافين :Réduction d'oxyde de Graphéne

قام Ruoff.all في 2006 باكتشاف تقنية جديدة منخفضة التكلفة ، تتمثل في أكسيد الجرافين وهو مادة ثلاثية الأبعاد متناهية الصغر . تتكون من طبقات الكربون المشتقة من أكسيد الجرافين [8] ، وتم في تلك الطريقة اختزال أكسيد الجرافين إلى جرافين ، وأكسيد الجرافين نفسه يتم إنتاجه من أكسيد الجرافيت والذي يمكن تحضيره بأكثر من طريقةٍ على سبيل المثال (بواسطة نزع الجرافيت في محلول حمض الكبريتيك وبيرمغنات البوتاسيوم)، وعن طريق الموجات فوق الصوتية يمكن تحويل أكسيد الجرافيت إلى أكسيد الجرافين أحادي الطبقة والذي يمكن تحويله إلى جرافين عن طريق اختزاله كيميائيًا أو حراريًا أو كهربائيًا ، ويتميز أكسيد الجرافين باستقراره الكيميائي والذوبان والانحلال في الماء حيث يتفكك بواسطة استخدام طريقة أكسدة هامرز تعتبر من الطرق الكيميائية التي يمكن استخدامها لتقليل مخاطر الانفجار وقت التفاعل ، وذلك عن طريق إضافة بيرمنغنات البوتاسيوم ($KMnO_4$) إلى مزيج من الجرافيت ونترات الصوديوم ($NaNO_3$) مع حامض الكبريتيك (H_2SO_4) عن درجة حرارة محددة لمدة ساعتين 2h. [7].



الشكل (1-7):تقنية تحويل أكسيد الجرافين [11]

6.1 . خصائص الغرافين:

يتميز الغرافين بوجود عدة خصائص ومزايا استثنائية هامة . مما اثار ذلك اهتمام الباحثين والصناعيين ، لإيجاد تطبيقات واسعة له في عدة مجالات منها الالكترونيات والفيزياء والكيمياء وعلم المواد خاصة نذكر منها :

- ◆ بنية الغرافين ثنائية الابعاد إلا انها مادة استثنائية خارقة للعادة وسريعة الصنع . [12]
- ◆ وحدة قياس سمك الغرافين هي رتبة النانومتر (nm) لأنها طبقة رقيقة جدا ومرنة وشفافة . [13]
- ◆ معدل امتصاص الضوء لطبقة واحدة من الغرافين 2.3% [14]، لضوء ذو الطول الموجي 550nm ، الغرافين جزء صغير يعكس الضوء المرئي المتساقط عليه لذلك يعتبر مادة شفافة وتقدر شفافيته 79.9.
- ◆ حركية الالكترونات في الغرافين تفوق كثيرا حركيتها في السيلسيوم (Si)، الذي كان العنصر الأفضل ناقلية على الاطلاق قبل اكتشاف الغرافين[15].
- ◆ الموصلية الكهربائية للغرافين أفضل من موصلية النحاس بحوالي 13 ضعف تقريبا ، حيث يسمح الترتيب الذري الفريد لذرات الكربون بسهولة وسرعة انتقال الإلكترونات فيه دون تشتت. وبالتالي يوفر طاقة عادةً ما تضيع في الموصلات الأخرى .
- ◆ الروابط الكيميائية بين ذرات الكربون المشكلة للغرافين قوية جدا ، فهي روابط تساهمية او تكافؤية مما جعلها تمتاز بالمتانة و الصلابة [16]
- ◆ الغرافين مادة قوية 200 مرة من الفولاذ و النحاس .
- ◆ يعود اكتشاف الناقلية الكهربائية للغرافين للعالمين كوستيا ونوفوسيلوف و اندريه جيم حيث تقدر بقيمة $7200(S/M)$ وكذلك الناقلية الحرارية ما يقارب (4.48 ± 0.48)
- ◆ اللمعان عنصر مشترك بين مادتي الغرافين و الغرافيت وهو مصدر الاساس لتكوين قلم الرصاص. [17]
- ◆ طبقات الغرافين ثنائية البعد خالية من العيوب والشوائب وهي ذات جودة عالية[18].

6.1. استخدامات الغرافين:

لقد اثار الغرافين اهتمام الباحثين والصناعيين من حيث خصائصه المتنوعة واستخداماته المختلفة في عدة تطبيقات نذكر منها [19]:

- ◆ يعتبر الغرافين من المواد الاكثر اهمية فقد استخدم في تطبيقات منها الهندسيات الكهربائية والميكانيكية والالكترونيات الدقيقة .
- ◆ يستخدم لتحلية المياه ذات التكلفة المنخفضة حيث أعدت أغشية باستخدام أكسيد الغرافين لتحلية مياه البحر من الجسيمات الضارة والغازات بتكلفة أقل من التقنيات التقليدية .
- ◆ استخدام الترانسورات ذات التردد العالي مع الغرافين نظرا لسرعة العالية للالكترونيات مقارنة مع الكترونات السيلكون .
- ◆ يستخدم الغرافين كمادة من اقوي وابرز المواد التكنولوجية بعد السيلكون
- ◆ يستخدم الغرافين في اجهزة الاستشعار عن بعد باستعمال قاعدة من الغرافين للكشف عن العلامات البيولوجية المتعلقة بالخلايا السرطانية وهذا في علم البيولوجيا .
- ◆ استخدم الغرافين في شاشات الهواتف الذكية وأجهزة التسجيل الصوتي .
- ◆ لقد استخدم الغرافين في صنع الخلايا الشمسية الرقيقة والكهربائية و الديودات المضيئة .
- ◆ استخدم الغرافين في شرائح حاسوبية ضوئية عالية السرعة تعمل بالضوء بدل الكهرباء.
- ◆ يمكن استخدام بطاريات البوليمرات الغرافينية التي تسمح للسيارات الكهربائية بالسير لمدة 80 كلم
- ◆ يستخدم في صنع الطائرات لكونه مادة خفيفة ذات المتانة او الصلابة العالية .



الشكل (1-8): نظرة عامة حول تطبيقات الغرافين [20]

الفصل الثاني:

الخواص الالكترونية

للغرافين

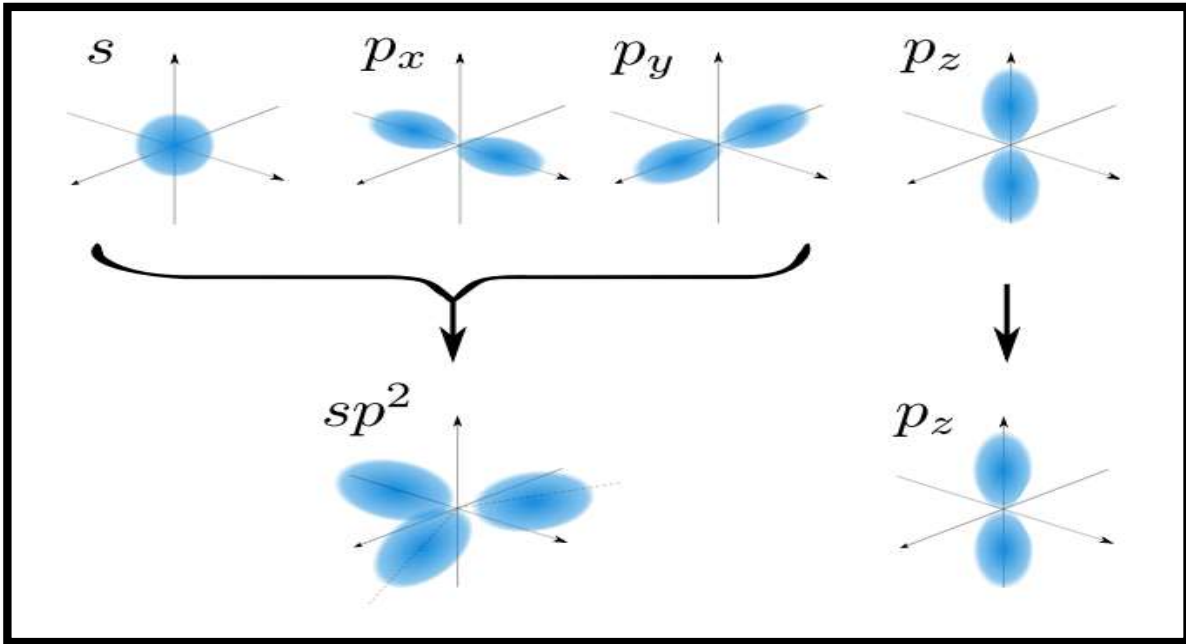
الفصل الثاني : الخواص الالكترونية للغرافين

في الاونة الاخيرة تحول الكثير من الاهتمام الى الخصائص الهيكلية و الالكترونية للمواد القائمة على الكربون . في الوقت الحاضر على وجه الخصوص يعد الغرافين اهم الموضوعات في الفيزياء المادة المكثفة وعلوم المواد . هذا لان الغرافين لا يمتلك فقط خصائص غير عادية فيما يتعلق بالقوة الميكانيكية الشديدة والتوصيل الحراري وأفلام ثنائية الابعاد.

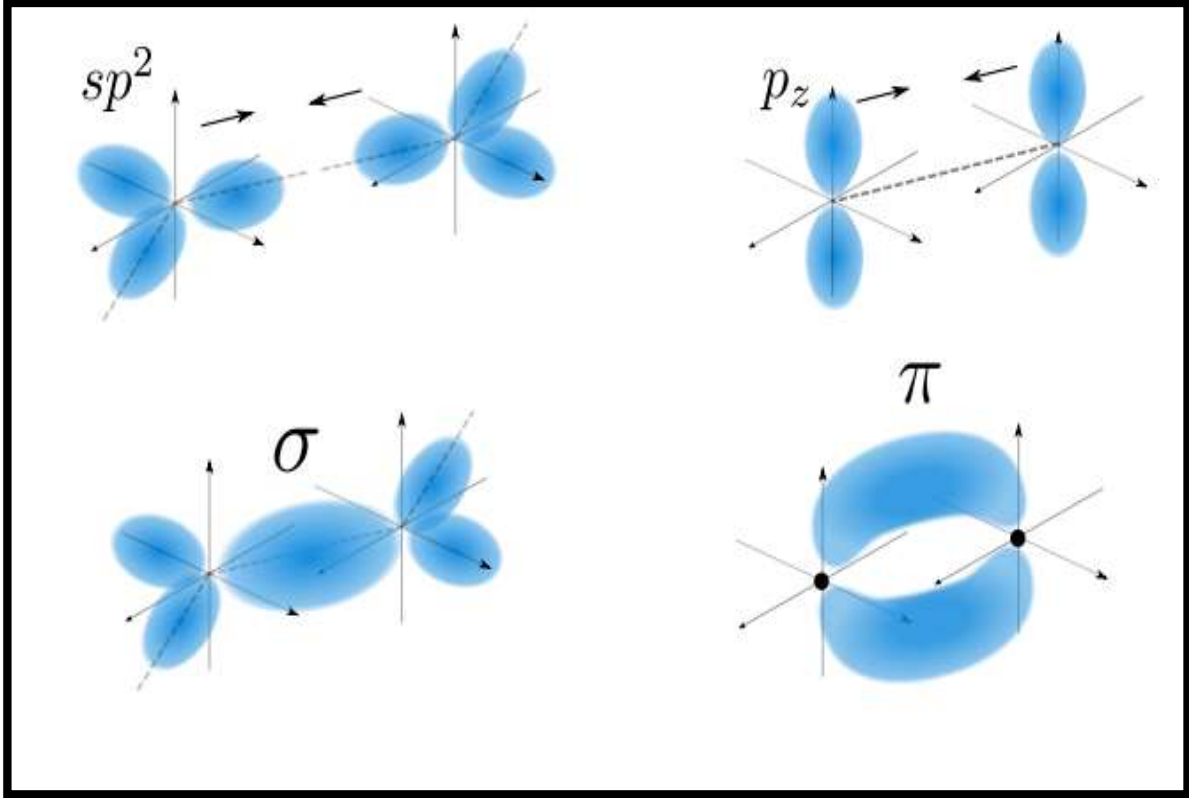
لكن ايضا يمتلك خصائص الالكترونية غريبة مثل جسيمات ديراك ذات التشنت الخطي وفجوة طاقة النقل ومعامل امتصاص الاحتواء تعني هذه الخصائص الفريدة انه يمكن ألا يكون له مجموعة واسعة من الاستخدامات.

1.2. الهيكل الالكتروني :

الكربون هو المكون الاساسي للغرافين حيث تحتوي كل ذرة كربون على ستة الكترونات . في حالة الغرافين الأرضية الذرية ، وتوزيع الالكترونات الستة في التكوين $1S^22S^22P^2$. كما يملا الكترونان الغلاف الداخلي $1S^2$ ، وهو قريب من النواة و لا تشارك هذه الالكترونات في التفاعل الكيميائي او في خصائص النقل ، تشغل الالكترونات الاربعة المتبقية الغلاف الخارجي في وجود ذرات اخرى . تميل ذرة الكربون الى تكوين روابط تساهمية مع جيرانها الأقرب وعندما تتفاعل ذرة الكربون مع جيرانها الاقرب تتجهن المدارات الثلاثة S ، P_x مشكلة بذلك الروابط σ في حين تتداخل المدارات P_z لتشكل الروابط π . [21]



الشكل(1-2) : تخطيطي يشرح التهجين sp^2 في الغرافين [21]



الشكل (2-2) : تخطيطي يوضح تكوين الروابط π و σ في الغرافين [21]

2.2. نموذج الربط المحكم:

هو أسلوب يستخدم لحساب هيكل النطاق الإلكتروني باستخدام مجموعة تقريبيه من دوال الموجة . وتعتمد طريقة الربط المحكم على نظرية المدارات الذرية (LCAO). ومصطلح الربط المحكم يعني ان الالكترونات في المواد الصلبة مرتبطة بإحكام بالذرة التي تنتمي اليها [22].

نبدأ بتقديم وصف عام لنموذج الربط المحكم ذي مدارات ذرية n في وحدة الخلية المسمي بالموقع $j=1 \dots n$. حيث يمكن كتابة النموذج باستخدام دوال بلوخ المختلفة $\phi_j(k, r)$ التي تعتمد على المتجه الموضع r ومتجه الموجة k [23]. كما موضح في العلاقة التالية:

$$\phi_j(k, r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N e^{ikR_{ji}} \phi_j(r - R_{ji}) \dots \dots \dots (1.2)$$

R يشير الي موضع المدار في خلية الوحدة بشكل عام يتم اعطاء دالة الموجة الالكترونية كما موضح في العلاقة التالية :

$$\Psi_j(k, r) = \sum_{l=1}^n C_{jl}(k) \Phi_l(k, r) \dots \dots \dots (2.2)$$

حيث C_{jl} هي معاملات النشر يتم اعطاء الطاقة $E_j(k)$ من النطاق z بواسطة العلاقة التالية :

$$E_j(k) = \frac{\langle \psi_j | H | \psi_j \rangle}{\langle \psi_j | \psi_j \rangle} \dots \dots \dots (3.2)$$

حيث ان H هو هاملتونيا.

استبدال تمديد دالة الموجة في الطاقة يعطي بالعلاقة التالية :

$$E_j(k) = \frac{\sum_{il}^n C_{ji}^* C_{jl} \langle \phi_i | H | \phi_l \rangle}{\sum_{il}^n C_{ji}^* C_{jl} \langle \phi_i | \phi_l \rangle} \dots \dots \dots (4.2)$$

تصبح لدينا العلاقة التالية :

$$E_j(k) = \frac{\sum_{il}^n H_{il} c_{ji}^* c_{jl}}{\sum_{il}^n S_{il} c_{ji}^* c_{jl}} \dots \dots \dots (5.2)$$

حيث يتم تعريف عناصر المصفوفة المتكاملة H_{il} بالعلاقة التالية :

$$H_{il} = \langle \phi_i | H | \phi_l \rangle \dots \dots \dots (6.2)$$

وتداخل عناصر المصفوفة المتكاملة S بواسطة العلاقة التالية :

$$S_{il} = \langle \phi_i | \phi_l \rangle \dots \dots \dots (7.2)$$

نقوم بالبحث عن القيمة الصغرى للطاقة E_j فيما يتعلق بمعامل C_{jm}^* من خلال حساب المشتق كما هو

موضح في العلاقة التالية :

$$\frac{\partial E_j}{\partial C_{jm}^*} = \frac{\sum_l^n H_{ml} c_{jl}}{\sum_{ji}^n S_{il} c_{ji}^* c_{jl}} - \frac{\sum_{il}^n H_{il} c_{ji}^* c_{jl} \sum_l^n S_{ml} c_{jl}}{(\sum_{il}^n S_{il} c_{ji}^* c_{jl})^2} \dots \dots \dots (8.2)$$

حيث نقوم بوضع $\frac{\partial E_j}{\partial C_{jm}^*} = 0$ وحذف العامل المشترك $\sum_{il}^n S_{il} C_{ji}^* C_{jl}$ كما هو موضح في العلاقة

التالية :

$$\sum_{l=1}^n H_{ml} C_{jl} = E_j \sum_{l=1}^n S_{ml} C_{jl} \dots \dots \dots (9.2)$$

يمكن كتابة هذا في صورة معادلة مصفوفة. ونضع محدد المداريين لكل وحدة خلية $n=2$ ، ونقوم بتحديد القيم المحتملة لـ m ولقد تكون $(m = 1)$ او $(m = 2)$. وكما هو موضح في العلاقتين (10.2) و(11.2).

نفرض ان لدينا $m = 1$ كما موضح في العلاقة التالية :

$$\Rightarrow H_{11}C_{j1} + H_{12}C_{j2} = E_j(S_{11}C_{j1} + S_{12}C_{j2}) \dots \dots \dots (10.2)$$

ولدينا ايضا $m = 2$ كما موضح في العلاقة التالية :

$$\Rightarrow H_{21}C_{j1} + H_{22}C_{j2} = E_j(S_{21}C_{j1} + S_{22}C_{j2}) \dots \dots \dots (11.2)$$

ويمكننا دمج العلاقتين ((10.2) و (11.2)) في معادلة مصفوفة كما موضح في العلاقة التالية :

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{j1} \\ C_{j2} \end{pmatrix} = E_j \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{j1} \\ C_{j2} \end{pmatrix} \dots \dots \dots (12.2)$$

القيم العامة لـ n و تحديد H كمصفوفة نقل متكاملة ، و S كمصفوفة متكاملة متداخلة و ψ كمتجه عمود كما موضح العلاقة التالية :

$$\left[\begin{array}{l} H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \dots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \dots & H_{nn} \end{pmatrix} \\ S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \dots & S_{1n} \\ S_{21} & S_{22} & \dots & S_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{n1} & S_{n2} & \dots & S_{nn} \end{pmatrix} \dots \dots \dots (13.2) \\ \Psi_j = \begin{pmatrix} C_{j1} \\ C_{j2} \\ \vdots \\ C_{jn} \end{pmatrix} \end{array} \right.$$

وتكون لدينا العلاقة التالية :

$$H\Psi_j = E_j S\Psi_j \dots \dots \dots (14.2)$$

يمكن تحديد الطاقة E_j من خلال حل المعادلة كما موضح في العلاقة التالية :

$$\det(H - E_j S) = 0 \dots \dots \dots (15.2)$$

H مصفوفة النقل المتكاملة

S المصفوفة المتكاملة المتداخلة .

وهي معادلة من الدرجة الاولى عدد حلولها يساوي عدد المدرات الذرية القياسية لكل وحدة خلية. حيث يشير " \det " الى محدد المصفوفة و $E_j(k)$ يمثل حلول القيم الذاتية ، وهي علاقة تشتت للطاقات كدالة لمتجه الموجة k يتم رسم تشتت الطاقة هذا المقابل k في الاتجاهات عالية تناظر لمنطقة بريلون الاولى بالنسبة للجرافين [23].

تتكون الذرات لكل وحدة خلية من النوعين A و B مما يعني $a=2$ في هذه الحالة تكون كل من مصفوفة هاملتون ومصفوفة متكاملة متداخلة بعد 2×2 يمكن استبدال المعادلة (2.2) في المعادلتين ((6.2) و ((7.2) للحصول على H وعناصر المصفوفات S المصفوفة 2×2 هاملتون على النحو التالي كما موضح في العلاقة التالية :

$$H_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{ik(R_{Bj}-R_{Ai})} \langle \phi_A(r - R_{Ai}) | \hat{H} | \phi_B(r - R_{Bj}) \rangle \dots \dots \dots (16.2)$$

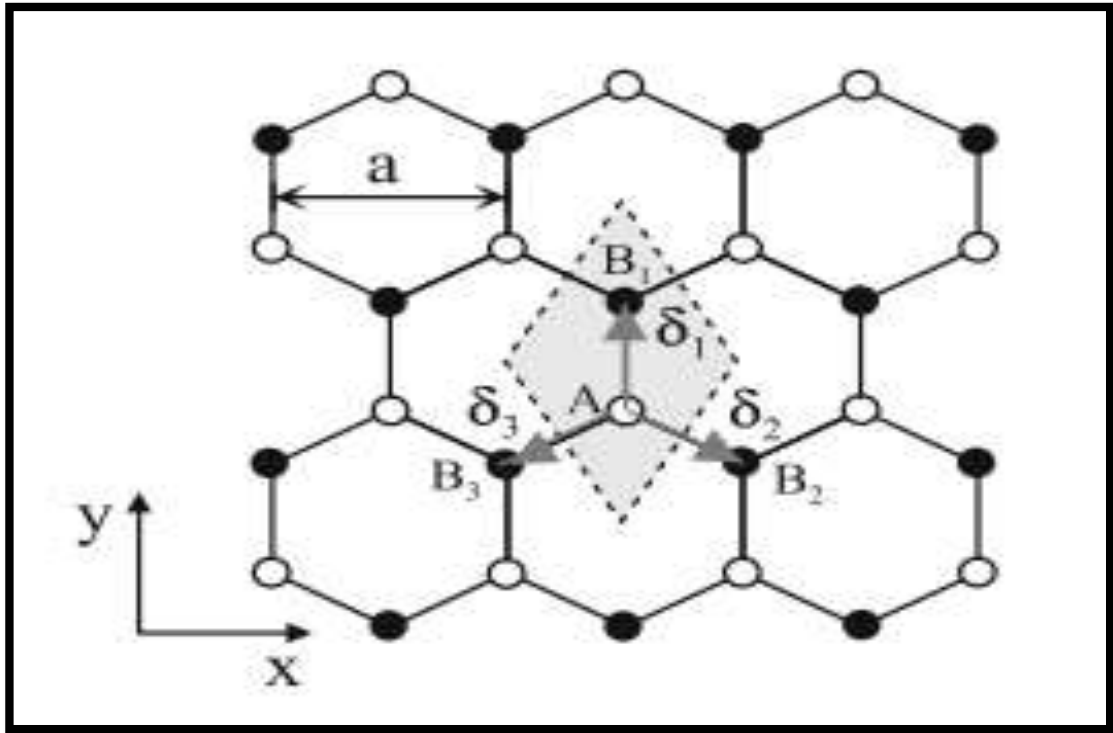
يصف عمليات التنقل بين مواقع الفرعية A و B ويحتوي على مجموع لجميع المواقع $B(j = 1 \dots \dots N)$ ومجموع لجميع المواقع $A(i = 1 \dots \dots N)$ في الموقع R_{Ai} في الموقع R_{Bj} .

لدينا t كما موضح في العلاقة التالية :

$$t = \langle \phi_A(r - R_{Ai}) | \hat{H} | \phi_B(r - R_{Bj}) \rangle \dots \dots \dots (17.2)$$

تمثل الطاقة اللازمة للإلكترون للقفز من الموقع A الى احد اقرب جواره (NN) والتي تكون دائما الموقع B يتم استبدال قيم $\delta_i = R_A - R_B$ التي تربط هذه الذرة من النوع A بأقرب ثلاث ذرات مجاورة لها من النوع B وبما ان t سلبي فمن الشائع التعبير عنها بمعامل موجب $\gamma_0 = -t$ تصبح لدينا العلاقة التالية :

$$\gamma_0 = -\langle \phi_A(r - R_{Ai}) | \hat{H} | \phi_B(r - R_{Bj}) \rangle \dots \dots \dots (18.2)$$



الشكل (3-2) : التركيب البلوري على شكل قرص العسل من الغرافين أحادي الطبقة [23].

يوضح الشكل التالي ماييلي :

التركيب البلوري على شكل قرص العسل من الغرافين أحادي الطبقة. حيث تشير الدوائر البيضاء والسوداء الى ذرات الكربون في المواقع A و B وتشير الخطوط المستقيمة الروابط بينهما المتجهات المواقع δ_1 و δ_2 و δ_3

ثم نكتب عنصر المصفوفة تكامل النقل خارج القطر R' على النحو التالي كما موضح في العلاقة التالية :

$$H_{AB} \approx -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{ik(R_{Bi}-R_{Ai})} \gamma_0 \dots \dots \dots (19.2)$$

كما موضح في العلاقة التالية :

$$H_{AB} = -\frac{\gamma_0}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{ik\delta_l} = -\gamma_0 f(k) \dots \dots \dots (20.2)$$

كما موضح في العلاقة التالية:

$$f(k) = \sum_{l=1}^3 e^{ik\delta_l} \dots \dots \dots (21.2)$$

حيث يتم الاشارة الى متجه موضع الذرة B بالنسبة الي A يتم اشارة الذرة $\delta_l = (R_{Bl} - R_{Ai})$ وان مجموع ذرات B الثلاث المجاورة هو نفسه بالنسبة لجميع ذرات A والمتجهات الثلاثة كما موضح في العلاقة التالية:

$$\begin{cases} \delta_1 = \left(a, \frac{a}{\sqrt{3}} \right) \\ \delta_2 = \left(\frac{a}{2}, -\frac{a}{2\sqrt{3}} \right) \dots \dots \dots (22.2) \\ \delta_3 = \left(-\frac{a}{2}, -\frac{a}{2\sqrt{3}} \right) \end{cases}$$

بحيث $|\delta_1| = |\delta_2| = |\delta_3| = a\sqrt{3}$ من طول رابطة الكربون ثم يمكن تقييم الوظيفة $f(k)$ التي تصف الجيران الاقرب كما في العلاقة التالية :

$$f(k) = \sum_{i=1}^n e^{ik} \delta_1 \dots \dots \dots (23.2)$$

كما هو موضح في العلاقة التالية :

$$f(k) = e^{iky_a/\sqrt{3}} + e^{ik_x a/2} e^{-iky_a/2\sqrt{3}} + e^{-ik_x a/2} e^{-iky_a/2\sqrt{3}} \dots \dots \dots (24.2)$$

وتصبح لدينا المعادلة التالية :

$$f(k) = e^{iky_a/\sqrt{3}} + 2e^{-iky_a/2\sqrt{3}} \cos(k_x a/2) \dots \dots \dots (25.2)$$

عنصر المصفوفة خارج القطر الاخر H_{AB} هو الاتحاد المعقد H_{BA} كما في العلاقة التالية :

$$\begin{cases} H_{AB} \approx -\gamma_0 f(k) \\ H_{BA} \approx -\gamma_0 f^*(k) \dots \dots \dots (26.2) \end{cases}$$

يتم اجراء حساب عنصر خارج القطر لمصفوفة متكاملة متداخلة بطريقة متماثلة لتكامل كما في العلاقة التالية :

$$S_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n e^{ik(R_{Bj}-R_{Ai})} \langle \phi_A(r - R_{Ai}) | \phi_B(r - R_{Bj}) \rangle \dots \dots \dots (27.2)$$

تصبح لدينا المعادلة التالية :

$$S_{AB} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{ik(R_{Bl}-R_{Ai})} \langle \phi_A(r - R_{Ai}) | \phi_B(r - R_{Bl}) \rangle \dots \dots \dots (28.2)$$

نضع قيمة S_0 تساوي كما موضح في العلاقة التالية:

$$S_0 = \langle \phi_A(r - R_{Ai}) | \phi_B(r - R_{Bl}) \rangle \dots \dots \dots (29.2)$$

تصبح لدينا المعادلة التالية :

$$S_{AB} = S_0 f(k) \dots \dots \dots (30.2)$$

الفصل الثاني : الخواص الالكترونية للجرافين

بسبب التناظر البلوري يترتب ذلك المعادلة (20.2)صالحة في جميع المواقع في شبكة الجرافين ، عندما تكون $i=j$ في المعادلة تكون المواقع الذرية على نفس الشبكة الفرعية وهذه المواقع الذرية هي اقرب جيران (NNN) مع ستة ناقلات مواضع من الموقع الاصلي . بتالي يكون متجهي الشبكة a_1 و a_2 مع $a_3 = a_1 - a_2$ بتعويض متجهات هذه مواضع في هاملتون ، نجد ان عناصر المصفوفة القطرية H كما موضح في العلاقة التالية:

$$H_{AA} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{ik(R_{Aj}-R'_{Ai})} \langle \phi_A(r - R'_{Ai}) | \hat{H} | \phi_A(r - R_{Aj}) \rangle \dots \dots \dots (31.2)$$

تصبح لدينا المعادلة التالية :

$$E_{2P} = \langle \phi_A(r - R'_{Ai}) | \hat{H} | \phi_A(r - R_{Aj}) \rangle \dots \dots \dots (32.2)$$

حيث E_p هي الطاقة المميزة للرابط π بين مدار $2p_z$ و t_1 هي طاقة القفز التالية لأقرب جيران (NNN) من التناظر بين مواقع الفرعية ومنه $H_{AB} = H_{AA}$.

باستخدام القيم المستخلصة لعناصر مصفوفة هاملتوني والاحتفاظ بمساهمات الجيران الاقرب فقط نتحصل على العلاقة التالية :

$$H_1 = \begin{pmatrix} \epsilon_{2P} & -\gamma_0 f(k) \\ -\gamma_0 f^*(k) & \epsilon_{2P} \end{pmatrix} \dots \dots \dots (33.2)$$

وبطريقة مماثلة يتم الحصول على مصفوفة متكاملة متداخلة كما في العلاقة التالية :

$$S = \begin{pmatrix} 1 & S_0 f(k) \\ S_0 f^*(k) & 1 \end{pmatrix} \dots \dots \dots (34.2)$$

لدينا العلاقة التالية :

$$\det(H - ES) = 0 \dots \dots \dots (35.2)$$

نعوض في العلاقة السابقة ونجد مايلي :

$$(E - \epsilon_{2P})^2 - ([E - \epsilon_{2P}]S_0 + \epsilon_{2P}S_0 + \gamma_0)^2 |f(k)|^2 \dots \dots \dots (36.2)$$

الفصل الثاني : الخواص الالكترونية للغرافين

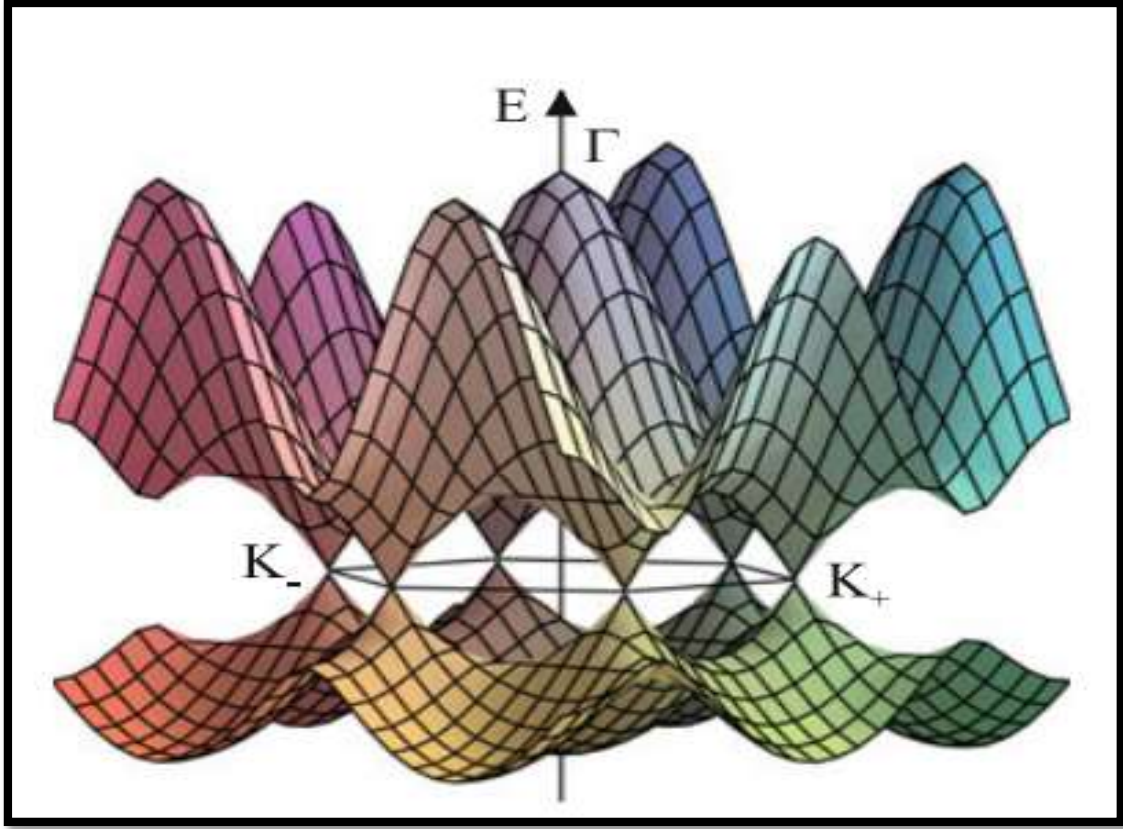
استبدال المصفوفات اعلاه وهي تقريب اقرب الجيران في المعادلة وحلها في علاقة تشتت طاقة نموذج الربط المحكم التالية كما في العلاقة التالية :

$$E_{\pm}(k) = \frac{\epsilon_{2P} \pm \gamma_0 |f(k)|}{1 + S_0 |f(k)|} \dots \dots \dots (37.2)$$

حيث يتم حساب $f(k)$ باستخدام متجهات الشبكة وتصبح لدينا العلاقة التالية :

$$f(k) = \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{k_z a}{2}\right)} \dots \dots \dots (38.2)$$

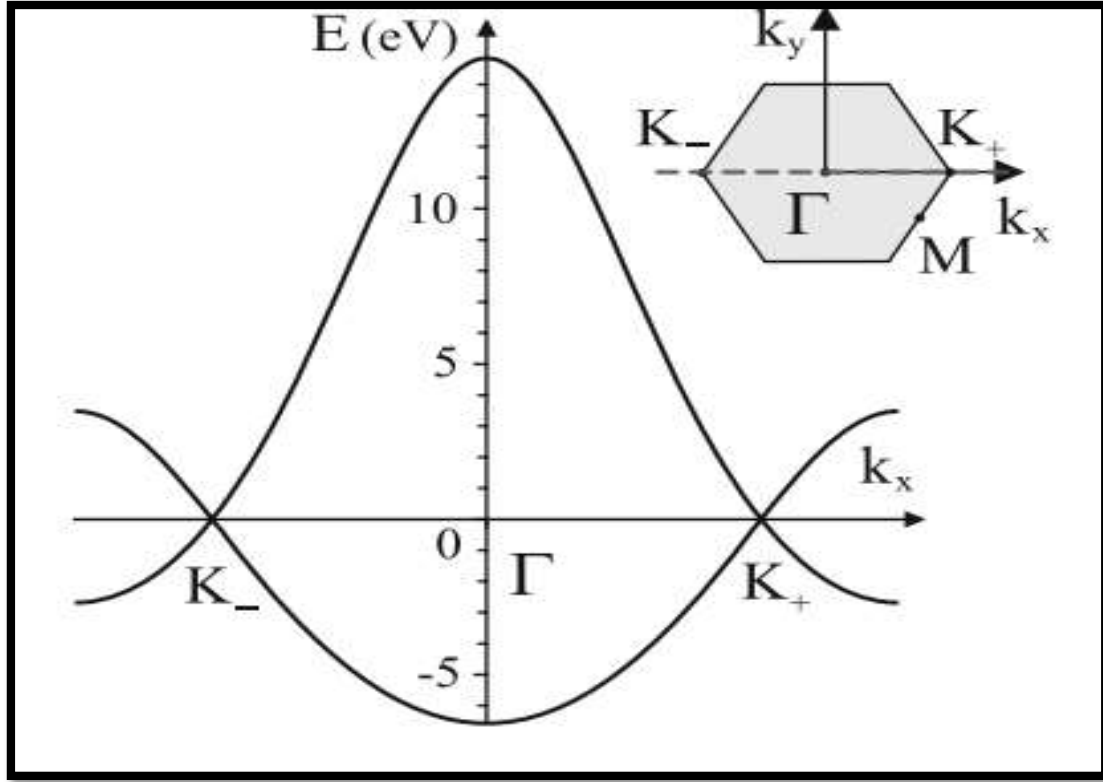
حيث قيم المعاملات $\gamma_0 = 3.033 \text{ eV}$ و $S_0 = 0.129$ و $\epsilon_{2P} = 0$ تعني ان الطاقة المضبوطة تكون مساوية لطاقة $2P_z$ المداري . يظهر هيكل النطاق الناتج E_{\pm} في الشكل (3.2) . بالقرب من منطقة بريليون الاولى يظهر قطع خاص في بنية النطاق في الشكل (4.2) ، حيث يتم رسم النطاقات كدالة لمكون متجه الموجه k_x على طول الخط $k_y = 0$ ، هو خط يمر عبر مركز منطقة بريليون الاولى المسمى Γ ، زاويتين منطقة بريليون الاولى المسمى k_+ و k_- يقع مستوي فرمي في الغرافين احادي الطبقة عند صفر طاقة . وهناك نوعان من مجالات الطاقة التي نشير اليها باسم مجال التوصيل (E_+) ومجال التكافؤ (E_-) الميزة المثيرة للاهتمام في بنية النطاق هي انه لا توجد فجوة في النطاق بين مجالي التوصيل والتكافؤ بدلا من ذلك . تتقاطع العصابات عند ستة من منطقة بريليون تعرف زوايا منطقة بريليون بنقاط K واثنان منهما تم تسميتهما k_+ و k_- بالقرب من هذه النقاط يكون التشتت خطيا .



الشكل (2-4) : هيكل النطاق منخفض الطاقة من الجرافين احادي الطبقة [23].

يوضح الشكل التالي ما يلي :

هيكل النطاق منخفض الطاقة من الجرافين احادي الطبقة. مع الاخذ في الاعتبار التنقل بالجوار الاقرب $\gamma_0 = 3.033 \text{ eV}$ وتداخل اقرب الجيران $S_0 = 0.129$ والطاقة المدارية $\epsilon_{2p} = 0$ وتظهر النطاقات بالقرب من منطقة بريلون الاولى ، ومع مجالات التوصيل والتكافؤ التي تلامس ستة زوايا من منطقة بريلون الاولى، ثم تصنيف اثنين منهم k_+ و k_- ، و تشير التسمية Γ الى مركز منطقة بريلون الاولى .



الشكل(2-5) : مقطع من هيكل النطاق منخفض الطاقة من الجرافين احادي الطبقة [23].

يوضح الشكل التالي مايلي :

هيكل النطاق منخفض الطاقة من الجرافين احادي الطبقة مع الاخذ في الاعتبار التنقل بالجوار الاقرب $\gamma_0 = 3.033 \text{ eV}$ وتداخل اقرب الجيران $s_0 = 0.129$ والطاقة المدارية $\epsilon_{2p} = 0$ ، تظهر مقطع من هيكل النطاق على طول k_x نقاط تقاطع المحور k_- و Γ و k_+ في منطقة بريلون الاولى .

3.2. الكترونات ديراك عديمة الكتلة:

يحتوي معادلة ديراك على مخروط ديراك واحد فقط في حين ان علاقة التشتت مع الجرافين لهما مخروطان مستقلان يسمى الوديان (valley) (مخروط المجاورة تكون مستقلة في حين ان الجيران الاقرب التاليين متكافئان) يتم حساب وجود اثنين من مخروط المستقلة من خلال درجة حرية الوادي .

وتسمى الالكترونات التي تحكمها معادلة ديراك بفرميونات حيث تخضع هذه الالكترونات الوحيدة لأقرب ترابط يكون على شكل نموذج هاملتون المحكم. [24] كما موضح في العلاقة التالية :

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle_{\sigma}} (a_{i\sigma}^{\dagger} b_{j\sigma} + HC) \dots \dots \dots (39.2)$$

حيث HC هي المرافق $HC = a_{i\sigma} b_{j\sigma}^{\dagger}$

تحتوي شبكة قرص العسل على شبكتين فرعيتين وذرتين لكل وحدة خلية $(a_{i\sigma}^{\dagger}, a_{i\sigma})$ و $(b_{j\sigma}^{\dagger}, b_{j\sigma})$. هي عوامل انشاء مواقع فرعية A و B تؤدي شروط الحدود الدورية كما موضح في العلاقة التالية :

$$H = -t \sum_{k\delta} \gamma(k) a_{k\sigma}^{\dagger} b_{k\sigma} + Hc \dots \dots \dots (40.2)$$

حيث $\gamma(k) = \sum_{\Delta} e^{ik\Delta}$ ، و $\Delta \equiv (\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3)$ عبارة على ثلاثة متجهات تربط ذرة في الشبكة العرضية A بثلاثة من اقرب جيرانها في الشبكة الفرعية.

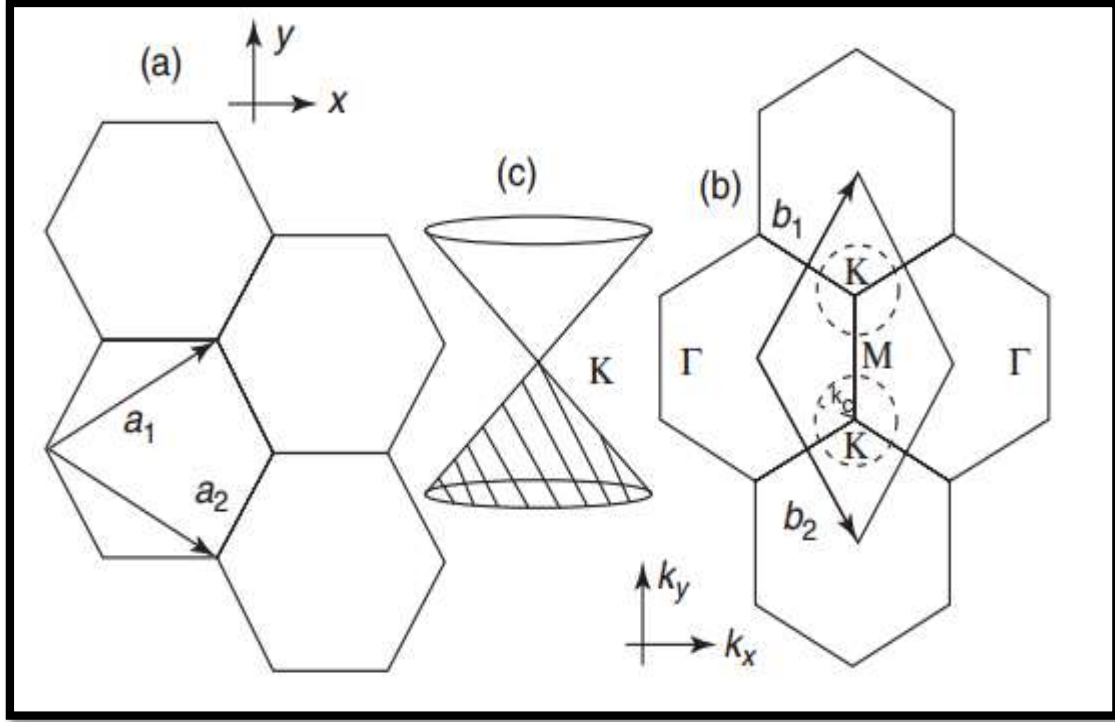
الشبكتين الفرعيتين لا تشتت وتشكل نطاقين مسطحين عند صفر طاقة ، يقترب الجار القريب من الشبكتين الفرعيتين يمزج هذه النطاقات بطريقة تعتمد على K فينتج تشتت و نتيجة لذلك نحصل على نطاقات عريضة تشبه الالكترون وتشبه الثقب . و كما موضح في العلاقة التالية:

$$H = - \sum_{k\sigma} \epsilon_k (\alpha_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma} - \beta_{k\sigma}^{\dagger} \beta_{k\sigma}) \dots \dots \dots (41.2)$$

وتكون لدنيا العلاقة التالية :

$$\epsilon_k = t \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2}} \dots \dots \dots (42.2)$$

تتوافق العوامل a' و β' مع حالات بلوخ للطاقة ايجابية وسالبة على التوالي حيث تتلامس النطاقات مع بعضهما البعض عند نقطتي K و K' في منطقة بريلون كما موضح في الشكل التالي :



الشكل(2-6) : يمثل قرص العسل ومنطقة بريلوان الاولى ومخروط ديراك [24].

يوضح الشكل التالي مايلي :

الشكل (a): شبكة قرص العسل من ذرات الكربون في الفضاء الحقيقي ، وحيث $a_{1,2}$ ،
 والشكل (b) الفضاء ومنطقة بريلوان الاولى ، بحيث $b_{1,2} = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \pm 1 \right)$ ،
 الشكل (c) طيف ديراك المخروطي عند نقطة . حيث تمثل $V_F = \frac{c}{300}$ سرعة فرمي للالكترونات و
 c سرعة الضوء والمتجه هو متجه ثنائي الابعاد.

4.2. معادلة ديراك عديمة الكتلة:

العلاقة بين طبقة ديراك عديمة الكتلة من الغرافين والحالات الكهربائية منخفضة الطاقة تناقش هنا،
 ويمكن من الحالات الالكترونية بالقرب من منطقتي ديراك ($\pm K$) غير متكافئين بواسطة معادلة
 ديراك في مصفوفة 4×4 كما موضح في العلاقة التالية [23] :

$$H_{kp}F(r) = \epsilon F(r) \dots \dots \dots (43.2)$$

لتكن لدينا المصفوفة التالية كما موضح لدينا في العلاقة التالية :

$$\begin{pmatrix} 0 & \gamma(\hat{k}_x - i\hat{k}_y) & 0 & 0 \\ \gamma(\hat{k}_x + i\hat{k}_y) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma(\hat{k}_x + i\hat{k}_y) \\ 0 & 0 & \gamma(\hat{k}_x - i\hat{k}_y) & 0 \end{pmatrix} \dots \dots \dots (44.2)$$

العلاقة التالية :

$$F(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} F_A^{K^+}(\mathbf{r}) \\ F_B^{K^+}(\mathbf{r}) \\ F_A^{K^-}(\mathbf{r}) \\ F_B^{K^-}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \dots \dots \dots (45.2)$$

هنا $\hat{k}_x(\hat{k}_y)$ مشغل الموجة ،ويمكن استبداله بـ $-i\hat{v}$ في حالة عدم وجود مجال مغناطيسي γ لا هي معامل النطاق بحيث $\gamma = \sqrt{3t} a/2$ و $F_A^{K^\pm}(\mathbf{r})$ و $F_B^{K^\pm}(\mathbf{r})$ هي الدوال بالقرب من نقاط k للموقع الفرعية A و B ، و يمكننا إعادة كتابة هاملتون الكتلة الفعالة اعلاه باستخدام مصفوفات باولي لمساحة الوادي k_\pm كما موضح في العلاقة التالية :

$$H_{kp} = \gamma[\hat{k}_x(\sigma^x \otimes \tau^0) + \hat{k}_y(\sigma^y \otimes \tau^z)] \dots \dots \dots (46.2)$$

بحيث τ^0 هي مصفوفة الوحدة 2×2 . يمكننا بسهولة الحصول على طيف الطاقة الخطي للغرافين مثل $S = \pm 1$ مع $\epsilon = s\gamma|k|$

والدوال الموجة المقابلة مع تعريف $\Phi_{K^\pm} = [F_{K^\pm A}, F_{K^\pm B}]$

$$\Phi_{k^\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} S \\ e^{\pm i\phi k} \end{pmatrix} e^{ikr} \dots \dots \dots (47.2)$$

تصبح لدنيا العلاقة التالية :

$$e^{\pm i\phi k} = \frac{k_x \pm ik_y}{|k_x + ik_y|} \dots \dots \dots (48.2)$$

5.2. كثافة الحالات DOS:

يتم تعريف كثافة الحالات بأنها عدد الحالات الالكترونية لكل وحدة طاقة ولكل وحدة حجم ، عادة ما تكون وحدة كثافة الحالات $1ev|atm$ او $1ev|cm^3$ ، ويتم حساب DOS على النحو التالي كما موضح في العلاقة التالية [14] :

$$D(E) = \sum_k \delta(E - \varepsilon(k)) \dots \dots \dots (49.2)$$

حيث يتم الجمع بالنسبة لقيمة K في منطقة بريلون الاولى . بأخذ قطعة من الغرافين بطول L وعرض W كما موضح في الشكل ، ونظرا الى طبقة الغرافين فهي تتكون من عدد كبير من خلايا الوحدة ، و يمكننا ذلك من تحويل المجموع الى تكامل كما موضح في العلاقة التالية :

$$D(E) = \frac{WL}{(2\pi)^2} \int \delta(E - \delta(k)) dk_x dk_y \dots \dots \dots (50.2)$$

نظرا لان الطاقة تعتمد فقط على سعة k وليس على اتجاهها فمن الملائم اعادة كتابة تكامل باستخدام الاحداثيات القطبية كما موضح في العلاقة التالية :

$$D(k) = \frac{WL}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{k_0} k dk \delta(E - \varepsilon(k)) \dots \dots \dots (51.2)$$

عند كتابة هذا التكامل فأننا نستعمل منطقة بريلون الاولى السداسية بدائرة نصف قطرها K_0 المختارة ، بحيث تكون مساحة الدائرة المختارة مساوية الى منطقة بريلون الاولى سداسية الاضلاع كما موضح في العلاقة التالية :

$$D(E) = \frac{WL}{2\pi} \int_0^{k_0} k dk \delta(E - \varepsilon(k)) \dots \dots \dots (52.2)$$

يمكننا تغيير المتغيرات من k الى طاقة ε باستخدام العلاقة التالية :

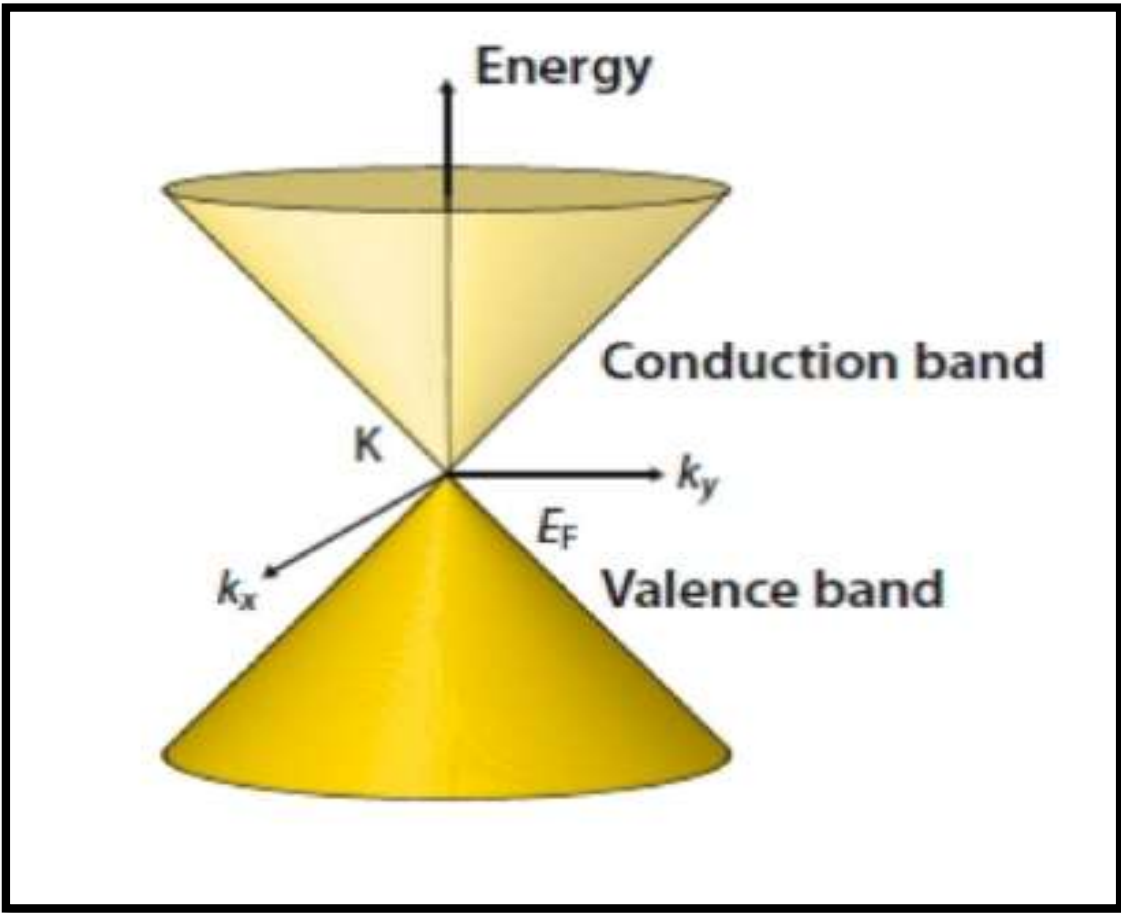
$$D(E) = \frac{WL}{2\pi} \frac{1}{(\hbar v F)^2} \int_0^{\varepsilon_0} \varepsilon \delta(E - \varepsilon) d\varepsilon \dots \dots \dots (53.2)$$

الفصل الثاني : الخواص الالكترونية للغرافين

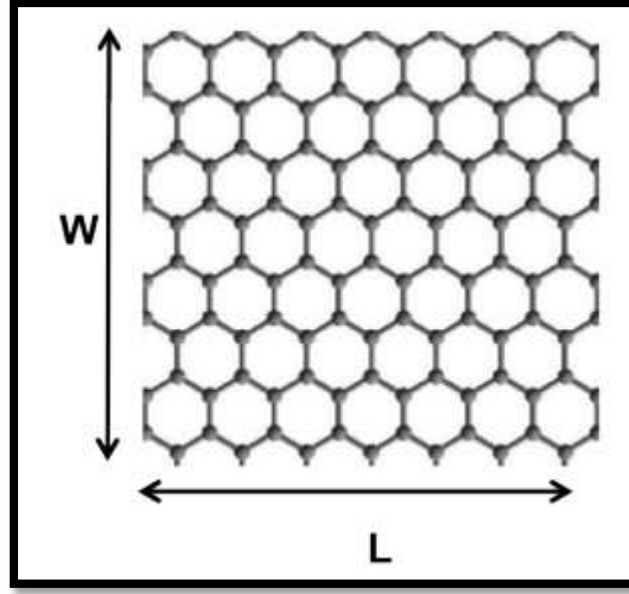
بحيث $\epsilon_0 = \hbar v_F$ ، بسبب خصائص دالة δ التكامل اعلاه له مساهمة غير مهملة فقط عندما يكون $0 \leq E \leq \epsilon_0$. علاوة على ذلك يتعين علينا الضرب بمعامل اثنين بسبب الدوران الالكتروني ، بإضافة الى عامل اثنين اخر بسبب النقطة k الثانية غير المكافئة في منطقة بريلون الاولى . هذا يوضح في العلاقة التالية :

$$D(F) = \frac{2WL}{\pi(\hbar v_F)^2} |E| \dots \dots \dots (54.2)$$

يمثل المعامل في هذه المعادلة نطاقي التكافؤ والتوصيل



الشكل(7-2) : يمثل مخروط ديراك [14]



الشكل(8-2): جزء من الغرافين بطول L وعرض W [14]

6.2. حد هاملتون الفعال:

يمكننا تعريف هاملتون الفعال على انه مصفوفة كما موضح في العلاقة التالية [25]:

$$H = \begin{bmatrix} t' & t'w(k) \\ tw(k) & t' \end{bmatrix} \dots \dots \dots (55.2)$$

ايضا لدينا القيم الذاتية كما موضح في مصفوفة التالية :

$$\psi_k = \begin{pmatrix} a_k^\alpha \\ b_k^\alpha \end{pmatrix} \dots \dots \dots (56.2)$$

بإهمال المعامل t' نتحصل على القيم الذاتية كما موضح في العلاقة التالية :

$$\lambda = \alpha \frac{w^*(k)}{|w(k)|} \dots \dots \dots (57.2)$$

وبالتالي فان القيم الذاتية كما موضح في العلاقة التالية :

$$\psi_k = \frac{e^{ikr}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\phi} \end{pmatrix} \dots \dots \dots (58.2)$$

علما ان ϕ تساوي القيمة الموضح في العلاقة التالية:

$$\varphi = \arctan \left(\frac{I_m(w(k))}{R_e(w(k))} \right) \dots \dots \dots (59.2)$$

1.6.2. حد الاستمرارية :

توسيع تشتت الطاقة المكافئ E_q بالقرب من النقطة $k(k')$ باستخدام k_{+k} بحيث نجد من الدرجة الاولى كما موضح في العلاقة التالية [25]:

$$\varepsilon_{K\eta=\pm}^\alpha = \alpha V_F |k| + O[(k/K)^2] \dots \dots \dots (60.2)$$

مع $V_F = 3ta_0/2\hbar$ التقريب الاول يكون مستقلا عن امتداد غير فعال للوادي ينتج عن هذا هاملتون فعال صالح بالقرب من نقاط ديراك كما موضح العلاقة التالية :

$$H = \eta \hbar V_F (k_x \sigma_x + \eta k_y \sigma_y) \dots \dots \dots (61.2)$$

حيث δ_i هي مصفوفات باولي و η_{\pm}^{\pm} تقابل نقطتي k_+ و k_- الفرديتين هذا الهاملتوني هو ببساطة ثنائي الابعاد عديم الكتلة . من المفيد استخدام التمثيل الرباعي الدوار مع هاملتون الفعال منخفض الطاقة مثل العلاقة التالية :

$$H_q = \hbar V_F \tau^z \otimes q \sigma \dots \dots \dots (62.2)$$

حيث تمثل موقع شبه زائفة مع دوران لأعلى إحدى المواقع الفرعية A و B ، كما موضح في العلاقة التالية :

$$\tau^z \otimes \sigma = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & -\sigma \end{pmatrix} \dots \dots \dots (63.2)$$

يتم اعطاء القيم الذاتية كما موضح في العلاقتين التاليتين :

$$\psi_{q\alpha}^{n=+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha e^{i\phi} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \dots \dots \dots (64.2)$$

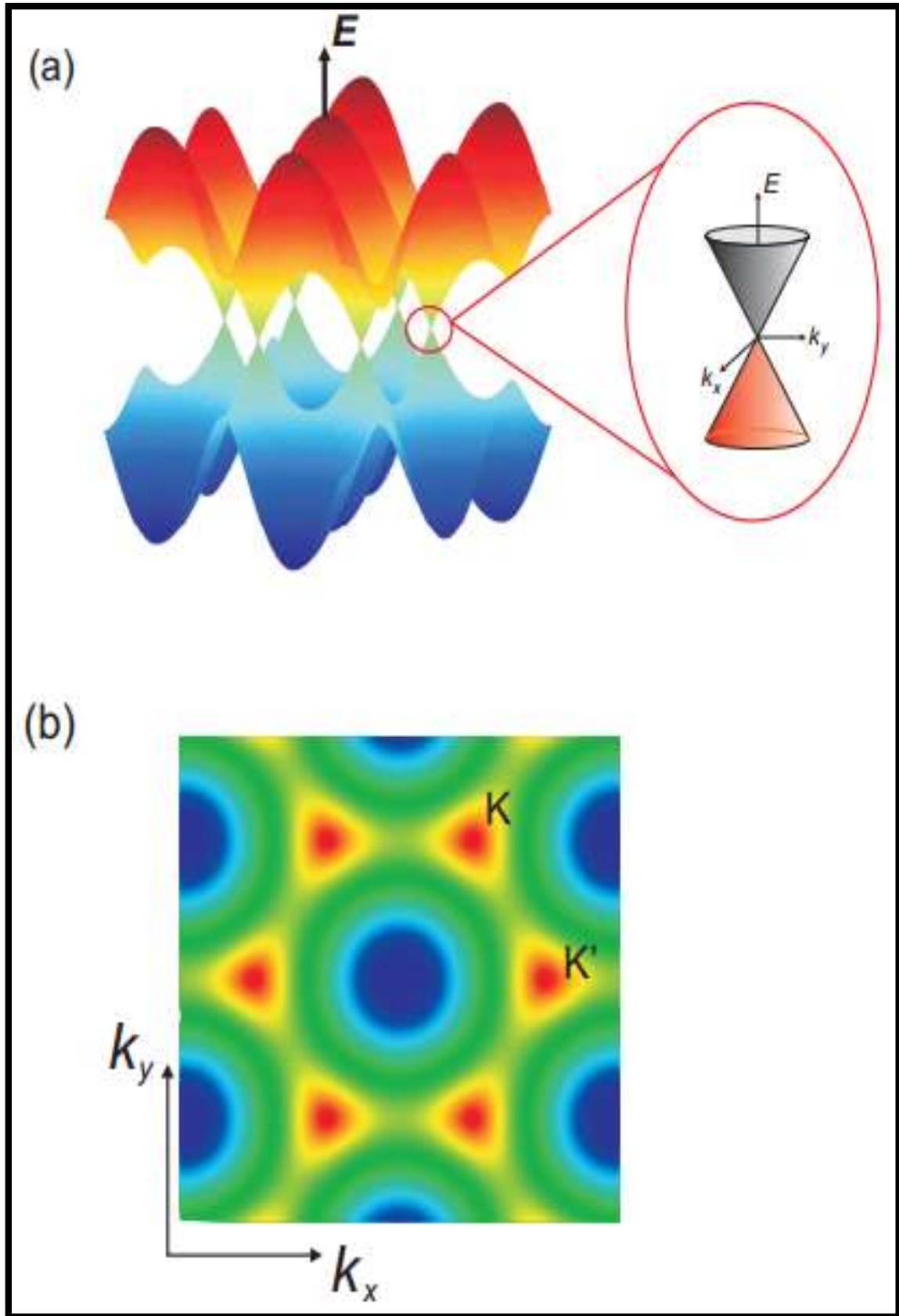
$$\psi_{q\alpha}^{n=-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -\alpha e^{i\phi} \end{pmatrix} \dots \dots \dots (65.2)$$

الفصل الثاني : الخواص الالكترونية للغرافين

يتم توسيع طيف امتداد حول نقطة ديراك بما في ذلك t' في الدرجة الثانية في q/k كما موضح في العلاقة التالية :

$$E_{\pm}(q) \approx 3t' \pm V_F|q| - \left(\frac{9t'a^2}{4} \pm \frac{3ta^2}{8} \sin(3\theta_q) \right) |q|^2 \dots \dots \dots (66.2)$$

في حالة وجود t يتغير موضع نقطة ديراك ويكسر تناظر ثقب الالكترون ، لاحظ انه حتى ترتيب $(q/k)^2$ ، و يعتمد التشتت على اختلاف مساحة كمية حركة وله تناظر ثلاثي . هذا ما يسمى باللتواء ثلاثي الزوايا لطيف الالكتروني . كما موضح في الشكل التالي :



الشكل (2-9): هيكل نطاق الجرافين [14]

نوضح الشكل كما يلي :

الشكل (a) : بنية نطاق الجرافين والطيف الخطي بالقرب من نقطة ديراك .

الشكل (b) : ثنائي الابعاد في منطقة بريلون الاول .

7.2. النقل شبه الكلاسيكي لبولتزمان:

تصف معادلة بولتزمان خصائص نقل الجسيمات الكمومية (نيوترونات ، فوتونات) مدفوعة ميكانيك شبه كلاسيكي . انه يحدد كيفية تسريع جسيمات النظام في المجالات الخارجية ، ويتم تحديد عمليات التشتت من خلال الاستاتيكية (الشوائب والعيوب) و كذلك الاضطرابات الديناميكية (الفوتونات) . [26]

تخضع الالكترونات لعدد كبير من الاصدامات عندما يتغير النظام ، حيث يتم تمثيل هذه الالكترونات بموجات بلوخ لشعاع الموجة k ثم نحدد سرعة المجموعة . كما موضح في العلاقة التالية:

$$V(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial K} = \frac{\hbar K}{m^*} \dots \dots \dots (67.2)$$

m^* تمثل الكتلة الفعالة للإلكترون في البلورة ، لذلك فان ديناميكيات الالكترونات موصوفة في قانون الحركة الكلاسيكي كما في العلاقة التالية :

$$\sum \vec{F} = m^* \vec{a} \dots \dots \dots (68.2)$$

وهكذا يتبع الالكترونون نفس الديناميكيات الذي يتبعها جسيم في الفراغ له كتلة m^*

تتحرك الالكترونات بطريقة عشوائية تحت تطبيق المجال الكهربائي (E) . تتعرض الالكترونات على حد سواء للقوة ، بسبب المجال الكهربائي وقوة الاحتكاك المرتبطة بالاصدامات يتميز الاخير بالوقت بين تصادمين . كما موضح في العلاقة التالية :

$$m^* \vec{a} = - \frac{m \vec{v}_d}{\tau} - e \vec{E} \dots \dots \dots (69.2)$$

وفي نظام مستقر تتحرك الالكترونات بسرعة انجراف الخاصة بالتنقل كما هي موضح في العلاقة التالية :

$$\vec{v}_d = -\frac{e\tau}{m}\vec{E} = \mu\vec{E} \dots \dots \dots (70.2)$$

يصف نموذج بولتزمان تطور توزيع طاقة الالكترونات تحت تأثير قوة خارجية . في حالة التوازن الديناميكي الحراري تخضع الالكترونات الاحصائية فيرمي ديراك كما موضح في العلاقة التالية :

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)} \dots \dots \dots (71.2)$$

k_B هو ثابت بولتزمان .

لتحديد تطور توزيع الطاقة للالكترونات تحت تأثير المجال الكهربائي من الضروري حل معادلة بولتزمان كما موضح في العلاقة التالية :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar}\vec{F}\frac{\partial f}{\partial \vec{k}} + \vec{v}(\vec{k})\frac{df}{d\vec{r}} \dots \dots \dots (72.2)$$

يؤدي تطبيق المجال الكهربائي الى ازاحة في فضاء الطور. ومنه فان التيار في النظام يتم نقله فقط بواسطة الالكترونات بين $+K_d$ و $-K_f$.

8.2. نظرية لاندوار لنقل الالكتروني:

هي اسلاك ضيقة لاندوار للنقل تستخدم على نطاق واسع لوصف النقل الكمي على النطاق نانوي حيث تم تطبيقه على شرائط الغرافين النانوية [22].

شرائط الغرافين هي اسلاك ضيقة مصنوعة من طبقة ذرية واحدة من الغرافين مع الكترونات و يسمح لها التحرك على طول الشريط . ويتم وضع شريط بطول L يصل بين قطبين مجهرين او خزانات الكترونية ، في الشريط يتم تحديد حالات الالكترونات في الاتجاه العرضي لطول الشريط وبالتالي فهي تتميز بعزمها الطولي k على طول الشريط تشكل الطاقات $E_L(K)$ لهذا الحالات الشريطية نطاقا يسمى النطاق الفرعي .

كثافة الالكترونات $n_1(k)$ لكل وحدة طول مقابلة لنطاق فرعي معين في نطاق كمية حركة الطولي بين k و $k+dk$ تعطي بواسطة العلاقة التالية :

$$n_1(k)dk = \frac{2}{L} \frac{L}{2\pi} f(E_1(k))dk = \frac{1}{\pi} f(E_1(k))dk \dots \dots \dots (73.2)$$

الفصل الثاني : الخواص الالكترونية للغرافين

حيث $f(E_l(k))$ هي توزيع فرمي Fermi يتم انتقال الالكترونات بين الاقطاب الكهربائية والشريط وذلك بانتقال الالكترونات عبر شرائط بالسنتية أي بدون تشتت.

حيث تكون الالكترونات المحقونة في الشريط النانوي من كل قطب كهربائي ، ويتم اعتبارها في حالة توازن تقريبا و لهامينتونات شبه فرمي (او تعبر ادق الامكانيات الكهروكيميائية) ، ودوال التوزيع المرتبطة بها $f_L(E_l(k))$ و $f_R(E_l(k))$ للالكترونات الناشئة من الرصاص الايمن و الايسر على التوالي . ويتم اعطاء تيار الالكترون الطولي الذي يحمله النطاق الفرعي 1 كما موضح في العلاقة التالية :

$$I_L = -2 \int_{-\infty}^{+\infty} e v_1(k) n_1(k) dk \dots \dots \dots (74.2)$$

$$I_L = -2e \int_0^{\infty} |v_1(k)| \left(\frac{f_R(E_L(K))}{2\pi} - \frac{f_L(E_l(k))}{2\pi} \right) dk \dots \dots \dots (75.2)$$

حيث $v_1(k) = \partial E_1(k) / \partial(\hbar k)$ هي سرعة الالكترون على طول الشريط في حد درجة الحرارة الصفرية ، وتكون توزيعان فرمي عبارة عن وظائف متدرجة ومن ثم نغير التكامل من k الى $E_l(k)$ كما موضح في العلاقة التالية :

$$I_L = -\frac{2e}{2\pi} \int_{\mu_L}^{\mu_R} \frac{\partial E_l}{\partial(\hbar k)} \frac{\partial k}{\partial E_l} dE_l \dots \dots \dots (76.2)$$

$$I_L = -\frac{2e^2}{h} \frac{\mu_R - \mu_L}{e} \dots \dots \dots (77.2)$$

$$I_L = \frac{2e^2}{h} V_{bias} \dots \dots \dots (78.2)$$

اين $\mu_{R/L}$ هي الامكانيات الكهروكيميائية للخيط وقيمها النسبية تعتمد على جهد التحيز V_{bias} بحيث تكون $\mu_R - \mu_L = -eV_{bias}$. نري ان الموصلية $G = \partial I / \partial V_{bias}$ لاسلوب توصيل واحد ، ما يسمى بكمية التوصيل كما في العلاقة التالية :

$$G_0 = \frac{2e^2}{h} \dots \dots \dots (79.2)$$

هذا هو الحد الاقصى للتوصيل لطريقة توصيل واحدة مع حالتين من الدوران

9.2. تناقض كلاين:

بعد وقت قصير من اكتشاف معادلة ديراك، لاحظ كلاين Klein (1929) احدي خصائصها الغريبة التي سميت فيها بعد تناقض كلاين [27] .

اعتبر كلاين معادلة ديراك بمصفوفة 4×4 لجسم نسبي ينتشر في فضاء ثلاثي الابعاد . لكي اقرب الى موضوعنا الرئيسي ، سنناقش معادلة مصفوفة 2×2 لجسم ينتشر في فضاء ثنائي الابعاد يبقي جوهر التناقض . وبالتالي سنتطرق في معادلة شرودنجر كما موضح في العلاقة التالية :

$$H\psi = E\psi \dots \dots \dots (80.2)$$

مع دالة موجة السبينور المكونة من عنصرين كما موضح في العلاقة التالية :

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \dots \dots \dots (81.2)$$

لدينا هاملتون يمثل كما يلي في العلاقة التالية :

$$\hat{H} = -i\hbar c \hat{\sigma} \Delta + V(x, y) \hat{I} + mc^2 \hat{\sigma}_z \dots \dots \dots (82.6)$$

هنا c هي سرعة الضوء، m كتلة الجسم و $V(x, y)$ هي طاقة كامنة ، سنكتب مصفوفة i لإظهار بنية السبينور للهاميلتوني . وننظر في حالة احادية البعد $V = V(x)$ و $\psi_i = \psi_i$ (هذا الاخير يعني الحدوث الطبيعي) و نأخذ المعادلة الاولى بشكل التالي :

$$-i\hbar c \frac{\partial \psi_2}{\partial x} = [E - mc^2 - V(x)]\psi_1 \dots \dots \dots (83.2)$$

$$-i\hbar c \frac{\partial \psi_1}{\partial x} = [E - mc^2 - V(x)]\psi_2 \dots \dots \dots (84.2)$$

1.9.2. تناقض كلاين وفق الانفاق اللوبية:

من الامكانيات نلاحظ انه لدينا الشروط التالية :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases} \dots \dots \dots (85.2)$$

علما ان V موجبة

على الجانب الايسر من الحاجز يكون حلين ψ_1 و ψ_2 لهما اعتمادا على x ك $e^{(\pm ihx)}$ ، حيث يعني متجه الموجة k كما موضح في العلاقة التشتت النسبية :

$$E^2 = (\hbar ck)^2 + m^2 c^4 \dots \dots \dots (86.2)$$

استخراج k من العلاقة السابقة لتصبح لدينا العلاقة التالية :

$$k = \frac{\sqrt{E^2 - m^2 c^4}}{\hbar c} \dots \dots \dots (87.2)$$

قيم الطاقة المسموح بها هي $E > mc^2$ (حالة الالكترون) و $E < mc^2$ (حالة الثقب) . على وجه التحديد سننظر في الحالة الاولى ، وهذا باستخدام المعادلة مع $V = 0$ نجد الموجة الواردة كما موضح في العلاقة التالية :

$$\psi_{in}(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha \end{pmatrix} e^{ikx} \dots \dots \dots (88.2)$$

لدينا العلاقة التالية توضح لنا الموجة المنعكسة:

$$\psi_r(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ -\alpha \end{pmatrix} e^{-ikx} \dots \dots \dots (89.2)$$

ابن

$$\alpha = \sqrt{\frac{E - mc^2}{E + mc^2}} \dots \dots \dots (90.2)$$

نفرض حل الشكل العام كما كوضح في العلاقة التالية :

$$\psi(x) = \psi_{in}(x) + r\psi_r(x) \dots \dots \dots (91.2)$$

حيث r هو معامل الانعكاس .

الفصل الثاني : الخواص الالكترونية للغرافين

في الجانب الايمن من الحاجز لدينا علاقة التشتت كما موضح في العلاقة التالية :

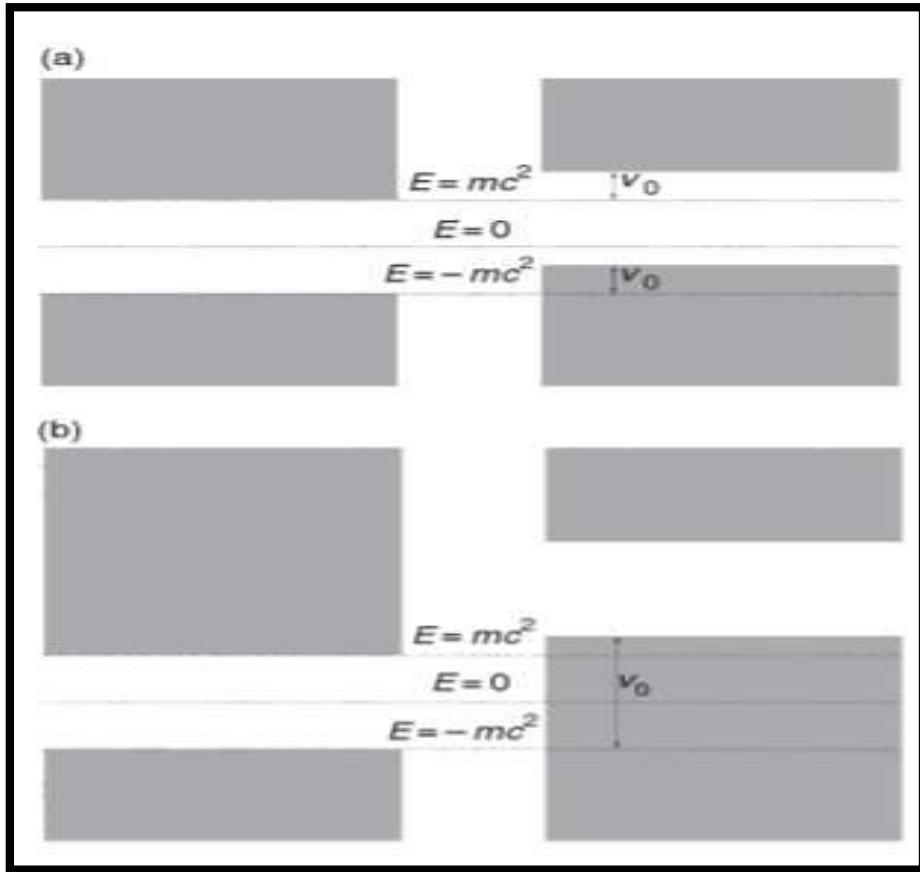
بالنسبة لمتجه الموجة الجديد q ، سننظر في حالة القفزة المحتملة التي تكون قوية بدرجة كافية كما موضح في العلاقة التالية

$$V_0 > E + mc^2 \dots \dots \dots (92.2)$$

ويكون الحل كما يلي في العلاقة التالية:

$$= \frac{\sqrt{(E - V_0)^2 - m^2c^4}}{\hbar c} \dots \dots \dots (93.2)$$

ويمكن للجسم ان ينتشر ايضا على الجانب الايمن من الجدار .ومع ذلك ينتمي هذا الجسم الى السلسلة السفلية (بوزيترون او ثقب).



الشكل (10-2) : الالكترن والبوزيترون على الجانبين الايسر والايمن من الجدار في الحالتين

$V_0 < 2mc^2$ و $V_0 > 2mc^2$ عند a و b [27].

توضح الشكل التالي :

الشكل (7-2) : في هذه الحالة يظهر تناقض ، لذلك سننظر في هذا الحالة . بالنسبة للقيم الاصغر لـ V_0 حيث يكون اما احالة انتشار الالكترونات على جانبي الحاجز اذا كانت $V_0 < E - 2mc^2$ او الموجات الزائلة عند $x > 0$ اذا كان $E - 2mc^2 < V_0 < E + 2mc^2$ عند حل معادلة شرودنغر ((75.2)و(76.2)) عند $x > 0$ نجد الموجة المرسله كما موضح في العلاقة التالية :

$$\psi_t(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{1}{\beta} \end{pmatrix} e^{iqx} \dots \dots \dots (94.2)$$

حيث العلاقة التالية :

$$\beta = \sqrt{\frac{V_0 - E - mc^2}{V_0 - E + mc^2}} \dots \dots \dots (95.2)$$

يمكن ان نجد معامل الانعكاس r ومعامل الارسال t بافتراض ان دالة الموجة مستمرة عند $x=0$ تكون لدنيا العلاقة التالية :

$$\psi_{in} + r\psi_{-r}|_{x=-0} = t\psi_t|_x \dots \dots \dots (96.2)$$

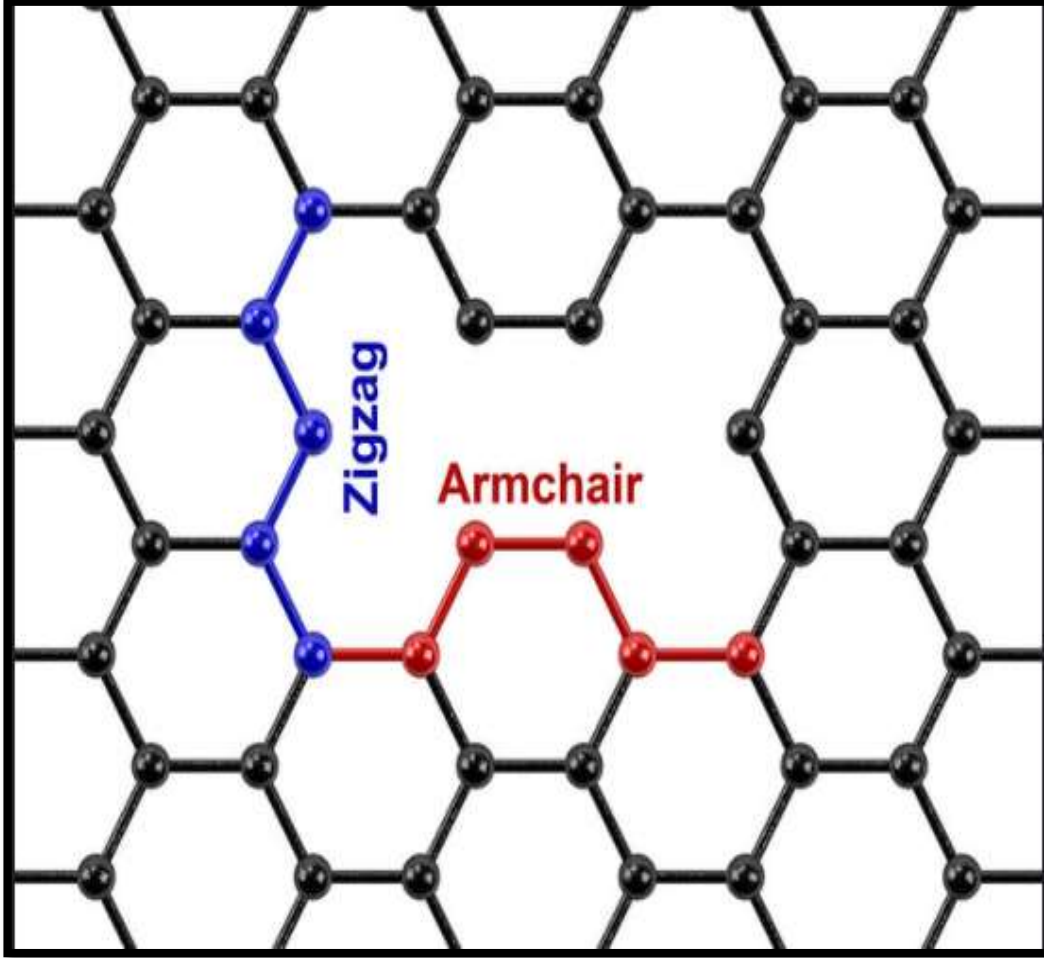
الفصل الثالث :

دراسة تأثير شكل

الحدود على الخواص

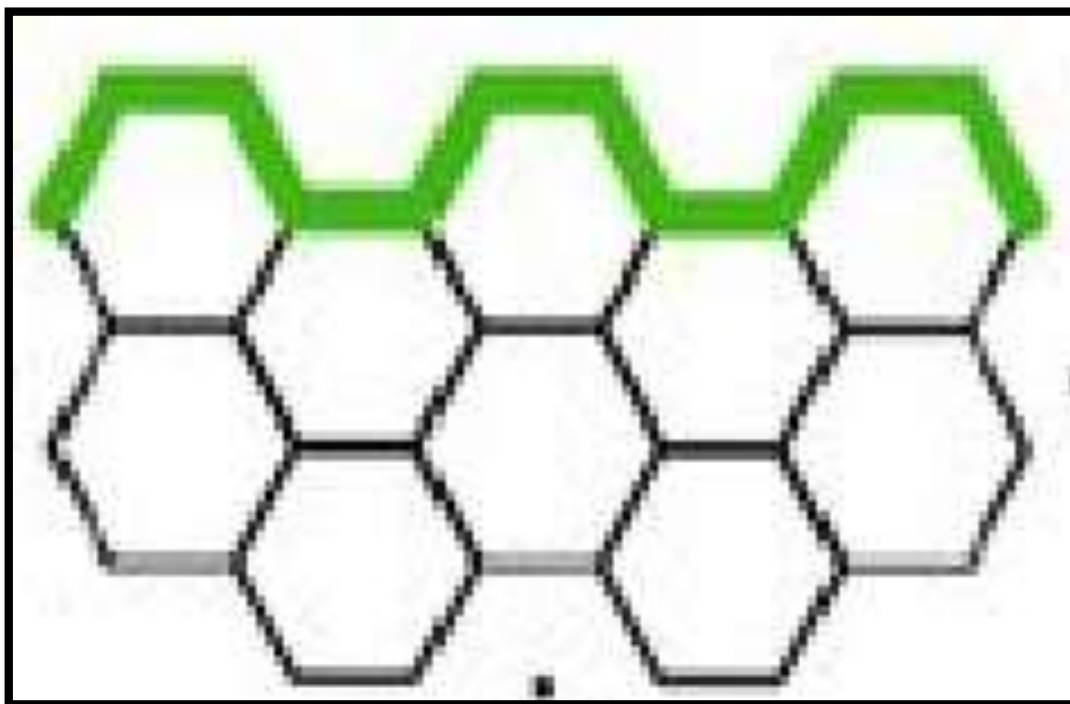
الالكترونية

لقد رأينا من خلال الفصول السابقة بان بنية الغرافين ثنائية البعد (2D) ، تلعب دورا مهما في الظهور خواصه المميزة ،ولكن الحسابات السابقة لم تأخذ مسالة محدودية قطع الغرافين المدروسة . حيث ان حدود قطعة الغرافين يمكن ان تأخذ احد الاشكال الرئيسة Zigzag ، او Armchair ، كما هو موضح في الشكل(1-3) :

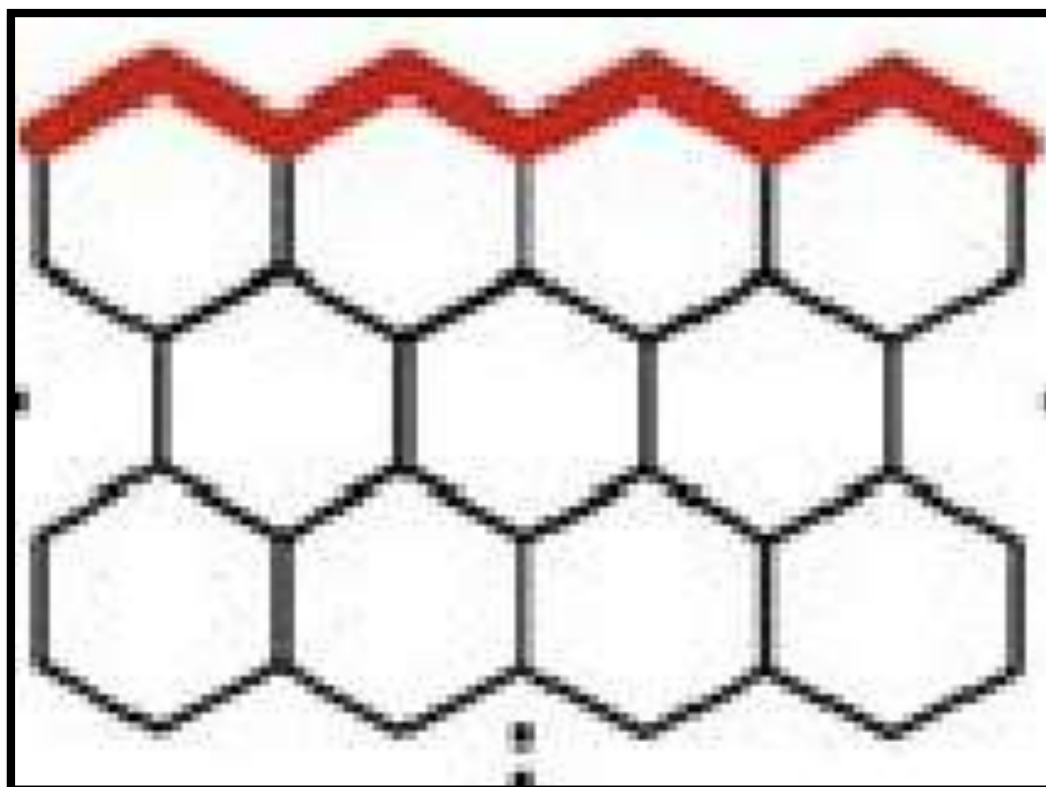


الشكل (1-3): قطعة الغرافين تأخذ احد الاشكال الرئيسة Zigzag او Armchair [28]

توضح الاشكال الموجود في الشكل التالي :

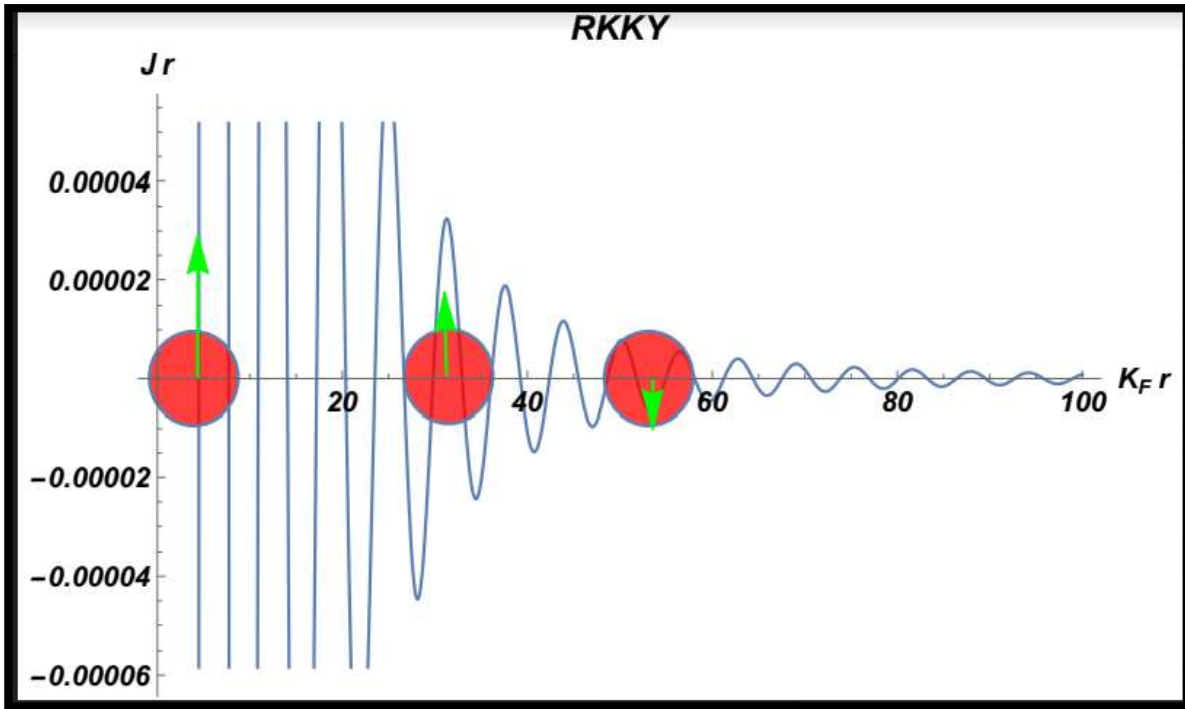


الشكل (2-3): قطعة الغرافين اخذ النمط [29]Armchair



الشكل (3-3): قطعة الغرافين اخذ النمط [29]Zigzag

كما انه في الغالب سوف يكون هناك مزيج عشوائي بين الحالتين ، وحيث ان النوعين السابقين يمكن ان مغناطيسية مختلفة ، فسوف تنقل الالكترونات هذه المغناطيسية الى داخل محيط قطعة الغرافين بفعل خاصية التفاعل (RKKY)، وضعها العلماء (Yoshida، kasuya، Kittel ،Ruderman) لتفسير كيفية التفاعل عن بعد بين سبين شائبة وذرة أخرى عن بعد أي بتفاعل غير مباشر حيث تلعب الإلكترونات دور الوسيط في نقل هذا التفاعل كما في الشكل (3-4) حيث تم التفاعل وفق الهاملتوني المعروف بالعلاقة (1.3) ولكن مع اختلاف مهم ، هو أن تفاعل التبادل يكتب بالمعادلة (2.3) كما هو موضح في الشكل التالي:



الشكل (3-4): رسم تخطيطي للتفاعل RKKY بدلالة $K_F r$

1.3. مغناطيسية الحدود:

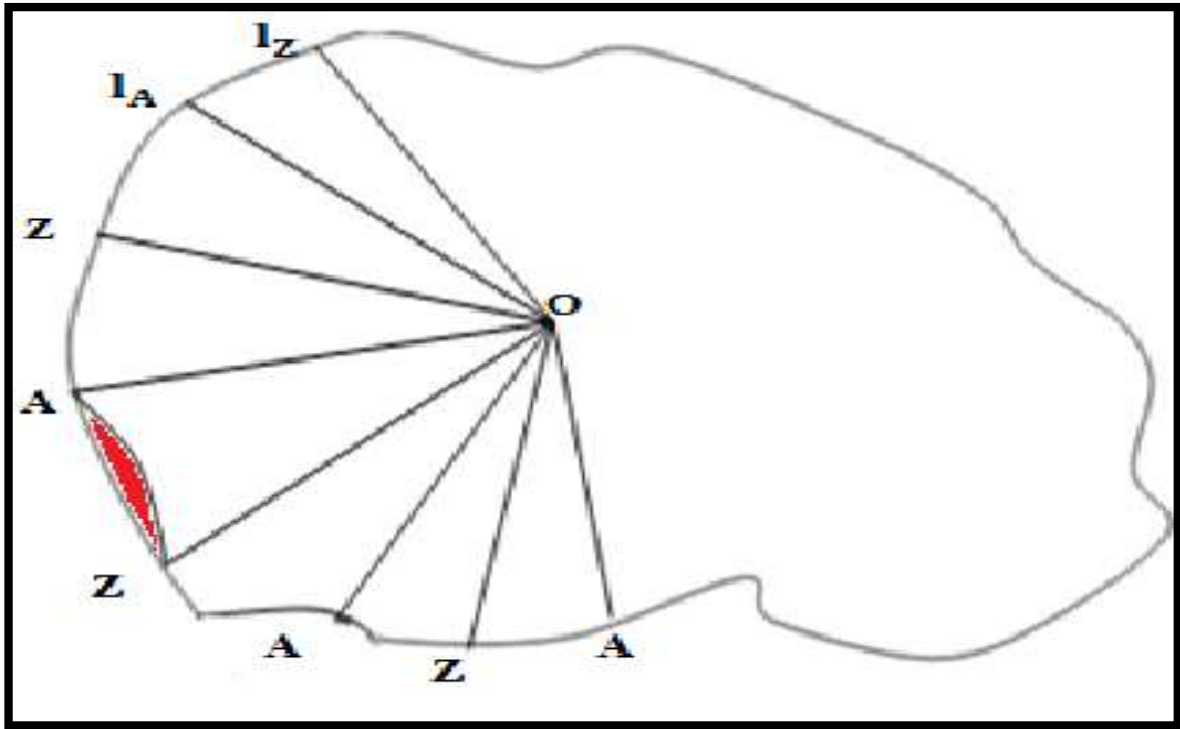
لقد دلت الدراسات التجريبية والنظرية على ان الخواص المغناطيسية للشكل Zigzag تختلف تماما على شكل الحدود Armchair .

حيث ان النوع الاول من الحدود تكون فيه التبادل المتقابلة تنتمي الى شبكتين مختلفتان A ، B ، وبالتالي فالتبادل في هذا الحالة يكون ضد مغناطيسي Antiferromagnétique أي ان المغنطة معدومة $\vec{M} = 0$ ، وبالتالي يمكن ان يتحول هذا التفاعل الى Ferromagnétique بمجرد تطبيق حقل كهربائي خارجي \vec{E} كما ان الحدود من النمط Zigzag للغرافين هي شديدة التفاعل من الناحية الكيميائية.

لذلك سوف نقوم في هذا الفصل بدراسة قطعة كيفية من الغرافين تمتزج حدودها بين النوعين A(Armchair) و Z(Zigzag) بطريقة عشوائية ، حيث سوف يقوم التفاعل (RKKY) بنقل التبادل بين هذا الخواص الى داخل قطعة الغرافين وبالتالي سوف نرى كيفية تأثر الخواص الالكترونية للغرافين بسبب هذا النوع من الحدود.

2.3. الحسابات

سوف نقسم حدود قطعة الغرافين الى قطع صغيرة جدا من النمط Z و A بشكل متناوب حيث تمتك القطع اطوال عشوائية l_A و l_Z كما موضح في الشكل



الشكل (3-5): رسم تخطيطي يوضح تقسيم حدود قطعة الغرافين الى قطع صغيرة من النمط Z و

A وأطوال عشوائية l_A و l_Z

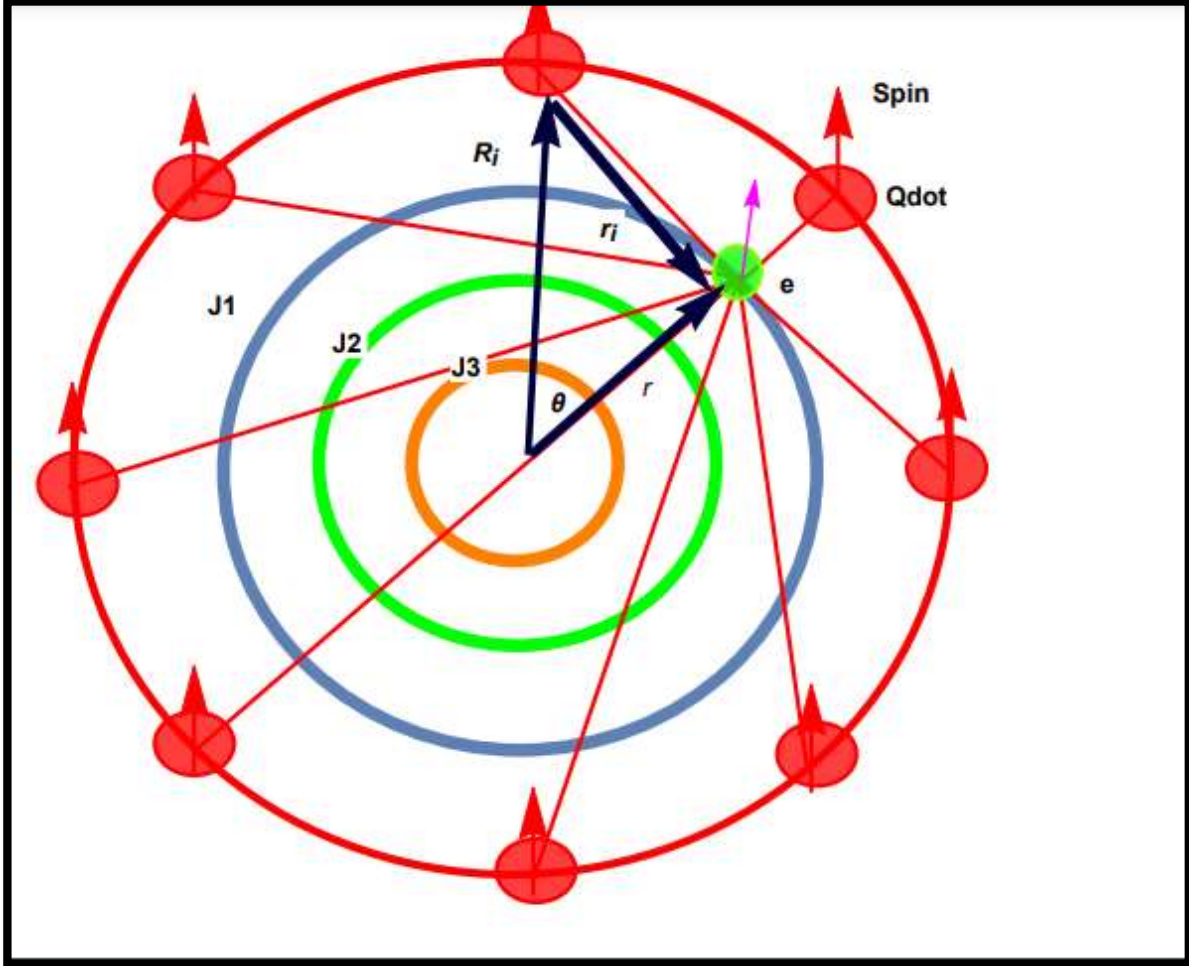
يقوم التفاعل (RKKY) بنقل التفاعل الى وسط قطعة الغرافين وفق المعادلة

$$H_{RKKY} = j(r)\vec{S}_{(Z,A)}\vec{S} \dots \dots \dots (1.3)$$

مع العلم ان التفاعل RKKY متخامد كلما ابتعدنا عن الحدود لان المعامل $J(r)$ يعطي بالعلاقة التالية :

$$J(x) \propto \frac{x\cos(x) - \sin(x)}{x^4} \dots \dots \dots (2.3)$$

حيث ان المتغير x عبارة عن $2k_F r_{(Z_i)}$ او $2k_F r_{(A_i)}$ وهو المسافة بين احد القطع Z_i او A_i ونقطة حدوث التفاعل على سطح الغرافين كما هو موضح في الشكل (3-6) حيث سوف نأخذ الشكل (شبه) الدائري لبعسطه وذلك لتفادي وجود عشوائية اخري ناتجة عن الابعاد r_{Z_i} و r_{A_i} .



الشكل (3-6): رسم تخطيطي يوضح دوائر تساوي التفاعل في الشكل شبه الدائري بسبب التفاعل RKKY في حالة نوع واحد Z او A .

وحيث ان هذه القطع (Z, A) صغيرة جدا فمن الممكن اعتبارها كنقاط كمية (i)، وبالتالي فالهاملتوني الكلي سوف يكون عبارة عن مجموع عشوائي ل N قطعة او قوس طول كل منها $\frac{2\pi R}{N}$ حيث R هو نصف قطر قطعة الغرافين الدائرية لدينا العلاقة التالي :

$$H = \sum_{i=1}^N H_i \dots \dots \dots (3.3)$$

حيث يعبر H_i عن القطعة رقم i والتي يمكن ان تكون من النمط Z او A ، ويعطي بالعلاقة التالي :

$$H_i = J(|\vec{R}_i, -\vec{r}|) \vec{S}_i [\text{Random}(Z, A)] \vec{S}_e \dots \dots \dots (4.3)$$

حيث $\bar{S}_i[R_{\text{and}}(Z, A)]$ نقصد به محصلة السبين للقطعة رقم (i) والتي سوف تكون عشوائية Random بين النمطين Z او A .

\bar{S}_e : هو سبين الالكترين في نقطة كيفية على سطح الجرافين داخل الحدود .
وبالتالي يصبح الهاملتوني الكلي :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{|R_i - \bar{r}| \cos(2k_F |R_i - \bar{r}|) - \sin(2k_F |\bar{R}_i - \bar{r}|)}{|R_i - \bar{r}|^4} \dots \dots \dots (5.3)$$

$\bar{S}_i(\text{Random})(A, Z)\bar{S}_e$

وحيث ان اتجاهات السبين نفسها على نفس القطعة من النمط Z او A وبالتالي سوف يتناسب

$$S_i(A) \propto \alpha l_A \dots \dots \dots (6.3)$$

$$S_i(A) \propto \beta(-l_Z) \dots \dots \dots (7.3)$$

فالمسألة سوف تؤول الى حساب المجموع التالي :

$$E(r) \propto \sum_{i=1}^N \frac{|\bar{R}_i - \bar{r}| \cos(2k_F |\bar{R}_i - \bar{r}|) - \sin(2k_F |\bar{R}_i - \bar{r}|)}{|\bar{R}_i - \bar{r}|^4} \dots \dots \dots (8.3)$$

Random(i)($l_A, -l_Z$)

حيث نقصد Random(i) باختيار عشوائي Random بين متغيرين l_A و l_Z حيث ان

$$2\pi R = \sum_A l_A + \sum_Z l_Z \dots \dots \dots (9.3)$$

وبحسابات هندسية بسيطة يمكننا ان نضع

$$|\bar{R}_i - \bar{r}| = \sqrt{R^2 + r^2 - 2rR \cos \theta_i} \dots \dots \dots (10.3)$$

حيث θ_i هي الزاوية بين \bar{R}_i و \bar{r} .

وبالتالي يمكننا كتابة المجموع السابق كما يلي :

$$E(r) \propto$$

$$\sum_{i=1}^N \frac{\sqrt{R^2 + r^2 - 2rR \cos \theta_i} \cos(2k_F \sqrt{R^2 + r^2 - 2rR \cos \theta_i}) - \sin(2k_F \sqrt{R^2 + r^2 - 2rR \cos \theta_i})}{(R^2 + r^2 - 2rR \cos \theta_i)^2} \dots \dots \dots (11.3)$$

Random(i)($l_A, -l_Z$)

لدنيا العلاقة التالية:

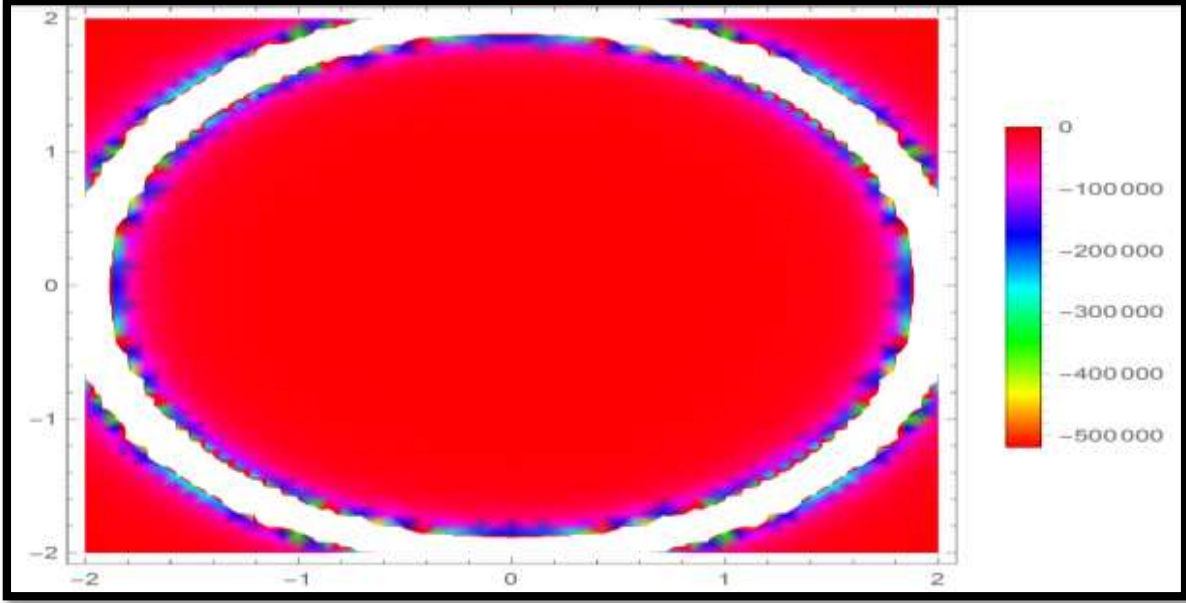
$$E(r) \propto$$

$$\frac{2\pi R}{N} \sum_{i=1}^N (i) \text{Random} \frac{\sqrt{R^2 + r^2 - 2rR \cos \theta_i} \cos(2k_F \sqrt{R^2 + r^2 - 2rR \cos \theta_i}) - \sin(2k_F \sqrt{R^2 + r^2 - 2rR \cos \theta_i})}{(R^2 + r^2 - 2rR \cos \theta_i)^2} \dots \dots \dots (12.3)$$

حيث اخدنا $|A| = |Z| = \frac{2\pi R}{N}$ وبالتالي فالعشوائية هنا تكون في اشارة وبالتالي Random هنا نقصد به عدد طبيعي عشوائي .

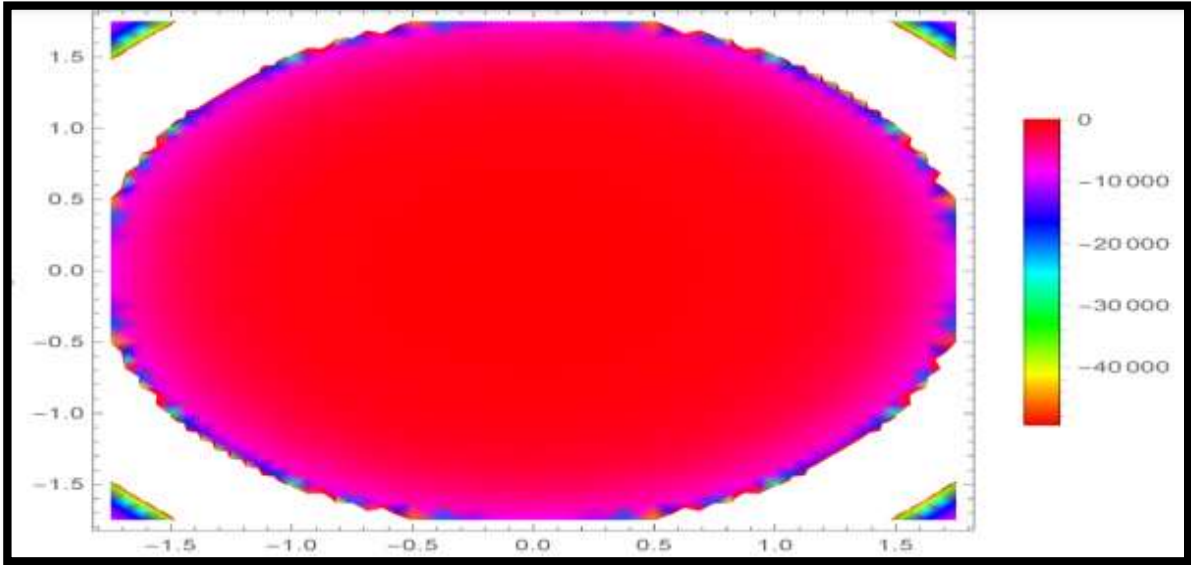
3.3. النتائج والمناقشة :

من اجل دراسة مدى تأثير هذا التفاعل على الخواص الالكترونية سوف نعتبر k_F كوحدة قياس لأشعة الموجة أي $k_F = 1$ ونقوم بدراسة كيفية توزع الطاقة والنتائج موضحة في الاشكال التالية :



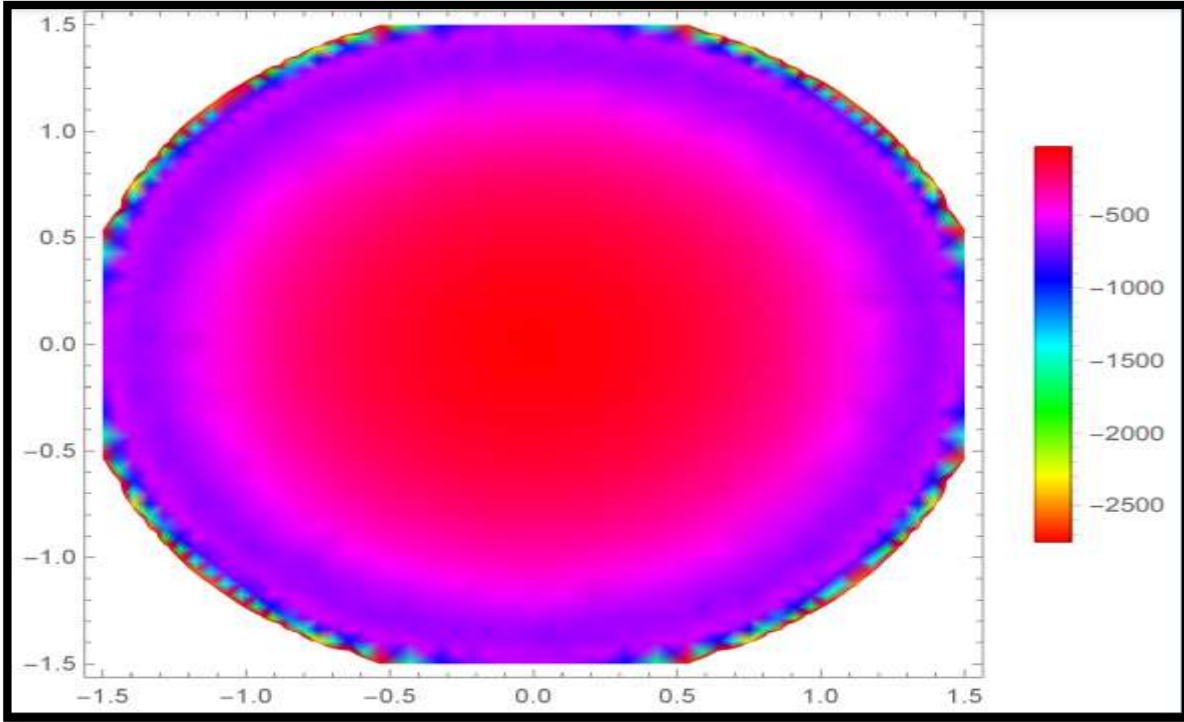
الشكل (3-7): توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 2$ و اعداد عشوائية

Random[1 – 500]



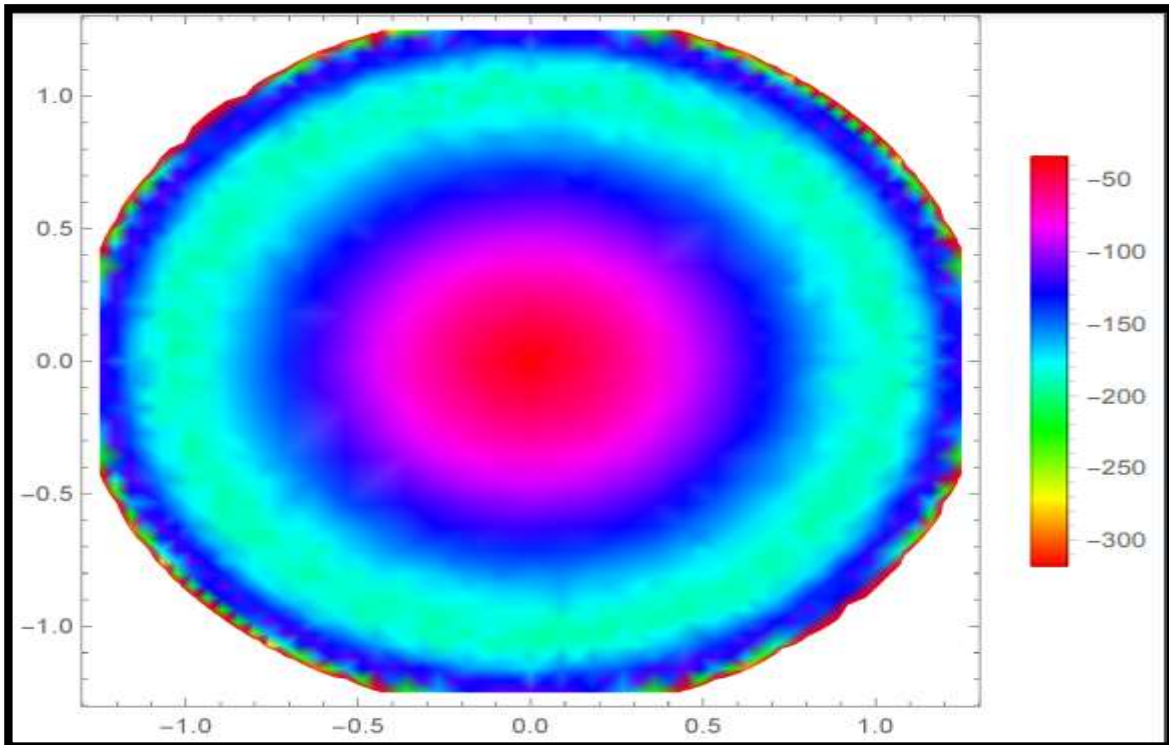
الشكل (3-8): توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 1.75$ و اعداد عشوائية

Random[1 – 500]



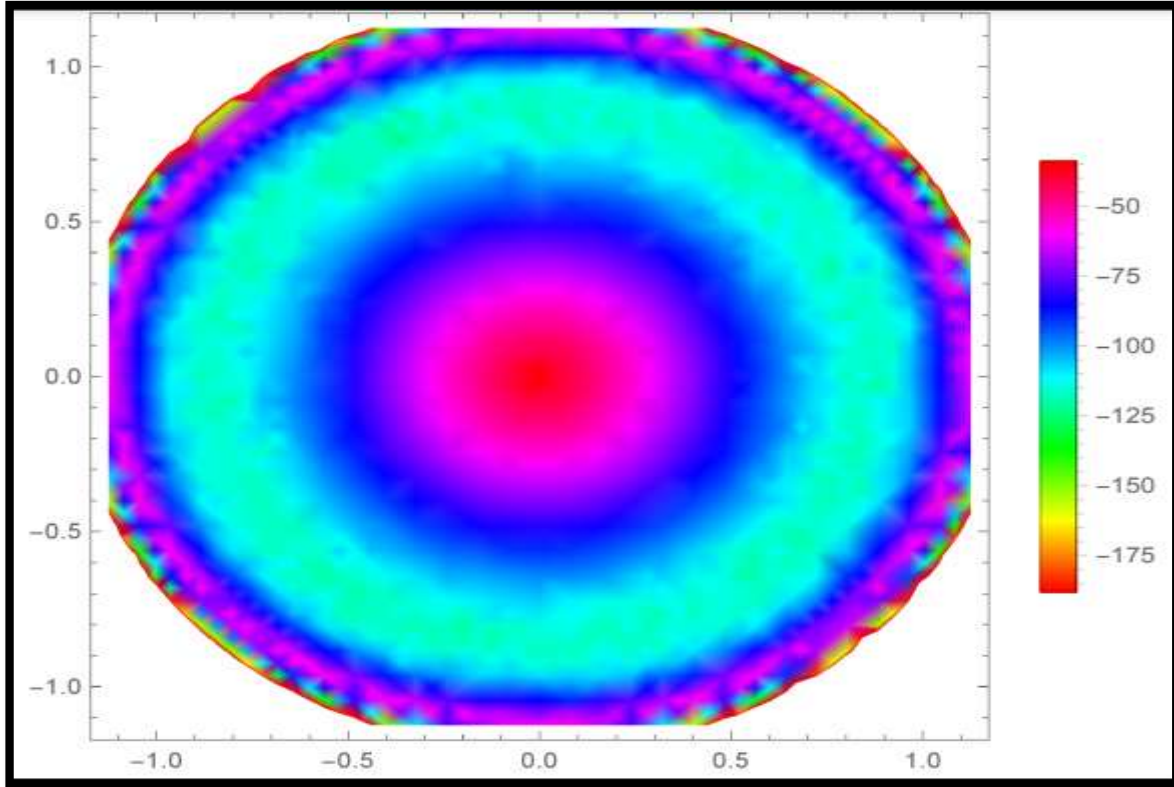
الشكل (9-3): توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 1.5$ و اعداد عشوائية

Random[1 – 500]



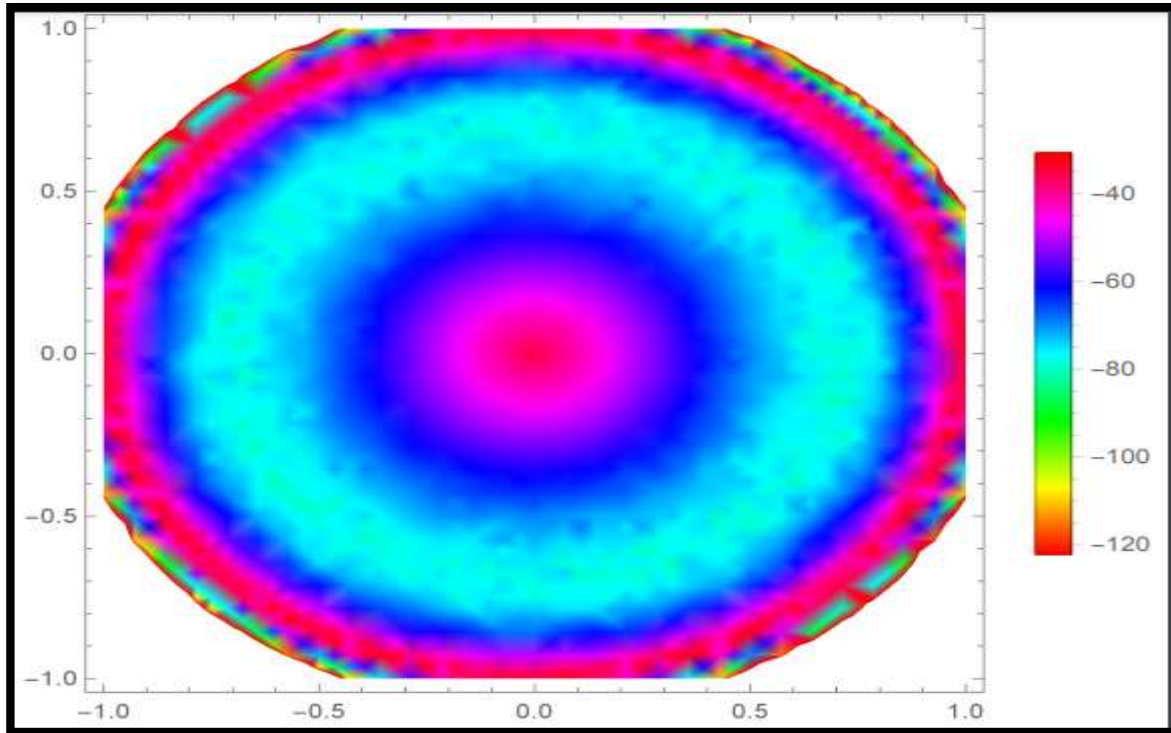
الشكل (10-3): توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 1.25$ و اعداد عشوائية

Random[1 – 500]



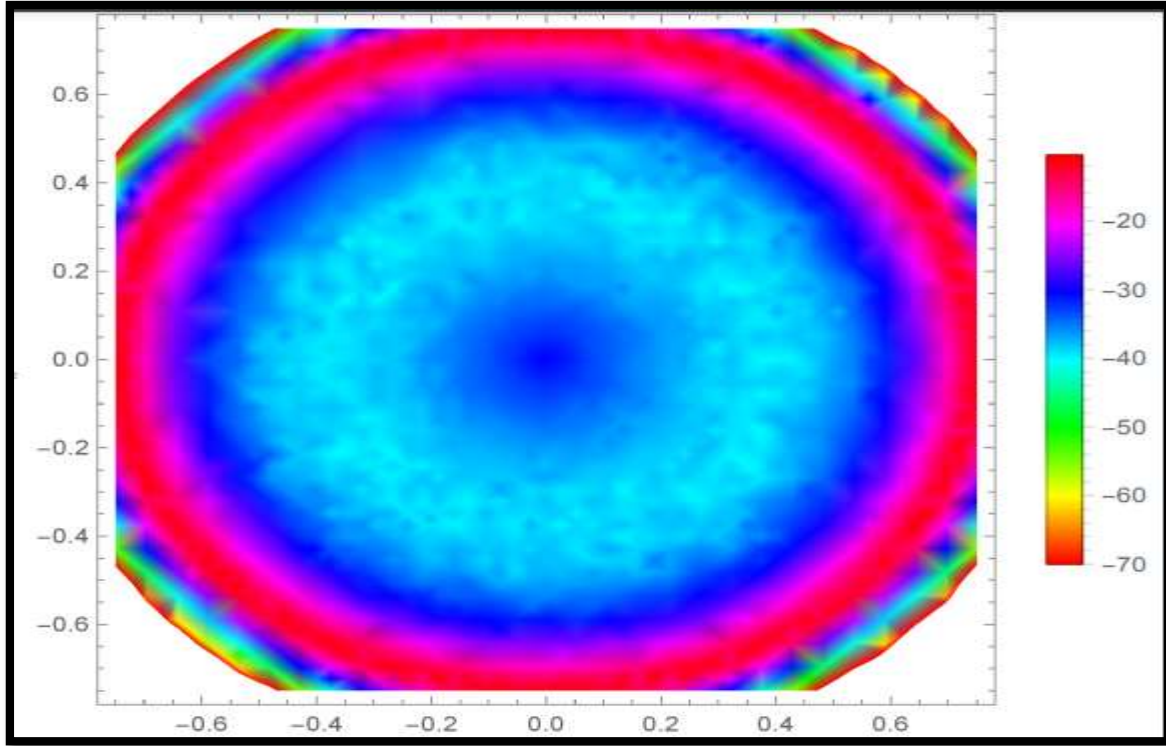
الشكل (11-3): توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 1.125$ و اعداد عشوائية

Random[1 – 500]



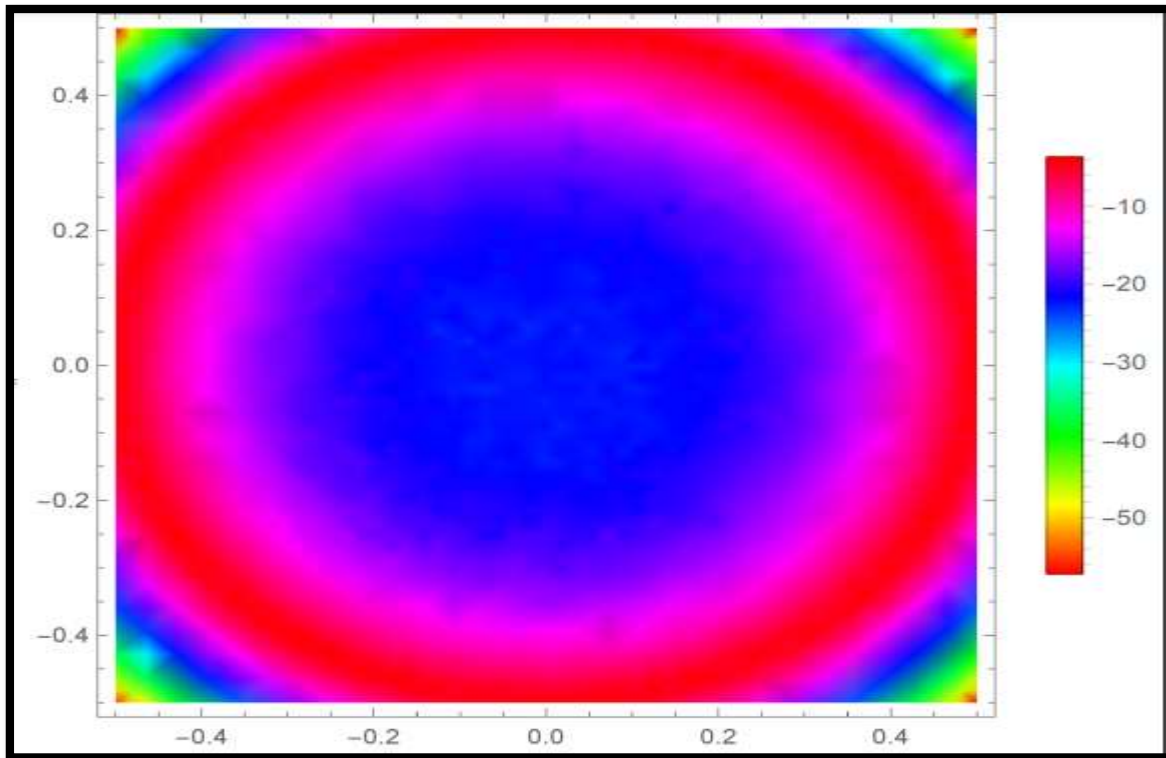
الشكل (12-3): توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 1$ و اعداد عشوائية

Random[1 – 500]



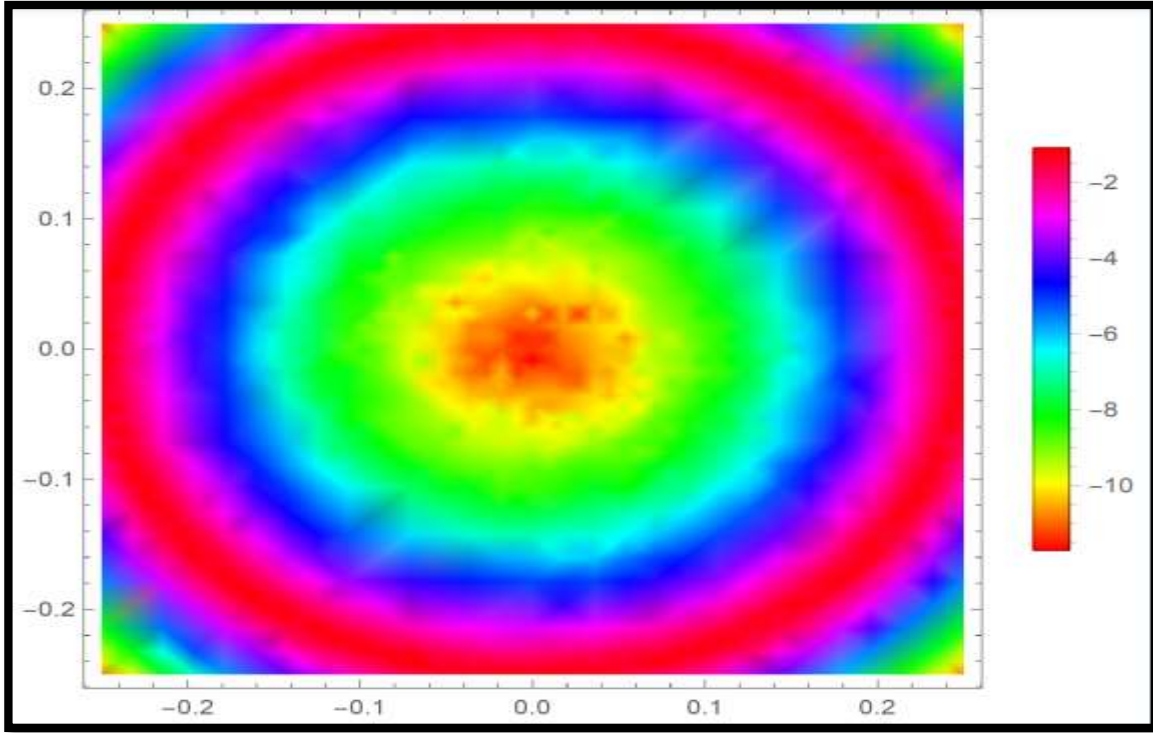
الشكل (13-3): توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 0.75$ و اعداد عشوائية

Random[1 – 500]



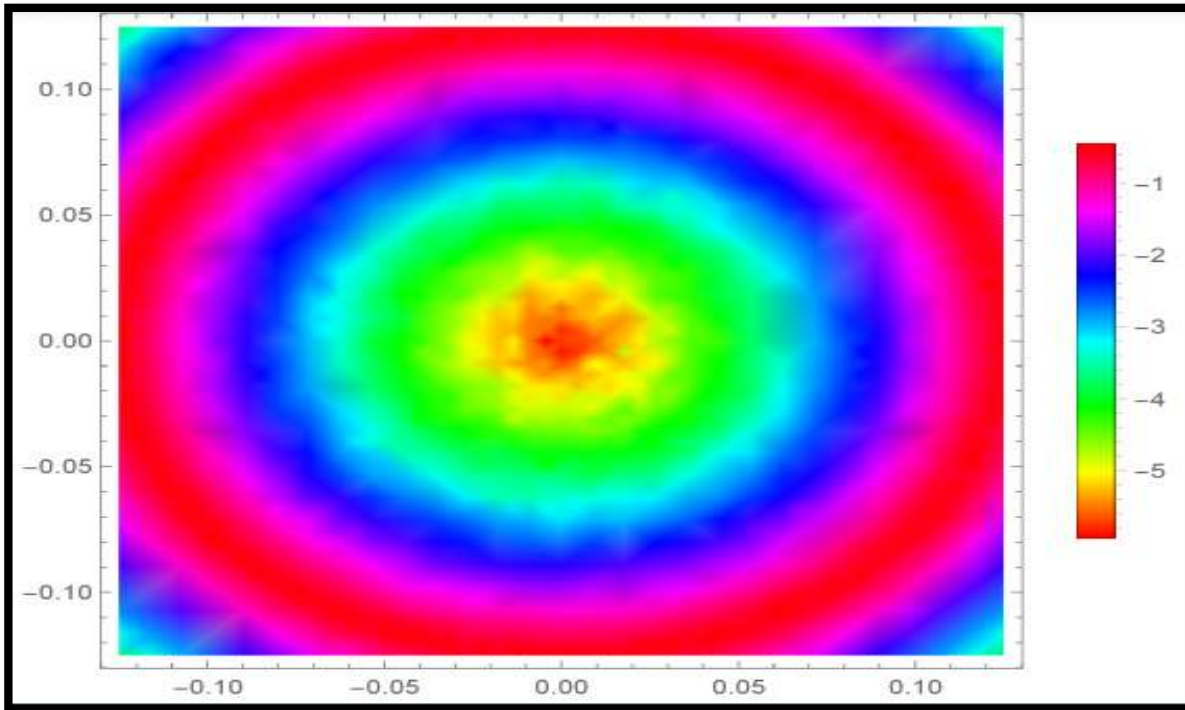
الشكل (14-3): توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 0.5$ و اعداد عشوائية

Random[1 – 500]



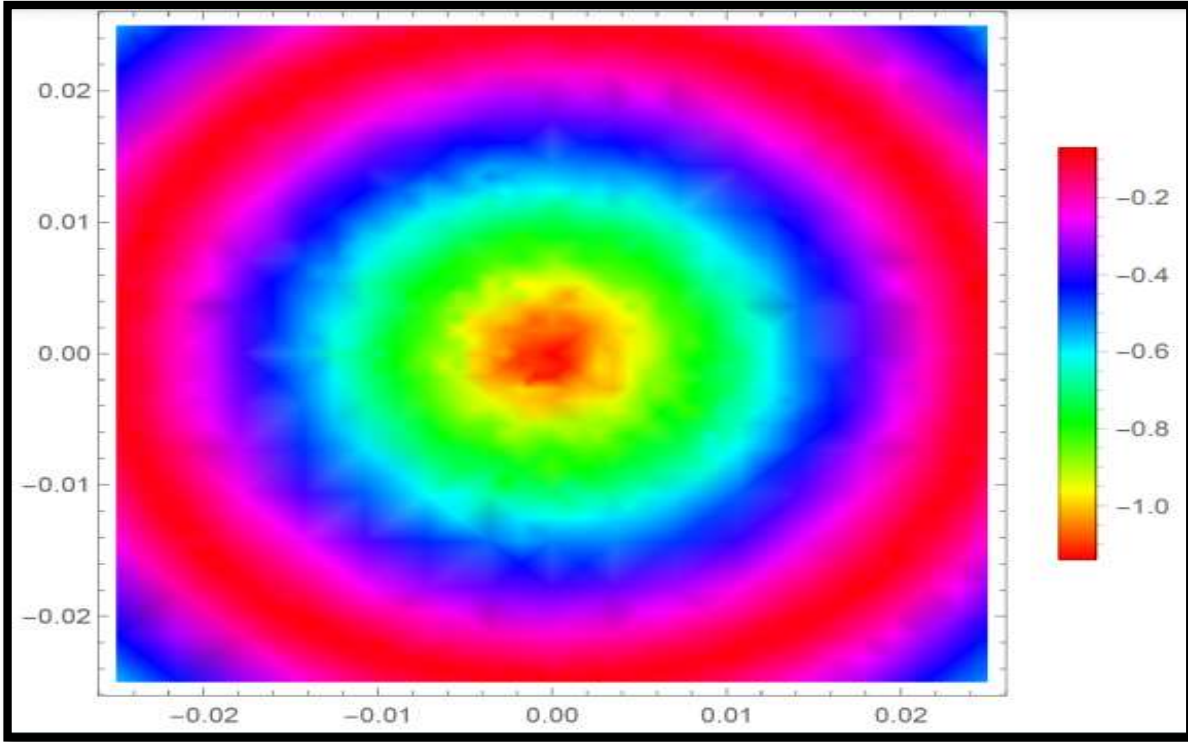
الشكل (15-3): توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 0.25$ و اعداد عشوائية

Random[1 – 500]



الشكل (16-3): توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من اجل $R = 0.125$ و اعداد عشوائية

Random[1 – 500]



الشكل (17-3): توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY من أجل $R = 0.0125$ واعداد عشوائية

Random[1 – 500]

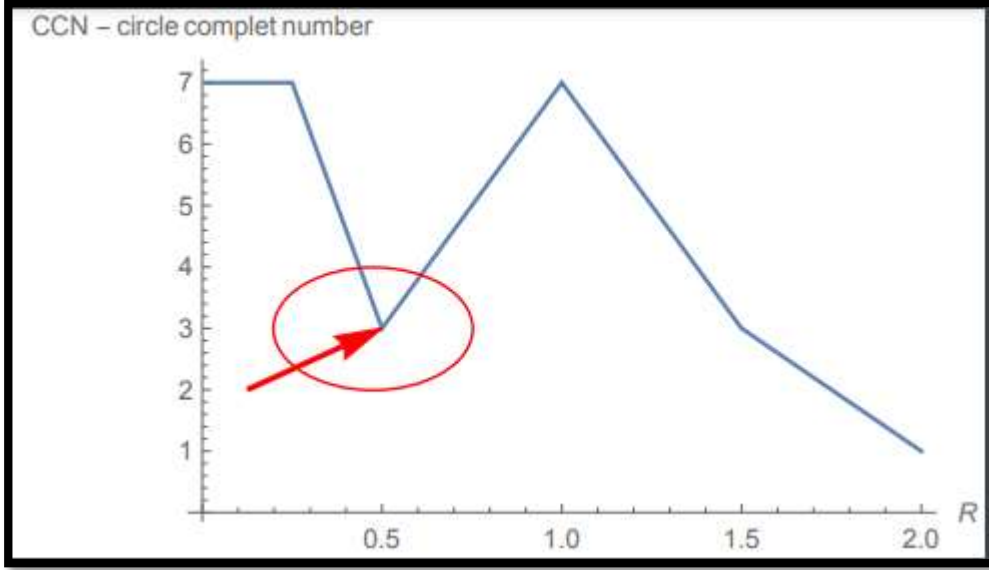
4.3. دراسة النتائج :

تظهر الاشكال التي تحصلنا عليه بعد دراسة توزيع طاقة التفاعل على سطح شبه الدائري النتائج المهمة التالية :

✓ نلاحظ ازدياد عدد الدوائر متساوية كثافة طاقة التفاعل كلما نقص نصف قطر السطح الدائري للغرافين ، وهذا يمكن تفسيره على اساس ان هذه الدوائر تنتج من عملية تداخل للتفاعل RKKY والذي هو تفاعل متخامد أي يملك سعة متناقصة مع زيادة المسافة كما في المعادلة التالية :

$$\frac{\cos(x)}{x^3} - \frac{\sin(x)}{x^4} \dots \dots \dots (13.3)$$

وبالتالي سوف لا تظهر تداخلات ، فعالة إلا بجوار محيط الدائرة في حال انصاف الاقطار الكبيرة وهذا ما يوضحه الشكل (17-3) ، والشكل التالي يوضع كيفية توزيع عدد الدوائر الكاملة مع تغير نصف القطر R.



الشكل (3-18): رسم تخطيطي لتغير عدد الدوائر المتساوية طاقة CCN بدلالة نصف القطر R.

نلاحظ وجود شذوذ من اجل $R = 0.5$ أي $R = 1/2$ وهذا يعود الى اننا اخذنا k_F كوحدة قياس ولكن عند اعادة كتابة الوحدات بشكل عادي نجد من اجل $B = 1/2\lambda_F$ ان فرق الطور $k_F R = \frac{2\pi}{\lambda_F} R = \pi$ ان الامواج في هذه الحالة تكون تقريبا متعاكسة في الطور وبالتالي سوف تتلاشي اغلبها مع بعضها البعض وهذا يفسر النقص ايجاد في CCN .

نلاحظ تنوع كبير في انماط التداخل ، مع تغير نصف القطر R وذلك لان عدد المناطق Z او A مرتبط بقيمة محيط الدائرة $2\pi R$ وحيث اننا استخدمنا متغير عشوائي [1 - 500] لعدد المناطق ، فهذا يبرر التنوع الكبير في الاشكال التي تحصلنا عليها .

✓ ان النتائج التي تحصلنا عليها هي نتائج تقريبية ، لأننا استخدمنا السطح ذو التناظر

الدائري المثالي ، ولكن في الواقع محيط الدائرة تحتوي على تعرجات من النمط Z او

النمط A ، ومع ذلك فالنتائج التي تحصلنا عليها اعطتنا نظرة مقبولة كما يحدث .

✓ من اجل الحصول على نتائج اكثر واقعية يجب اخذ التعرجات Z او A في الحسبان

أي عدم الاعتماد على التناظر الدائري ، بالإضافة الى الاستخدام مجال اوسع من قيمة

المتغير العشوائي Random اكبر من 500 الذي استخدمناه في حساباتنا وهذا يتطلب

استخدام حواسيب ذات سرعات كبيرة وهو غير متاح في حالتنا هذه.

نتيجة عامة

النتيجة العامة

تعتبر مادة الجرافين ثنائية البعد ($2D$) من اروع الاكتشافات التي تم التوصل اليها في فيزياء المواد في عصرنا الحديث ، وذلك لما تتميز به من خصائص مذهلة ، حيث تمتلك خواص كهربائية ، و مرونية ، وضوئية مذهلة ، ومع متانتها إلا انها حساسة جدا لشكل الحدود والتي يمكن ان تكون من النمط Z او A .

قمنا في هذا البحث بدراسة تأثير تنوع الانماط Z و A بشكل عشوائي ، على محيط ذو تناظر دائري نصف قطره R متغير ، واستخدمنا مجال متغير عشوائي من 1 الى 500 ، في وجود التفاعل المتخامد RKKY .

لقد تحصلنا من خلال هذا النموذج على نتائج تقريبية لما يمكن ان يحدث في الواقع ، حيث ان تغير شكل توزيع طاقة التفاعل على سطح الجرافين وتباينه سوف يؤثر على توزيع الكثافة الالكترونية وهذا سوف يؤثر بدوره على الخواص المثالية للجرافين مثل الناقلية الكهربائية ، والحرارية..... الخ.

ومن اجل التوصل الى نتائج اكثر واقعية يجب ان نراعي الشكل المميز الغير امس لحدود قطعة الجرافين التي تحوي على توزيع عشوائي متقطع للنمطين Z و A ، بالإضافة الى زيادة مجال المتغير العشوائي الى حدود اكبر بكثير من 500 ، وهذا يستدعي استخدام حواسيب فائقة السرعة.

قائمة المصادر

والمراجع

[1] Johnson, Les, and Joseph E. Meany. "Graphene: the superstrong, superthin, and superversatile material that will revolutionize the world". Prometheus Books, 2018.

[2] Koratkar, Nikhil A. "Graphene in composite materials: synthesis, characterization and applications". DEStech Publications, Inc, 2013.

[3] Berry, Vikas. "Impermeability of graphene and its applications" Carbon 2013.

[4] Duigou, Olivier. "Développement de la croissance de graphène par CVD sur cobalt, analyses morphologique et structurale". Diss. Université Paris-Saclay, 2015.

[5] Hill, Jason Edward. "*One-dimensional electron systems on graphene edges*". Diss. 2007

[6] Poumirol, Jean-Marie. " Étude des propriétés électroniques du graphène et des matériaux à base de graphène sous champs magnétiques intenses". Diss. Toulouse, INSA, 2011.

[7] Brownson, Dale AC, and Craig E. Banks. "The handbook of graphene electrochemistry". 2014.

[8] Bharech, Somnath, and Richa Kumar. "A Review on the Properties and Applications of Graphene". 2015.

[9] Clavel, Milène. " Etude de l'intégration de transistors à canal en graphène épitaxié par une technologie compatible CMOS". Diss. Université de Grenoble, 2011.

[10] Bradley, David. "Nobel Prizes 2016." 2016:

[11] Ke, Qingqing, and John Wang. "Graphene-based materials for supercapacitor electrodes—A review." Journal of Materiomics 2016.

[12] Azevedo, Joël. "Assemblage contrôlé de graphène et de nanotubes de carbone par transfert de films de tensioactifs pour le photovoltaïque". Diss. Université Paris Sud-Paris XI, 2013.

[13] Brown, Morgan A., et al. "Measurement of high carrier mobility in graphene in an aqueous electrolyte environment." *Applied Physics Letters* 2016.

[14] Ninno, D. "Lecture Notes on Graphene." 2013.

[15] Nair, Rahul Raveendran, et al. "Fine structure constant defines visual transparency of graphene." *Science* , 2008.

[16] Neto, AH Castro, et al. "The electronic properties of graphene." *Reviews of modern physics* 2009.

[17] Fuchs, Jean-Noël, Mark Oliver Goerbig, and Bernard Plaçais. "Le graphène-Quand la mécanique quantique rencontre la relativité dans un trait de crayon." *Reflets de la physique*. 2011

[18]. Al-Shurman, K. M., and H. Naseem. "CVD Graphene Growth Mechanism on Nickel Thin Films." 2014.

[19] Cohen-Tanugi, David, and Jeffrey C. Grossman. "Waterdesalination across nanoporous graphene." *Nano letters* 2012

[20]. Ray, Sekhar Chandra. "Applications of Graphene and Graphene-Oxide based Nanomaterials." 2015

[21] Barbier, Michaël. "Transport properties of nanostructures and superlattices on single" Antwerpen, July, 2012

[22] Tran, Van Truong. "*Propriétés électroniques et thermoélectriques des hétérostructures planaires de graphène et de nitrure de bore*". Diss. Université Paris-Saclay (ComUE), 2015

[23]Raza, Hassan, ed. " *Graphene nanoelectronics: metrology, synthesis, properties and applications*". Springer Science & Business Media, 2012

[24]Baskaran, Ganapathy. "Physics of Quanta and Quantum Fields in Graphene." *Graphene: Synthesis, Properties and Phenomena* 2013.

[25]Masir, Massoud Ramezani. "*Electronic Properties of Graphene in Inhomogeneous Magnetic Fields: Proefschrift*". Universiteit Antwerpen, Departement Fysica, 2012

[26]Poumirol, Jean-Marie. " *Étude des propriétés électroniques du graphène et des matériaux à base de graphène sous champs magnétiques intenses*". Diss. Toulouse, INSA, 2011 .

[27] Katsnelson, Mikhail I., and Mikhail Iosifovich Katsnel'son. "*Graphene: carbon in two dimensions*". Cambridge university press, 2012

[28] Narayanan, Rajaram, et al. "Modulation of the electrostatic and quantum capacitances of few layered graphenes through plasma processing." *Nano letters*, 2015 .

[29] DUBOIS, SM-M., et al. " Electronic properties and quantum transport in Graphene-based nanostructures". *The European Physical Journal B*, 2009.

ملخص

تتأثر الخواص المثالية لمادة الغرافين بشكل الحواف ، بسبب وجود نمطين عشوائيين A و Z . قمنا بدراسة توزيع كثافة طاقة التفاعل RKKY على سطح الغرافين ذو التناظر الدائري ، مع متغير عشوائي الى غاية 500

لقد أعطت النتائج التي حصلنا عليها توضيح لما يحدث على سطح الغرافين بسبب تغير الطبيعة المغناطيسية للحواف.

الكلمات المفتاحية : الغرافين - عشوائي - تفاعل

Abstract

The ideal properties of graphene are affected by the shape of the edges, due to the presence of two random patterns A and Z. We study the distribution of RKKY interaction energy density on the surface of graphene with circular symmetry, with random variable up to 500.

Our results give an explanation of what happens on the surface of graphene due to the change in the magnetic nature of the edges.

Keywords : graphene - random - interaction

Resume

Les propriétés idéales du graphène sont affectées par la forme des bords, en raison de la présence de deux motifs aléatoires A et Z. Nous étudions la distribution de la densité d'énergie d'interaction RKKY sur la surface du graphène avec une symétrie circulaire, avec une variable aléatoire jusqu'à 500.

Nos résultats donnent une explication de ce qui se passe à la surface du graphène en raison du changement de la nature magnétique des bords.

Mots-clés : graphène - aléatoire - interaction