



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 إمكانية تكون أنماط ثنائية الشوائب على سطح الغرافن

من إعداد:

سليمي وهيبة جدي داوود

لجنة المناقشة:

جامعة العربي التبسي

رئيس اللجنة

بروفيسور

زيار توفيق

جامعة العربي التبسي

مقرر

أستاذ محاضر أ

بوديار عبيد

جامعة العربي التبسي

ممتحن

أستاذ محاضر ب

بوقرورة حمزة

السنة الجامعية: 2021-2022

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

الإهداء

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

نهدي ثمرة جهدنا إلى من قال عزوجل

"وقضى ربك ألا تعبدوا إلا إياه وبالوالدين إحسانا"

إلى من كان معنا سندا في مواجهة الصعاب

أبي

إلى من علمتنا وعانت الصعاب لأصل مانحن فيه..... إلى الشمعة التي أنارت طريقنا

.....إلى روضة الحب التي تثبت أزكى الأزهار

أمي

إلى إخوتي وأصدقائنا الذين دعمونا وكانوا لنا سندا في إنجازي هذه المذكرة

نهدي ثمرة جهدنا المتواضع إلى كل من دفعنا إلى الوصول إلى هذا اليوم.

شكر وتقدير

أحمد الله تعالى حمدا كثيرا طيبا مباركا ملئ السموات والأرض على ما أكرمني به من إتمام هذه الدراسة التي أرجو أن تنال رضاه .

أتوجه بجزيل الشكر وعظيم الامتنان إلى كل من :

الدكتور الفاضل بوديار عبيد حفظه الله وأطال في عمره , لقبوله الإشراف علينا

واقتراحه لنا هذا الموضوع , وتكرمه بنصحي وتوجيهي حتى إتمام هذه الدراسة .

والبروفيسور توفيق زيار لقبوله ترأس اللجنة المناقشة , كما أتقدم أيضا بالشكر للأستاذ

حمزة بوقرورة وقبوله مناقشة هذه المذكرة وأتمنى أن يفيدوني بأرائهم القيمة .

كما أتقدم بوافر الشكر والتقدير إلى كافة الأساتذة المحترمين لما قدموه لي من دعم

معنوي لي خلال مشواري الدراسة والشكر للطاقم الإداري لقسم علوم المادة .

وكذلك أتقدم بالشكر والوفاء وتقديرا على كل من خفف عني مشقة البحث.

شكرا.

الصفحة	الفهرس
	فهرس الأشكال.....
	فهرس الرموز
	فهرس الجداول
1	مقدمة عامة.....
الفصل الأول : عموميات الغرافن	
3	1-1-مقدمة.....
3	1-2-تاريخ اكتشاف الغرافن.....
4	1-3- تعريف الغرافن
4	1-4-خصائص الغرافن.....
4	1-4-1-الكثافة.....
5	1-4-2-الشفافية الضوئية للغرافن.....
5	1-4-3-قوة الغرافن.....
5	1-4-4-الناقلية الكهربائية للغرافن
5	1-4-5-المرونة.....
6	1-5-بنية الغرافن.....
7	1-6-تطبيقات الغرافن.....
7	1-6-1- المجال الطبي.....
7	1-6-2- الحوسبة.....
7	1-6-3-مجال الالكترونيات.....
7	1-6-4- تنقية المياه.....
8	1-6-5- تخزين الطاقة.....
8	1-6-6- المستشعرات الحيوية.....
8	1-6-1- الشاشات الشفافة.....
9	1-7- طرق التحضير
9	1-7-1- تقنية التقشير الميكانيكي.....
10	1-7-2- طريقة الترسيب الكيميائي للبخار.....
10	1-7-1- طريقة اختزال أكسيد الغرافن.....
11	1-8- أهمية المادة في التطبيقات المستقبلية.....
11	1-9- المقارنة بين الغرافن والغرافيت.....
الفصل الثاني : الخصائص الالكترونية للغرافين	
14	1-2- وصف أصناف متباينة من الكربون
14	1-2-1- الكربون في حالته الطبيعية.....
14	1-2-1-1- الجرافيت.....

152-1-1-2 ألماس
152-1-2 عائلة الكربون الجديدة
161-2-1-2 الفوليرين
172-2-1-2 الأنابيب النانوية الكربونية
173-2-1-2 الجرافين
182-2 الخصائص الالكترونية للغرافن
181-2-2-1-2 التوزيع الالكتروني للكربون
212-2-2-2 تهجين المدارات
223-2-2-2 البنية البلورية
221-3-2-2 الشبكة الحقيقية
232-3-2-2 الشبكة العكسية
253-2-2-2 بنية العصابات والخصائص الكهربائية للغرافن
251-3-2-2-1-2 تذكير حول بنية العصابات
262-3-2-2-2 علاقة التشنت وطريقة الربط القوية
283-3-2-2-2 الالكترونات "النسيية"
294-3-2-2 النقل والموصلية
314-2-2-2 تغيرات في بنية العصابات للجرافين
311-4-2-2 طبقات الجرافين المتعددة
322-4-2-2 شرائط النانو للجرافين
331-2-4-2-2 شرائط نانوية من نوع "كرسي"
352-2-4-2-2 شرائط نانوية من نوع "متعرج"
363-2-4-2-2 الفتح التجريبي لفجوة الطاقة

الفصل الثالث : دراسة إمكانية تكون أنماط ثنائيات الشوائب على سطح الغرافن

383 مقدمة
381-3-1 حساب دالة Green
432-3-2 حساب عبارة كثافة الحالات
453-3-3 النتائج والمناقشة

نتيجة عامة

53النتيجة العامة
----	---------------------

قائمة المصادر والمراجع

55قائمة المصادر والمراجع
----	-----------------------------

قائمة الملاحق

62الملحق A
64الملحق B

فهرس الأشكال

الصفحة	العنوان	الشكل
3	هيكل نموذجي للجرافين.	الشكل (1.1)
4	بنية الغرافين.	الشكل (2.1)
6	بنية الجرافين.	الشكل (3.1)
9	نظرة عامة حول تطبيقات الجرافين.	الشكل (4.1)
9	تقنية التقشير المايكرو ميكانيكية.	الشكل (5.1)
10	تحول أكسيد إلى الغرافين.	الشكل (6.1)
14	التركيب البلوري للجرافيت (أ) والماس (ب).	الشكل (1.2)
16	الهياكل البلورية وصور SEM للفوليرين (a) والجرافين (b) والأنابيب النانوية الكربونية (c).	الشكل (2.2)
16	الفوليرين C ₆₀ يتكون من 20 سداسي و 12 خماسي.	الشكل (3.2)
17	تمثيل تخطيطي للنية البلورية لأنبوب النانوي الكربوني.	الشكل (4.2)
20	التكوين الإلكتروني لذرة الكربون في حالتها الأساسية (a) وفي حالتها المثارة (b).	الشكل (5.2)
21	آلية تهجين المدارات الذرية الكربونية sp ² .	الشكل (6.2)
22	الرسم البياني المداري الجزيئي لرابطة sp ² في الكربون (أ). رسم توضيحي للرابطة σ (b) وتراكب الجانب (c) في بنية "خلية النحل" من الجرافين. يمثل السهم الموجود على pz اتجاه دوران الإلكترون.	الشكل (7.2)
24	رسم توضيحي لشبكتي Bravais ، خلية الوحدة في شبكة الجرافين الحقيقية (أ). شبكة عكسية من الجرافين تم إنشاؤها من بأشعة الاتجاه b_1 و b_2 .	الشكل (8.2)
25	إعادة البناء الهندسي لمنطقة Brillouin الأولى (البرتقالية) في الفضاء المتبادل يتم تحديد هذه المنطقة من خلال المستويات المقسمة (في الخط المنقط) للخطوط المستقيمة التي تربط الأصل وأقرب نقاط الشبكة العكسية (في خط متصل) (a). تمثيل النقاط Γ و M و K للتناظر العالي (b).	الشكل (9.2)
26	مخطط الطاقة للحالات المختلفة لتكوين الرابطة الذرية وظهور عصابات الطاقة في بلورة (أ). تمثيل تخطيطي لبنية الموجة وفقاً لمتجه الموجة لعدة أنواع من المواد ذات الطابع الموصل أو العازل أو شبه الموصل (ب).	الشكل (10.2)
27	علاقة تشتت الجرافين: تمثيل بياني لـ (المعادلة 6.2) كدالة لأشعة الموجة kx و ky وتوسيع هذه العلاقة بالقرب من النقطتين K و K' (a). تمثيل علاقة التشتت بدالة نقاط التناظر العالية (b) والكثافة الإلكترونية للحالات (c).	الشكل (11.2)
30	تأثير ثنائي القطب (المقاومة والتوصيل كدالة لجهد البوابة Vg) لطبقة أحادية من الجرافين حول نقطة ديراك عند 5 K (أخضر) ، 70 K (أزرق) ، 300 K (برتقالي). بالنسبة إلى $E_f = 0$ ، تكون كثافة الحاملات صفر (a). بالنسبة لـ $V_g > 0$ ، يكون الجرافين عبارة عن موصل نوع p من الثقوب (b) بالنسبة لـ	الشكل (12.2)

نقول أن الجرافين موصل نوع n الذي يهيمن عليه الإلكترون (c). هنا
الحركة المقاسة $\mu = 5000 \text{cm}^2 \cdot (\text{V} \cdot \text{s})^{-1}$.

- الشكل (13.2) تمثيل علاقات التشتت بالقرب من نقاط ديراك في حالة الجرافين (أ) ، بطبقة ثنائية
(ب) ، وثلاثي الطبقات (ج) ، ومن الجرافيت
- الشكل (14.2) التركيب البلوري لكرسي (a) ومتعرج (b) GNR.
- الشكل (15.2) هيكل شريط نانوي من الجرافين في تكوين حافة متعرجة. يحدد العدد N من
الذرات عرض الشريط و x التي ترمز إلى الذرة المفقودة وبالتالي تحدد الحواف
(أ). إن طيف الطاقة وكثافة الحالات لعروض مختلفة N من الأشرطة تظهر
جميعها طابعاً معدنياً.
- الشكل (16.2) تطور فتح شريط محظور (E_g) وفقاً لعروض شرائط الجرافين المختلفة (a).
انخفاض تنقل الإلكترون لشرائط النانو (μ_{GNR}) كدالة لعرضها (b).
- الشكل (1.3) يعبر عن إمكانية تشكل ثنائيات الشوائب على سطح الجرافين .
- الشكل (2.3) يمثل حالة خمسة خطوات إنطلاقاً من الموقع 1 وإنهاءً بالموقع m .
- الشكل (3.3) تمثيل كثافة توزيع الإلكترونات في حالة $|m_i \pm 1|$ التقريب الأول.
- الشكل (4.3) تمثيل خطوط الطاقة في حالة $|m_i \pm 1|$ التقريب الأول.
- الشكل (5.3) التمثيل الطيفي للتوزيع الإلكتروني في حالة $|m_i \pm 1|$ التقريب الأول.
- الشكل (6.3) تمثيل كثافة توزيع الإلكترونات في حالة $|m_i \pm 2|$ التقريب الأول.
- الشكل (7.3) تمثيل خطوط الطاقة في حالة $|m_i \pm 2|$ التقريب الأول.
- الشكل (8.3) التمثيل الطيفي للتوزيع الإلكتروني في حالة $|m_i \pm 2|$ التقريب الأول.
- الشكل (9.3) تمثيل كثافة توزيع الإلكترونات في حالة $|m_i \pm 2|$ التقريب الأول.
- الشكل (10.3) تمثيل خطوط الطاقة في حالة $|m_i \pm 2|$ التقريب الأول.
- الشكل (11.3) التمثيل الطيفي للتوزيع الإلكتروني في حالة $|m_i \pm 2|$ التقريب الأول.
- الشكل (12.3) تمثيل كثافة توزيع الإلكترونات في حالة $|m \pm 1|$ التقريب الثاني.
- الشكل (13.3) تمثيل خطوط الطاقة في حالة $|m \pm 1|$ التقريب الثاني.
- الشكل (14.3) التمثيل الطيفي للتوزيع الإلكتروني في حالة $|m \pm 1|$ التقريب الثاني.
- الشكل (15.3) تمثيل كثافة توزيع الإلكترونات في حالة $|m \pm 2|$ التقريب الثاني.
- الشكل (16.3) تمثيل خطوط الطاقة في حالة $|m \pm 2|$ التقريب الثاني.
- الشكل (17.3) التمثيل الطيفي للتوزيع الإلكتروني في حالة $|m \pm 2|$ التقريب الثاني.
- الشكل (18.3) تمثيل كثافة توزيع الإلكترونات في حالة $|m \pm 3|$ التقريب الثاني.
- الشكل (19.3) تمثيل خطوط الطاقة في حالة $|m \pm 3|$ التقريب الثاني.
- الشكل (20.3) التمثيل الطيفي للتوزيع الإلكتروني في حالة $|m \pm 3|$ التقريب الثاني.

الرموز

الرمز	التسمية
$\psi_{nlm}(\vec{r}, t)$	دالة الموجة.
m^*	الكتلة الفعالة التي تحل محل كتلة الإلكترون في البلورة والتي تعتمد على خصائص الشبكة.
$V(\vec{r})$	الطاقة الكامنة.
\hbar	ثابت بلانك.
n	عدد الكم الأساسي الذي يحدد طبقة الإلكترون ومستوى طاقة الإلكترون حول النواة.
L	عدد الكم المداري.
M	رقم الكم المغناطيسي الذي يصف الاتجاه المكاني لمدار.
S	السين.
\vec{a}_1, \vec{a}_2	أشعة التحويل التي تربط ذرتي كربون متطابقتين A أو B.
\vec{K}	فضاء الأشعة الموجية.
E_-	نطاق التكافؤ.
E_+	نطاق التوصيل.
v_f	سرعة فرمي.
C^*	السرعة الفعالة للضوء المماثلة لسرعة فيرمي v_f .
σ	الموصلية الكهربائية.
μ	قابلية تنقل حاملات الشحنة المختلفة.
\mathcal{H}_0	الهاملتوني الغير مضطرب .
\mathcal{H}_1	اضطراب .
$1Bz$	منطقة بريلوان الاولى.
$\Delta(I)$	الطاقة الذاتية
\square	كثافة الحالة
$E(\mathbf{k})$	الطاقة
$G(\mathbf{z}), G_0(\mathbf{z})$	دوال Green
$T(\mathbf{Z})$	مؤثر التشتت

فهرس الجداول

الصفحة	العنوان	الجدول
12	المقارنة بين الجرافن والجرافيت.	(1.1)
19	جدول المدارات الذرية (حلول معادلة شرودنجر) وفقاً لـ n (من 1 إلى 3) و l و m . يمكن لكل من هذه المدارات أن تستوعب إلكترونين من سبين s مختلف.	(1.2)
31	مقارنة بين الخصائص الإلكترونية المختلفة (عرض الفجوة وسرعة التشبع ومتوسط المسار الحر وتنقل الإلكترون) عند 300 k كلفن للعديد من أشباه الموصلات مع الجرافين لكثافة شحنة معينة تبلغ 10^{12} c .	(2.2)

مقدمة
علماء

مقدمة عامة:

لقد مرت الصناعات عبر التاريخ البشري بتطورات اعتمدت على مواد مميزة , فاكشاف البترول أدى إلى عصر البلاستيك ثم بعده عصر أنصاف النواقل والتي لعب فيها الترانزستور دورا مهما, أما الان فنحن على أبواب عصر جديد هو عصر الغرافن .

فالغرافن مادة مميزة جدا تمتلك مجموعة من الخواص فلما تجتمع في مادة واحدة, فهي أكثر ناقلية من النحاس بمئات المرات , مع أنها سمكها هو ذرة واحدة , كما أنها من أقوى المواد وأكثرها مرونة, وأكثرها تشتيتا للحرارة, بالإضافة إلى شفافيتها وكيفية تفاعلها المميز مع الضوء الخ

كل هذه الخواص مكنت الغرافن من فرض نفسه في جميع التكنولوجيات الحديثة: من صناعة البطاريات إلى الخلايا الشمسية. بالإضافة إلى استعمالات أخرى مهمة مثل تصفية المياه وخواص أخرى لايتسنى لنا ذكرها في مقدمة مختصرة , كما أن عملية تطعيم الغرافن ببعض الشوائب يؤدي إلى التنوع في خصائصه الفيزيائية ويمكن تحويله من شبه معدن إلى نصف ناقل أو عازل بالإضافة إلى إمكانية التحكم في خواصه المغناطيسية. إن إستعمال الغرافن من أجل تصفية بعض المحاليل أو المياه سوف يؤدي إلى ظهور عدد كبير من الشوائب ودراسة تشكل الثنائيات هي أحد المقاييس التي تدل على فعالية أو عدم فعالية الغرافن في تصفية هاته المحاليل. و بسبب أهمية هذا الموضوع فقد حاولنا التطرق إليه من وجهة المحاكاة عن طريق إستخدام خواص دوال Green .

ولذلك فقد قمنا بتقسيم المذكرة إلى ثلاثة فصول حيث تكلمنا في الفصل الأول عن الخواص الفيزيائية للغرافن وكذلك بعض استخداماته في مجالات مختلفة , ثم تطرقنا في الفصل الثاني إلى دوال غرين وعلاقتها بدراسة في الجسم الصلب وفي الأخير قمنا بعملية محاكاة لتوزيع الكثافة الإلكترونية معتمدين على عشوائية اتجاهات المدارات الذرية , حيث استخدمنا في ذلك برنامج Mathematica, ثم قمنا بمناقشة ومحاولة تفسير بعض النتائج .

الفصل الأول :

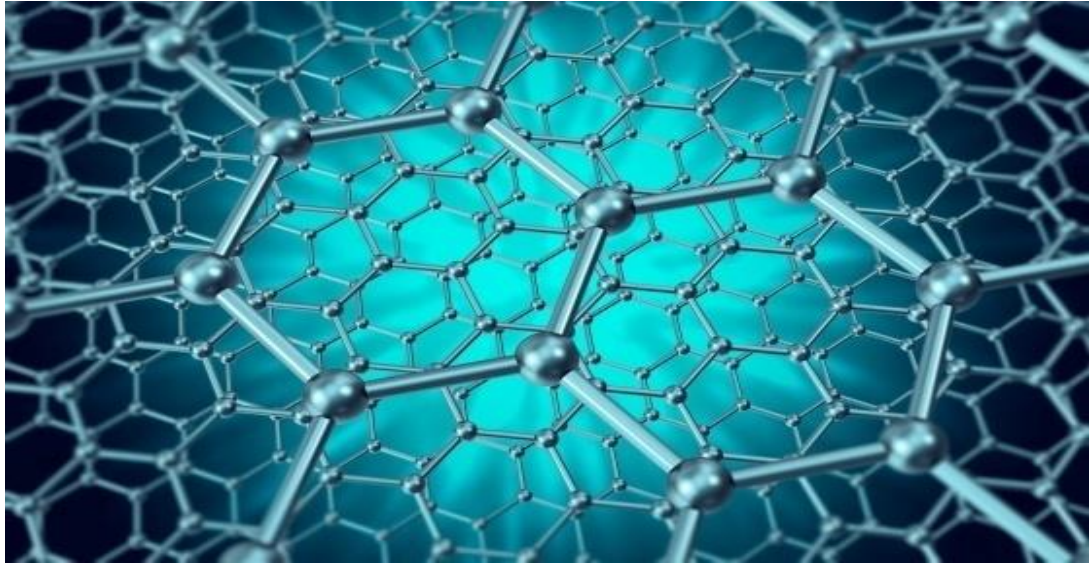
عموميات حول الغرافن

1- المقدمة :

نقدم في هذا الفصل معلومات عامة حول الجرافين واستخداماته وكذا تطبيقاته في مختلف المجالات, كما نتعرف أيضا على طرق تحضيره وأهمية المادة .

2-تاريخ اكتشاف الجرافين :

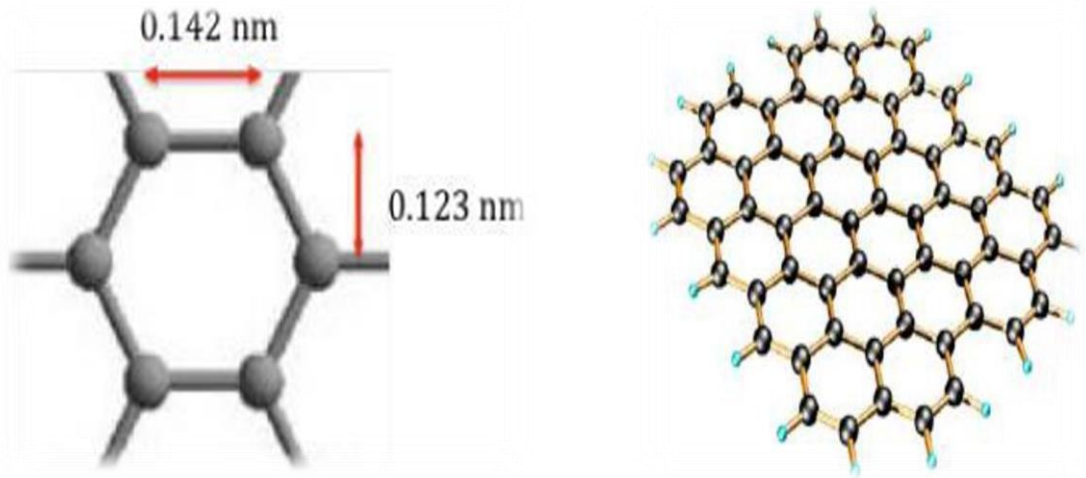
لا يمكن رؤية طبقات الجرافيت إلا عبر الفحص المجهرى ومن خلال التقشير الكيميائي, كانت هناك عدة محاولات لإنشاء أغشية رقيقة من الجرافيت عن طريق التقشير الميكانيكي بدءا من عام 1990 إلى غاية 2004 ولكن لم تكن هناك أي نتيجة لإنتاج الجرافين, إلا أن المادة اكتسبت اهتماما كبيرا, في عام 1947 وضع فيليب ار والاس نظرية وجود الجرافين كمحاولة لفهم الخصائص الالكترونية للجرافيت ثلاثي الأبعاد, ظهر مصطلح الجرافين أول مرة سنة 1987 واستخدم لوصف صفائح الجرافيت الفردية [1], ابتكر الباحثان K. S. Novoselov et A. Geim من أصول روسية في جامعة مانشستر البريطانية سنة 2004 الجرافين أحادي الطبقة باستعمال شريط لاصق وتتضمن هذه الطريقة وضع شريط لاصق على الجرافيت وسحبه بعيدا لخلع طبقة واحدة من الجرافين ولا يزال يستخدم حتى اليوم للحصول على رقائق طبقة ذرية واحدة ومن خلال هذه النتائج للباحثان وتوصلهما لمادة الجرافين تحسلا على جائزة نوبل للفيزياء عام 2010 فهي أول مادة ثنائية الأبعاد في العالم فالبطاريات المصنوعة من الجرافين تحمل شحنة اكبر وتدوم لفترة أطول فهو يتمدد بالبرودة ويتقلص بالحرارة [2].



الشكل (1) : هيكل نموذجي للجرافين [3]

3- مفهوم الجرافين :

الجرافين هو طبقة ذرية واحدة من سداسي الكربون , جلب اهتمام الكثير من البحوث بسبب بنيته الفريدة من نوعها . وخصائصه الاستثنائية [4] فالجرافين هو مادة ثنائية الابعاد 2D يتألف من ذرات الكربون النقية فقط ذات التهجين SP^2 التي تكون مرتبة في شبكة سداسية منتظمة مشابهة لبيوت النحل المتراصة إن الجرافين يعد وحدة البناء الأساسية لمادة الجرافيت, والجرافين هو احد المواد النانو كربونية[5] .



الشكل (1).: بنية الجرافين [5].

4- خصائص الجرافين:

الجرافين مادة فريدة من نوعها بسبب هيكلها الكربوني وابرز خصائصها هي:

4-1-الكثافة:

تحتوي الخلية السداسية للوحدة من الجرافين على ذرتين من الكربون وتبلغ مساحتها $0,052 \text{ nm}^2$ مربع وبالتالي يمكننا حساب كثافته على أنها $0,77 \text{ mg/m}^2$. وبالتالي فان 1 m^2 المصنوع من الجرافين يزن $0,77 \text{ mg}$.

4-2- الشفافية الضوئية للجرافين :

معدل امتصاص الضوء لطبقة واحدة من الجرافين 2.3% , لضوء ذو الطول الموجي 550nm

الغرافين جزء صغير يعكس الضوء المرئي المتساقط عليه لذلك يعتبر مادة شفافة وتقدر شفافيته ب 79.9 [6].

4-3- قوة الجرافين :

تبلغ قوة كسر الجرافين $42 N/m$, الصلابة لديه قوة كسر في نطاق

$250 - 1200 MPa = 0,25 - 1,2 \times 10^9 N/m^2$ أقوى ب 100 مرة من الفولاذ فهو مادة قوية جدا وذلك راجع للرابطة التساهمية القوية بين كل ذرة كربون تعطي الجرافين ثباتا كبيرا وقوة شد عالية فهو أصلب من الألماس.

4-4- الناقلية الكهربائية للجرافين :

أفضل من موصلية النحاس ب 13 ضعف تقريبا ,حيث يسمح الترتيب الذري الفريد لذرات الكربون بسهولة وسرعة انتقال الإلكترونات فيه دون تشتت وبالتالي يوفر طاقة عادة ما تضيع في الموصلات الأخرى [7] .

4-5- مرونة عالية:

الروابط بين ذرات الكربون روابط مرنة فالغرافين قابل للانحناء فهو غير قابل للكسر مما يعني أن الغرافين مادة قابلة للحنى والتمديد.

كما أنه هناك خصائص أخرى وهي :

كثافة عالية لاتسمح بمرور ذرات الهيليوم .

استهلاك منخفض للكهرباء مقارنة بالمركبات الأخرى.

مادة خفيفة جدا.

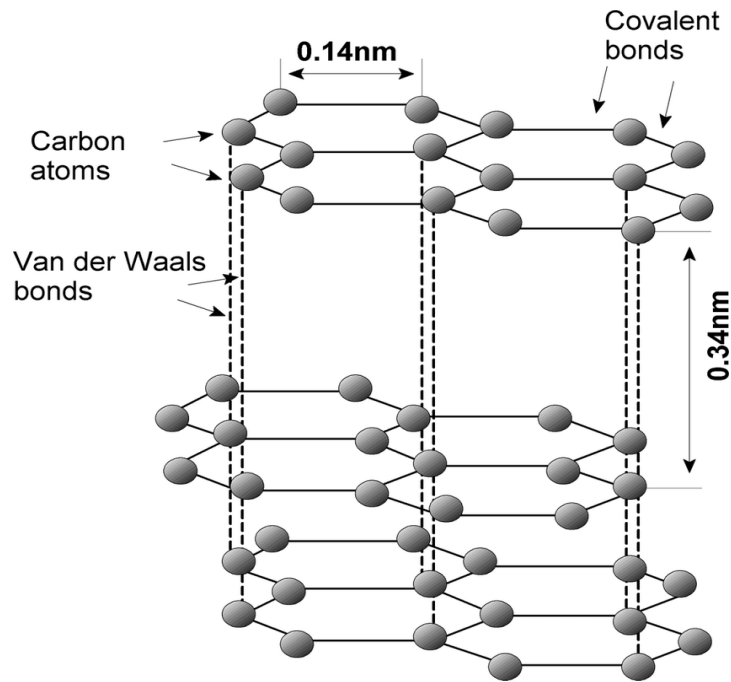
فهو يمثل فئة جديدة من الناحية المفاهيمية من المواد التي لايزيد سمكها عن ذرة واحدة.

توصيل حراري فهو يقوم بتوصيل الحرارة 10 مرات أفضل من النحاس والفضة.

حركة الإلكترون للجرافين أسرع من أي مادة معروفة [8].

5- بنية الجرافين :

- 1- إنها شبكة سداسية من ذرات الكربون مرتبطة تساهميا يؤدي تهجين sp^2 بين مداري s و p الى بنية مستوية مثلثية مع تكوين رابطة σ بين ذرات الكربون التي تفصل بينها 1.42 \AA [9].
- 2- تعتبر شبه معدنية حيث أن نطاقي التوصيل والتكافؤ يتلامسان مع بعضهما البعض.
- 3- ترتبط ذرات الكربون بثلاث ذرات أخرى فقط على الرغم من قدرتها على الارتباط بذرة رابعة.
- 4- يتم تثبيت صفائح الجرافين معا بواسطة القوة الكهروستاتيكية المسماة برابطة فاندر وولز.
- 5- يبلغ سمك كل ورقة من الجرافين ذرة واحدة فقط وتعتبر كل ورقة بمثابة جزيء واحد.
- 6- كل ذرة على السطح يمكن الوصول إليها من كلا الجانبين لذلك هناك تفاعل أكبر مع الجزيئات المحيطة.



الشكل (1) : بنية الجرافين [9]

6- تطبيقات الغرافن :

للغرافن العديد من المجالات التي يمكن تطبيقها ومنها [10]:

1-6- المجال الطبي:

وتشمل التطبيقات تطوير أجهزة الاستشعار الكهروضوئية وأجهزة التصوير الحيوي . كما يمكن أيضا استخدام الجرافين لإنتاج معدات جراحية أكثر فعالية في العمودي الفقري .

2-6- الحوسبة :

يمكن استخدام الجرافين لتحسين قوة معالجة رقائق الكمبيوتر .في يناير 2014 أعلنت شركة IBM أنها صنعت شريحة جرافين أسرع ب10000 مرة من الرقائق القياسية . كانت هذه شريحة تناظرية , وليست رقمية , بسبب فجوة نطاق الجرافين .ولكن من الأرجح أن يجلب لنا البحث والتطوير في المستقبل أجهزة كمبيوتر مزودة بوحدات معالجة مركزية قائمة على الجرافين والتي تكون أقوى من أجهزتنا الحالية بعدة أوامر من حيث الحجم ,وتستهلك طاقة اقل .

3-6- في مجال الإلكترونيات :

لطالما كان المتحمسون يروجون لإمكانية الجرافين في استبدال السليكون في الدوائر الكهربائية الشائعة, لكن الفجوة في النطاق لاتزال تمثل التحدي . ومع ذلك فان شفافية الجرافين ومرونته ستحول بلا شك مجال الإلكترونيات في النهاية .جرب علماء بطاريات الشحن السريع ,وسماعات الرأس عالية الجودة,والإلكترونيات المرنة , وأجهزة استشعار الصور الأكثر قدرة ,وشاشات اللمس غير القابلة للكسر تقريبا قد يؤدي دمج الجرافين في مجال الإلكترونيات الضوئية الى التطوير النهائي".

4-6- تنقية المياه:

يعمل الجرافين على تنقية المياه ,مما يجعله أكثر مواد تنقية المياه المتاحة فعالية . تمتلك شركة لوكهيد مارتن مرشح الجرافين للمياه قيد التطوير ,والذي يزعمون أنه سيقفل من تكاليف الطاقة لمحطات تحلية المياه بنسبة 99% لكنه لم يطرح في السوق بعد. لايزال إنتاج الجرافين يمثل تحديا , لكن أكسيد الجرافين الذي يسهل إنتاجه ,له خصائص مماثلة متعلقة بالمياه وهو أسهل

بكثير وأرخص في الإنتاج . لكن أن يلعب دورا مهما فقط في زيادة كمية مياه الشرب في جميع أنحاء العالم , ولكن يمكن أن يكون له تأثير هائل على طرق تطهير الكحول.

6- مواد العزل المائي :

في حين أن الجرافين هو مرشح مياه فعالة للغاية , فقد وجد الباحثون في جامعة فاندربيلت طرقا لتطبيقه على مواد أخرى بطرق تجعل هذه المواد إما فائقة الامتصاص أو شديدة الطرد . هذا له إمكانات تجارية هائلة عندما تفكر في المواد المقاومة للماء والالكترونيات . حيث تعمل شركة نوكيا بالفعل على تطوير هاتف ذكي مقاوم للماء.

6-5- تخزين الطاقة :

إن قدرة الجرافين على توصيل الحرارة والكهرباء بشكل فعال للغاية تساعد في تطوير بطاريات سريعة الشحن . بطاريات الهواتف الذكية النموذجية من الجرافين قيد التطوير في جامعة كاليفورنيا وفي أي مكان آخر يتم شحنها بالكامل في ثوان معدودة. يتم استكشاف المكثفات الفائقة القائمة على الجرافين للاستخدام النهائي في الهواتف المحمولة والأجهزة المحمولة الأخرى .

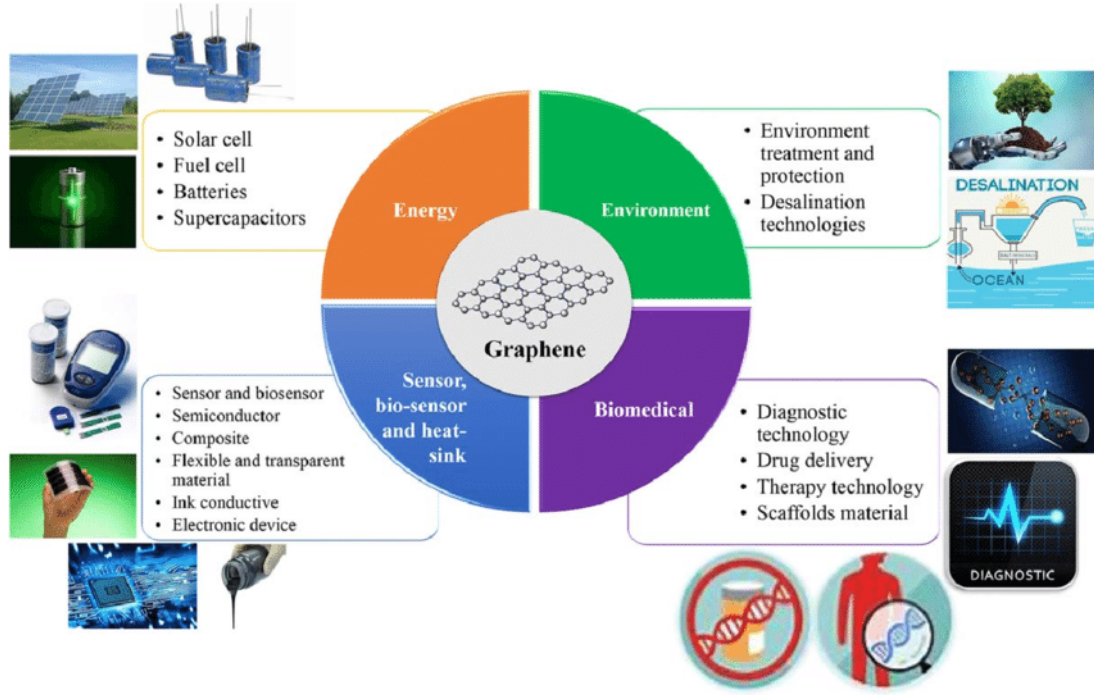
مع استمرار البحث والتطوير في الجرافين , سيتم دمجها بلا شك في إنتاج الخلايا الكهروضوئية التجارية والعسكرية .

6-6- المستشعرات الحيوية:

يستخدم الجرافين في أجهزة الاستشعار عن بعد باستعمال قاعدة من الجرافين للكشف عن العلامات البيولوجية المتعلقة بالخلايا السرطانية وهذا في علم البيولوجي.

6-7- الشاشات الشفافة :

استخدم الجرافين في شاشات الهواتف الذكية وأجهزة التسجيل الصوتي كما تستخدم أيضا في هندسة الطيران لكونه مادة خفيفة.



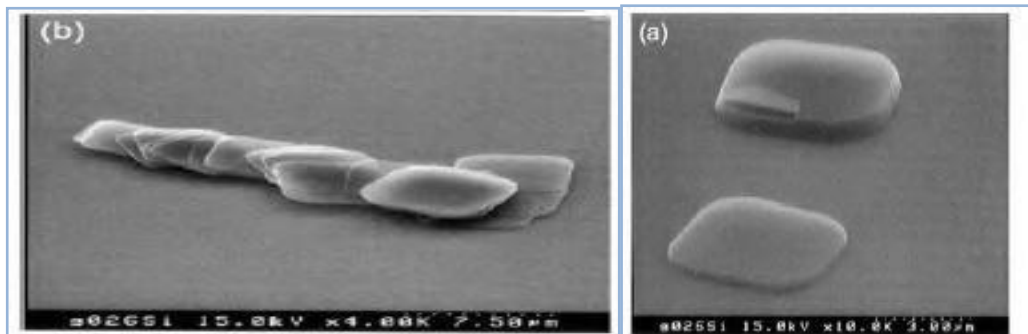
الشكل (1): نظرة عامة حول تطبيقات الجرافين [11]

7- طرق تحضير الجرافين:

هناك ثلاث طرق لتصنيع الجرافين وهي :

7-1- تقنية التقشير الميكانيكي:

وهي معروفة منذ سنة 2004 وهي تقنية الشريط اللاصق من خلال لصقه على الجرافيت وانتزاعه ليترك خلفه العديد من طبقات الجرافين على سطحه ليتم إعادة تقشير الطبقات الموجودة على سطح الشريط اللاصق بواسطة شريط لاصق آخر وهكذا حتى نحصل على طبقة واحدة من الجرافين [12].



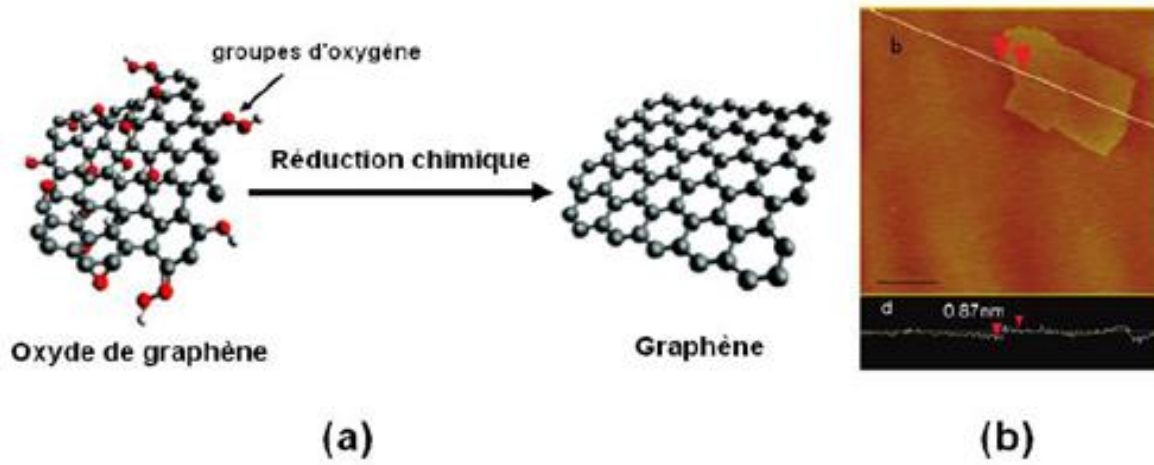
الشكل (1.5): تقنية التقشير الميكانيكي [12]

7-2- طريقة الترسيب الكيميائي للبخار:

يتم تسخين المعدن المراد عمل الترسيب عليه إلى درجات عالية ثم نمرر غاز يحتوي على الكربون فيترسب الجرافين على سطح المعدن ثم نستخدم بوليميرا ونقوم بنفس ماقمنا بعمله في حالة التفشير الميكانيكي لانتزاع الجرافين من سطح المعدن وهذه الطريقة تنتج مادة الغرافين بكميات كبيرة [13].

7-3- طريقة اختزال أكسيد الغرافين:

حيث يمكن تحضيره بأكثر من طريقة على سبيل المثال بواسطة نقع الجرافيت في محلول حمض الكبريتيك وبرمنجنات البوتاسيوم, وعن طريق الموجات فوق الصوتية يمكن تحويل أكسيد الجرافيت إلى أكسيد الجرافين أحادي الطبقة والذي يمكن تحويله إلى جرافين عن طريق اختزاله كيميائيا أو حراريا أو كهر وكيميائيا , وتمتاز تلك الطريقة بسهولة وانخفاض تكلفتها [12].



الشكل (1): (a) الاختزال الكيميائي لأكسيد الجرافين إلى الجرافيت (b) صورة لورقة نانوية من الجرافين مخفضة كيميائيا. [14]

وهناك أيضا تقنيات أخرى.

فك ضغط الأنابيب النانوية الكربونية: واحدة من أحدث تقنيات تصنيع الجرافين , وأيضا الانحلال الحراري للجرافين. [15]

8- أهمية المادة في التطبيقات المستقبلية:

يمكن أن يساعد الجرافين في تحقيق مستقبل العلم والتكنولوجيا في وقت اقرب وهناك العديد من الاختراعات العميقة التي نتطلع إليها في المستقبل [16].

وقود من الجو : اظهر الباحثين البريطانيين انه يمكن استخدام الجرافين كغشاء لتبادل البروتونات في خلايا الوقود كما انه يمكن استخدام أغشية الجرافين لإخراج غاز الهيدروجين من الغلاف الجوي.

المزيد من مياه الشرب : حيث يمكنه المساعدة من خلال الأغشية المصنوعة من الجرافين التي تعمل على تصفية الملح وتسمح بمرور المياه نظيفة.

عالم بلا صدأ : نظرا لأنه غير منفذ تقريبا يمكن استخدام طبقة من الطلاء القائم على الجرافين يوما ما للقضاء على التآكل والصدأ.

واجهات لمسية جديدة : طبقات الجرافين رقيقة جدا وهي تكاد تكون غير مرئية للعين البشرية ، وقد تم عرض استخدامها في بناء شاشة تبدو شفافة.

9-المقارنة بين الجرافيت والجرافين :

الجرافيت هو المادة الكربونية المرنة التي يصنع منها قلم الرصاص, وهو يتكون من مجموعة من ذرات الكربون التي تتراص فوق بعضها البعض بدون تماسك.أي أنه يمكن سحب طبقات الجرافيت بسلاسة وسهولة, وهذا هو سبب سهولة الكتابة بقلم الرصاص, فيتم في المرة الواحدة سحب أكثر من طبقة الجرافيت دفعة واحدة. أما الجرافين فهو طبقة واحدة فقط من ذرات الكربون من الجرافيت ,فهو أقوى مادة , مادة شفافة الذرات بها ترتبط عن طريق روابط تساهمية [17]

الجدول (1) : المقارنة بين الجرافن والجرافيت [17]

الجرافيت	الجرافن	التعريف
تأصل ثابت من الكربون له هيكل بلوري وشكل من أشكال الفحم.	طبقة واحدة من طبقات متعددة في الجرافيت .	
تأصل من الكربون يحتوي على عدد كبير من صفائح الكربون.	لوح كربون واحد من الجرافيت	عدد الصفائح الكربونية
هش يظهر باللون الأسود الحديدي الى الرمادي الصلب وله بريق معدني.	أقوى مادة تم اختبارها شبه شفافة	القوة المظهر الخارجي
ترتبط ببعضها البعض عن طريق روابط تساهمية ,ذرة كربون واحدة لها ثلاث روابط تساهمية حولها ويوجد إلكترون واحد.	لديه 4روابط بما في ذلك 3 روابط سيجما حول ذرة كربون	الرابطه الكيميائية
يستخدم في الحرارية , والبطاريات وصناعة الحديد , زيوت التشحيم .	يستخدم في إنتاج الأنابيب النانوية الكربونية .	الاستخدامات

الفصل الثاني:

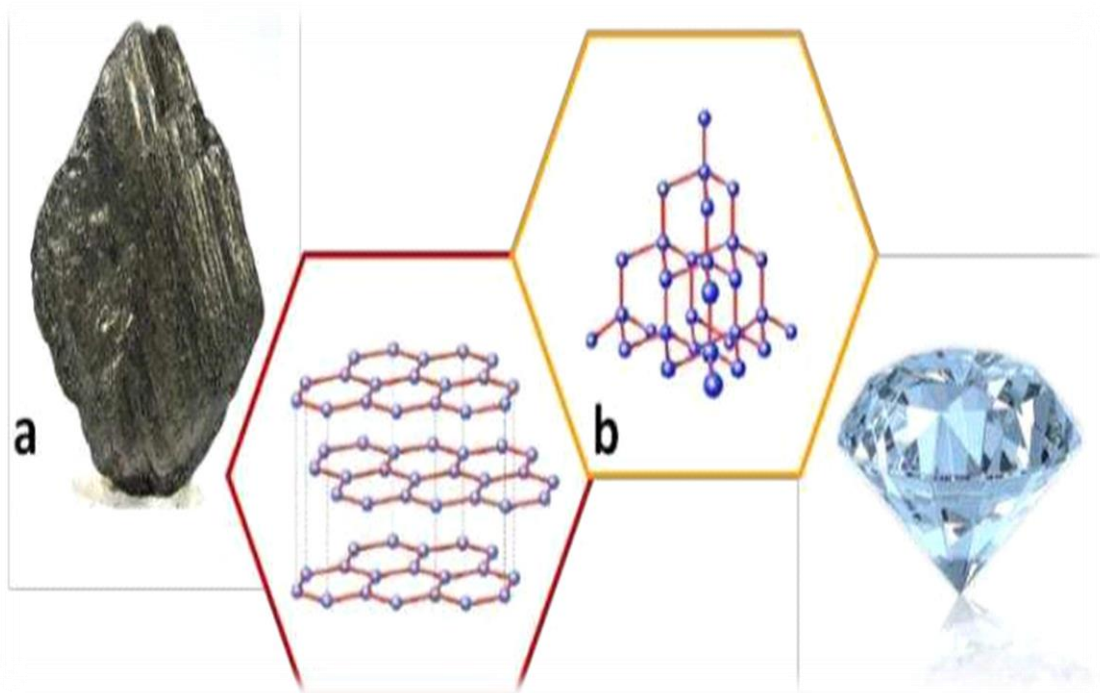
الخصائص الإلكترونية للجرافين

1- وصف أصناف متباينة من الكربون:

الكربون رمزه C والكتلة والرقم الذري 6 ، هو أول ذرة في العمود IV / A من الجدول الدوري للعناصر. هذه الذرات ، التي تم تشكيلها في قلب النجوم الأولى عن طريق التركيب النووي ، توجد الآن في أشكال مختلفة في مكونات الغلاف الجوي وقشرة الأرض. هذه الأنواع الكيميائية هي أيضًا أساس العديد من الجزيئات العضوية الضرورية لكيمياء الحياة. [18]

1-1-1 الكربون في حالته الطبيعية:

في حالتها الطبيعية، عندما لا تكون مرتبطة بعناصر كيميائية أخرى، يمكن تنظيم ذرات الكربون في عدة أشكال بلورية وعرض جوانب وخصائص متنوعة للغاية. الترتيبات الطبيعية ثلاثية الأبعاد تحدث بشكل أساسي في شكلين متآصلين: الجرافيت والماس. [18]



الشكل (1.2): التركيب البلوري للجرافيت (a) والماس (b). [18]

1-1-1 الجرافيت:

اكتشف الجرافيت فقط في القرن السادس عشر ، وكان يعتبر لفترة طويلة خامًا للرصاص وكان يُعرف بعد ذلك باسم بلومباغو. لقد ثبت فقط في نهاية القرن الثامن عشر أن هذه الصخور ذات اللون الرمادي الداكن والقابلة للتفتت كانت تتكون في ذلك الوقت من ذرات الكربون فقط.

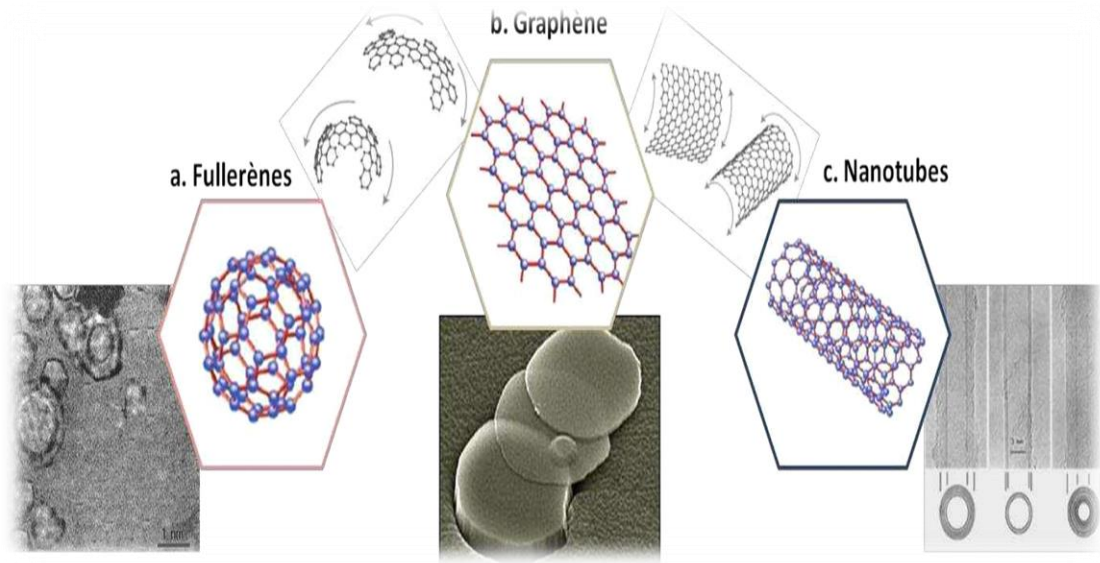
أصبح استخدام الجرافيت ككائن تتبع واسع الانتشار على الفور مع اختراع أقلام الرصاص وخصائصها المقاومة للحرارة، ثم جعلها مادة مثالية لتصميم قذائف المدفع. يتضح أن البنية البلورية للجرافيت عبارة عن كومة من الأسطح أحادية الذرة ذات البنية السداسية مفصولة بمسافة الطبقة البينية $c = 3.35\text{\AA}$ ومتصلة ببعضها البعض بواسطة روابط (Van Der Waals) (الشكل (a. 1.2)) [19]. هذه القوة الضعيفة من التفاعل هي التي تسمح للجرافيت بالتقشر أثناء الانزلاق على الورقة وترك أثر. [20]

2-1-1-1 الألماس:

يعد الماس عنصرًا مستخدمًا لآلاف السنين ويستخدم بشكل رئيسي في المجوهرات، ويتم الحصول عليه تحت ظروف ضغط ودرجة حرارة أعلى بكثير من الجرافيت ويستمر في حالة مستقرة في الظروف المحيطة. في كل ذرة كربون، يتم تخصيص كل من إلكترونات التكافؤ الأربعة إلى مدار هجين sp^3 موجه نحو رؤوس رباعي الوجوه (الشكل (b. 1.2)) ويخلق رابطة تساهمية قوية مع أقرب جار لها. يجعل هذا الهيكل البلوري هذا الحجر الشفاف أحد أصعب الصخور في قشرة الأرض.

2-1-1-2 عائلة الكربون الجديدة:

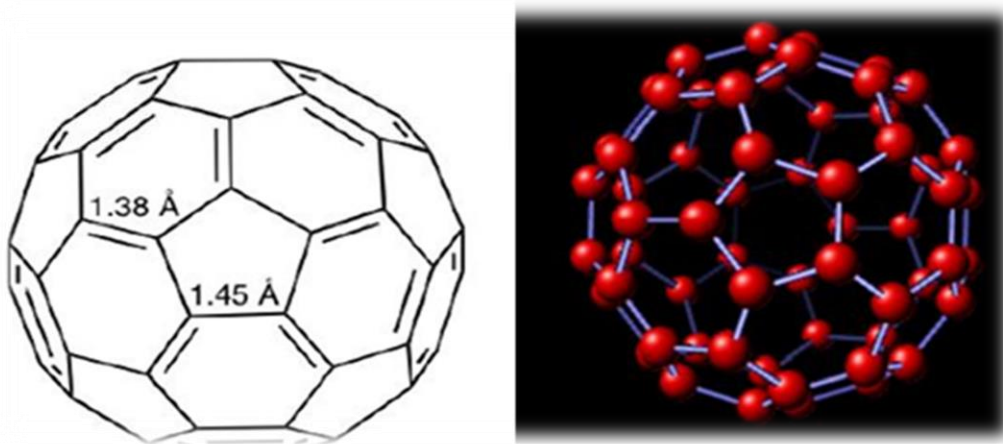
على مدار 25 عامًا الماضية، ظهرت متصلات الكربون الاصطناعية الجديدة بفضل ظهور أدوات الفحص المجهرية الجديدة مثل المجهر الإلكتروني الماسح (SEM) الذي تم إتقانه في الستينيات. يمكن تصنيف هذه الأنواع البلورية الجديدة التي تعتمد على الكربون وفقًا لأبعادها (0D) بالنسبة للفوليرينات، (1D) للأنابيب النانوية الكربونية و (2D) للجرافين [21].



الشكل (2. 2): الهياكل البلورية وصور SEM للفوليرين (a) والجرافين (b) والأنابيب النانوية الكربونية (c)[22].

1-2-1 الفوليرين:

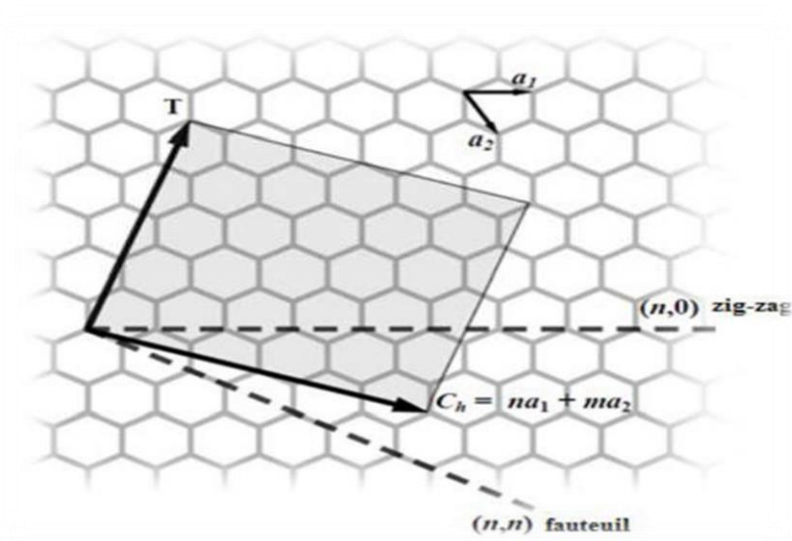
حصل اكتشاف أول فوليرين في عام 1985 على جائزة نوبل في الكيمياء Harold Kroto (جامعة Sussex) Robert Curl et Richard Smalley (جامعة Rice à Houston)[23]. تم الحصول عليها عن طريق تبخير قرص من الجرافيت عن طريق الاجتثاث بالليزر. هذه الأقفاس الكروية المجوفة مستقرة بشكل خاص. يتكون نوع الفوليرين من ذرات كربون موزعة في وحدات سداسية و 12 خماسياً (الشكل (a. 2.2)). إنها مرتبة مثل كرة القدم. أصغر جزيء يتوافق مع هذا التعريف هو الذي يبلغ قطره حوالي 7°A .



الشكل (3. 2): الفوليرين C₆₀ يتكون من 20 سداسي و 12 خماسي [24]

1-2-2 الأنابيب النانوية الكربونية:

صنع S. Iijima وفريقه في عام 1991 عبر قوس كهربائي بين قطبين من الجرافيت أول أنابيب نانوية كربونية متعددة الجدران (MWCNTs) - أنابيب نانوية من الكربون متعدد الجدران [22] حيث تتداخل الأنابيب داخل بعضها - ثم أول جدران أحادية الأنابيب النانوية الكربونية أحادية الجدار (SWCNTs) [26] في عام 1993. تسببت هذه الأنابيب المجوفة ، التي تشكلت عن طريق لف شبكة سداسية الشكل بسلك ذرة واحدة (الشكل (c. 2.2)) ، في حماس غير مسبوق في مجال الحالة الصلبة نظرًا لخصائصها الميكانيكية والإلكترونية الاستثنائية. الحجم أحادي البعد تقريبًا لهذه الأنابيب (من 1 نانومتر إلى بضعة عشرات النانومتر للقطر لأطوال يمكن أن تصل إلى عدة ميكرومتر) يميزها عن المواد الأخرى ولا يزال يجعلها مادة مفضلة لإنتاج الأجهزة النانوية.



الشكل (4. 2): تمثيل تخطيطي للنية البلورية للأنبوب النانوي الكربوني [26]

1-2-3 الجرافين:

على الرغم من وضع نظريات بي آر فالس في عام 1947 [27]، لم يكن لدى Andre Geim et Kyostya Novoselov حتى عام 2004 فكرة نقشير قطعة من الجرافيت النقي بشرط لاصق قبل نقلها إلى طبقة سليكونية مغطاة بـ SiO2 [28]. كشف الفحص البصري والمجهري لهذه الطبقة عن مستوى مستقر بسماكة ذرة كربون واحدة فقط [29].

منذ ذلك الحين، أظهرت دراسات أخرى أنه بالإضافة إلى قوتها المذهلة، الإلكترونات هناك أسرع من أي مادة أخرى معروفة حتى ذلك الحين وأنه من الممكن التحكم في التيار من خلال تأثير المجال [30]. ظهر الجرافين من الظل وحصل مكتشفه على جائزة نوبل في الفيزياء عام 2010 [31].

2- الخصائص الإلكترونية:

ذرة الكربون هي العنصر السادس في الجدول الدوري، عدد البروتونات التي تشكل نواة ذرة الكربون ذو الشحنة الموجبة هي 6 بروتونات، حول نواة توجد الإلكترونات ذات الشحنات السالبة بعدد متساوٍ من الشحنات الموجبة للبروتونات والتي تتوزع وفقاً للمدارات الإلكترونية. يلعب تكوين المدارات وإعادة تشكيلها في وجود عناصر أخرى دوراً رئيسياً في الخصائص الكيميائية والكهربائية للمواد. في هذا الجزء، سنشرح بالتفصيل البنية الداخلية للكربون وآليات إعادة تنظيم مداراته التي تكون في أصل بلورة المستوية للجرافين.

2-1- التوزيع الإلكتروني للكربون:

من المستحيل التحدث عن الإلكترون كجسم دقيق وقابل للتحديد، فيزياء الكم، التي فرضت نفسها في بداية القرن العشرين وتحكم ميكانيكا الجسيمات على هذا النطاق، تلزمنا بالتفكير في الجسيمات الأولية (مثل الإلكترون على أنها إظهار ازدواجية موجة-جسيم. تخضع حركاتها للمعادلة التفاضلية الخطية من الدرجة الثانية لشرودر نغر [32]. هذه المعادلة هي التي تجعل من الممكن تحديد وظيفة الموجة للإلكترون حول النواة:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi_{nlm}(\vec{r}, t)) = \overbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right]}^{\hat{H} \text{ hamiltonien}} \psi_{nlm}(\vec{r}, t) \quad (1.2)$$

حيث:

▪ $\psi_{nlm}(\vec{r}, t)$ هي دالة الموجة .

▪ m^* : هي الكتلة الفعالة التي تحل محل كتلة الإلكترون في البلورة والتي تعتمد على خصائص الشبكة.

▪ $V(\vec{r})$: هي الطاقة الكامنة .

• \hbar : هو ثابت بلانك $\hbar = h/2\pi$.

يتيح حل معادلة $|\psi_{nlm}(\vec{r}, t)|^2$ تحديد احتمال وجود إلكترون في منطقة محددة من الفضاء دالة الموجة حيث يكون احتمال العثور على الإلكترون أكبر من 95 %

ومع العلم ، إن مبدأ استبعاد باولي يمنع الإلكترونات من التوضع في نفس المستوى الطاقوي لنفس الحالة الكمونية [33]. يتم بعد ذلك تعريف هذه الحالة الكمونية من خلال إدخال أربعة أعداد كمية وهي: n, l, m, s

n : هو عدد الكم الأساسي الذي يحدد طبقة الإلكترون ومستوى طاقة الإلكترون حول النواة ، وهو عدد صحيح. $n \geq 1$

l : هو عدد الكم المداري $l = [0; n - 1]$







m : هو رقم الكم المغناطيسي الذي يصف الاتجاه المكاني لمدار ، وهي أعداد صحيحة بين

$$m = [-l; 0; +l]$$

s : هو السبين ، في حالة الإلكترون ، يمكن أن تأخذ قيمتين $\pm 1/2$

في الجدول التالي تمثيلات بيانية لمختلف المدارات الممكنة الجدول الشكل (1.2):

الشكل (1. 2): جدول المدارات الذرية (حلول معادلة شرودنجر) وفقاً لـ n (من 1 إلى 3) و l و m . يمكن لكل من هذه المدارات أن تستوعب إلكترونين من سبين s مختلف [34].

	$s^1 \text{ à } s^2$ ($l=0$)	$p^1 \text{ à } p^6$ ($l=1$)	$d^1 \text{ à } d^{10}$ ($l=2$)
$n=3$	 $m=0$	 $m=-1$ $m=0$ $m=1$	 $m=-2$ $m=-1$ $m=0$ $m=1$ $m=2$
$n=2$	 $m=0$	 $m=-1$ $m=0$ $m=1$	
$n=1$	 $m=0$		

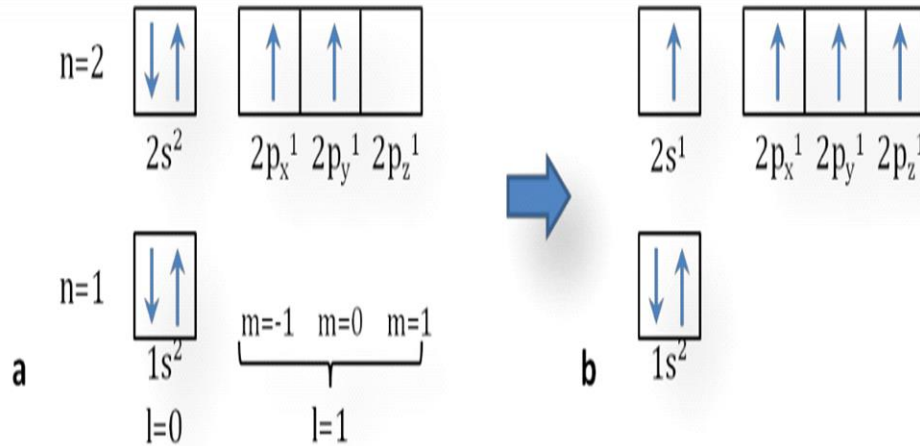
في حالة الكربون ، يشغل إلكترونان "أساسيان" (قريبين جدا من النواة) اللذي يشغل المدار $n = 1$ نضعه $1s$ ، وحيث يتم تمثيل السبينين بقيمة $\pm 1/2$ يتم تمثيلها بواسطة سهمين من اتجاهين متعاكسين

يتم توزيع الإلكترونات الأربعة الأخرى التي تسمى "التكافؤ" في طبقة $n=2$ مكونة من طبقتين فرعيتين

$$m = [p_x = -1; p_y = 0; p_z = +1]m$$

في الحالة الأساسية ، تملأ الإلكترونات أولاً حالات الطاقة المنخفضة مثل حالة $1s$ ثم $2s$ قبل تشبع حالات $2p$ الأكثر طاقة، هذا التوزيع يعطى بالشكل $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0$ الصورة (a.6.2). هذا التوزيع في الحالة الأساسية يعطي حل نتائج معادلة شرودينغر (المعادلة

(2.1)) لكن ذرة الكربون تفضل في الواقع اعتماد توزيع محرض، حيث يتم نقل أحد إلكترونات غلاف $2s$ إلى مدار $2p_z$ وكل إلكترونات $n = 2$ تعتمد نفس السبين (الصورة (b.5.2))



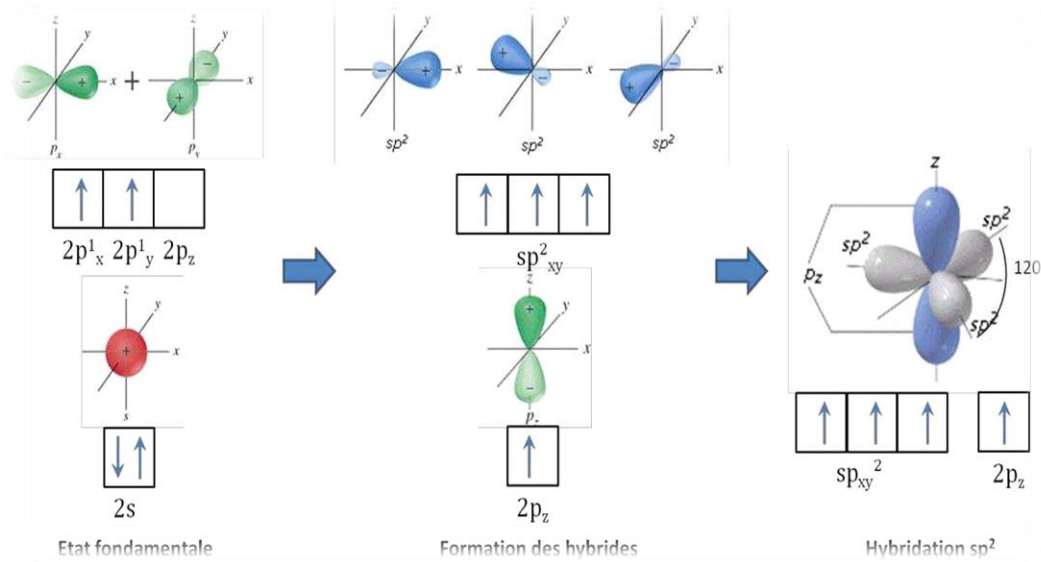
الشكل (5.2): التكوين الإلكتروني لذرة الكربون في حالتها الأساسية (a) وفي حالتها

المثارة (b) [34]

2-2- تهجين المدارات:

نظرًا لأن المدارات s و p المثارة ليست متكافئة من حيث الطاقة ، فإنها ستكون قادرة على إعادة الاتحاد لتشكيل مدارات مستقرة جديدة تسمى "الهجينة". تختلف آلية التهجين هذه وفقًا للأنواع الموجودة وظروف الضغط ودرجة الحرارة.

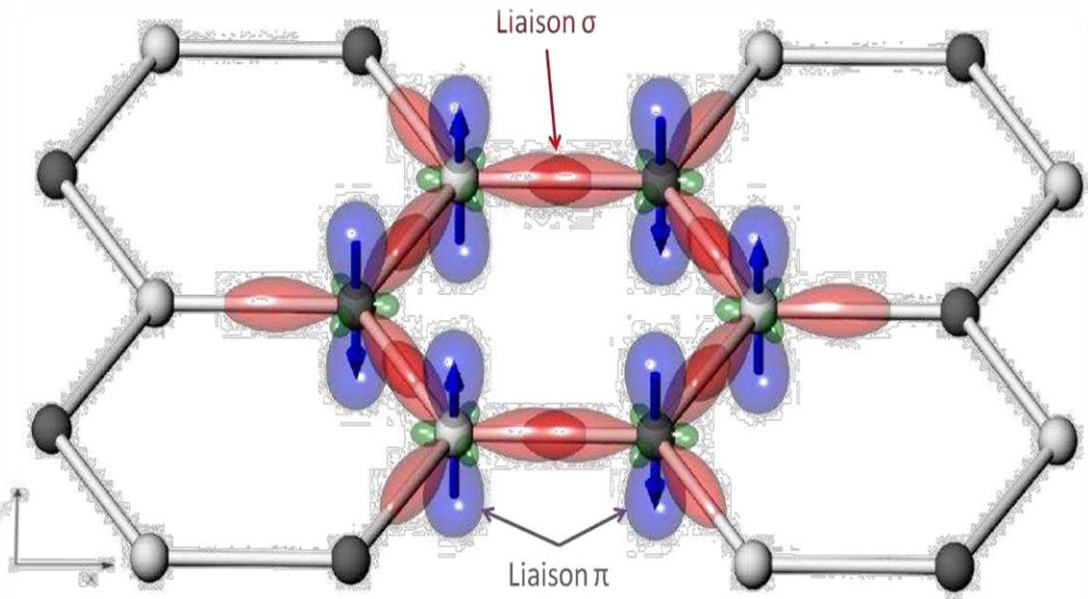
في الواقع ، يمكن أن يقترن المدار 2s لذرة الكربون المثارة بأحد المدارات 2p ويؤدي إلى التهجين sp. عندما يتم تهجين اثنين من المدارات 2p (p_x, p_y) و مع ترك المدار p_z غير مهجن ، ينتج عن هذا بنية مستوية مثلثية حيث تشكل الروابط الثلاثة sp^2 زوايا 120 درجة بينهما (الصورة (6.2)). وهذا التهجين هو الذي سيؤدي إلى بنية " خلية النحل " من الجرافين والذي سيتم دراسته لاحقًا. أخيرًا ، يمكن لجميع مدارات المستوى $n = 2$ التهجين sp^3 وتشكيل هيكل رباعي السطوح في أصل التركيب البلوري للماس.



الشكل (6. 2):آلية تهجين المدارات الذرية الكربونية sp^2 . [34]

يمكن للذرة المهجنة sp^2 أن تشكل ثلاث روابط كيميائية. يمكن أن تتداخل مدارتان هجينة sp^2 من ذرتين بشكل محوري لتشكيل رابطة تساهمية واحدة σ في المستوى XY (الصورة (7.2 a)) والمسافة 1.42\AA بعيدًا عن بعضها. تشكل الزوايا 120° بين كل من المدارات بشكل طبيعي في نهاية 6 ذرات متشابهة بنية سداسية منتظمة في أصل شبكة " خلية النحل " من الجرافين. هذه الروابط قوية ($\geq 348\text{kJ/mol}$) ويصعب فصلها ، وهذا هو السبب في أن الجرافين حامل كيميائيًا.

أما بالنسبة لمدارات p_z التي ظلت غير مهجنة ، فإنها ستؤدي إلى تداخل جانبي π ترابط و π^* مضاد للترابط مع أحد جيرانها الثلاثة (الصورة (2.7.c)). هذه الروابط المزدوجة π ، أضعف من الروابط التساهمية ($\approx 250\text{kJ/mol}$) ، تمنع أي دوران حول محور الرابطة σ . نتيجة لذلك ، يكون كل إلكترون $2p_z$ حرًا في الحركة ويتم تحديد موقعه على السطح بالكامل ، ويشكل y غازًا ثنائي الأبعاد $2D$ من الإلكترونات هناك والذي سيساهم في التوصيل الكهربائي الممتاز للجرافين [27].



الشكل (7.2): الرسم البياني المداري الجزيئي لرابطة sp^2 في الكربون (a). رسم توضيحي للرابطة σ (b) وتراكب الجانب (c) في بنية "خلية النحل" من الجرافين. يمثل السهم الموجود على p_z اتجاه دوران الإلكترون [35].

2-3-البنية البلورية:

2-3-1-الشبكة الحقيقية:

يمكننا فقط وصف بنية خلية النحل السداسية من الجرافين على أنها ترجمة لشبكة Bravais إذا بدأنا من ذرتين من الكربون. في حالة الجرافين ، فإن ذرتين متجاورتين A و B ليستا متكافئتين تمامًا. (الصورة (7.2)) واتجاه دوران السبينين متعاكسين [35،36]. للحصول على مثل هذه الشبكة في الجرافين، من الضروري تحديد شبكة الخلية هذه على أنها تتكون من شبكتين مثلثة

من Bravais تتمحور حول ذرتين مختلفتين A و B [28]. أشعة التحويل \vec{a}_1, \vec{a}_2 التي تربط ذرتي كربون متطابقتين A أو B الصورة (a.9.2) حيث [36]:

$$(2.2) \quad \vec{a}_1 = \frac{\delta}{2} \begin{pmatrix} 3 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \vec{a}_2 = \frac{\delta}{2} \begin{pmatrix} 3 \\ -\sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix}$$

المسافة بين ذرتي كربون متجاورتين $a = |\vec{a}_{1,2}| = \delta\sqrt{3} \approx 2.46 \text{ \AA}$ هو $\delta = 1.42 \text{ \AA}$,
المسافة بين ذرتين A متطابقتين أو ذرتين B متطابقتين.

2-3-2- الشبكة العكسية:

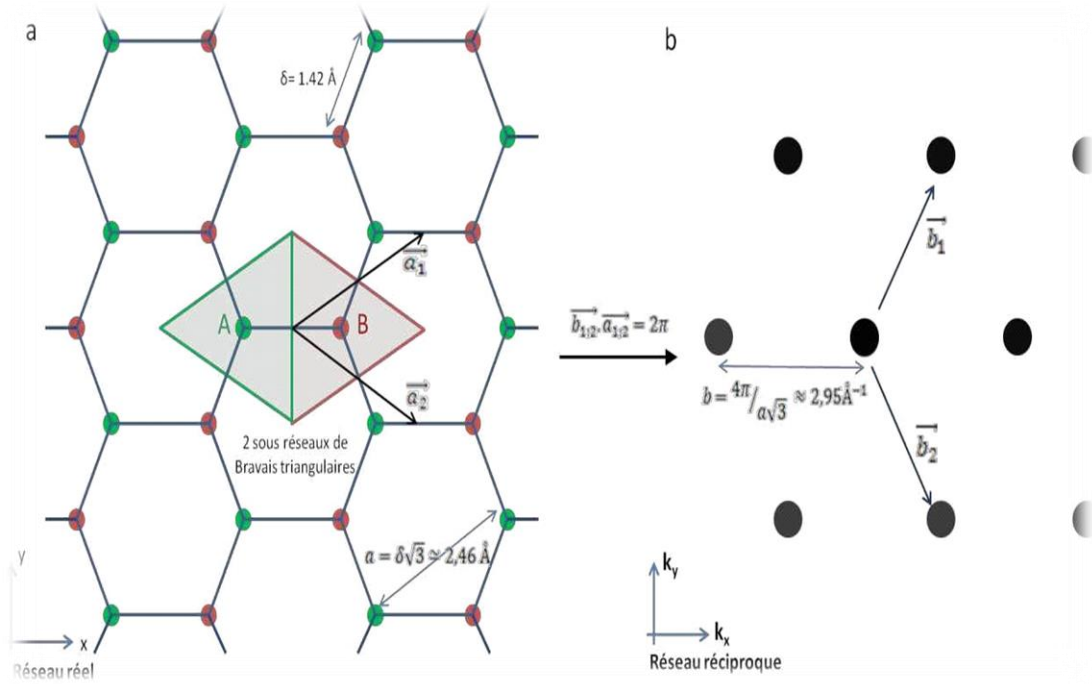
فضاء الأشعة الموجية \vec{K} معرف أيضا تحت اسم الشبكة العكسية الصورة (b.8.2) دورها $2\pi/a$ وأشعتها الأساسي \vec{b}_1, \vec{b}_2 المعادلة (3.2) يمكن حسابها من القيم البلورية للشبكة الحقيقية المعادلة (2.2) [37]:

$$(3.2) \quad \vec{b}_1 \cdot \vec{a}_1 = 2\pi \text{ و } \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_2 = 2\pi$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{c})}{V} = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi \cdot (\vec{c} \times \vec{a}_1)}{V} = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{c}) \quad ; \quad b = |b| = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \approx 2.95/A^\circ \text{ حيث}$$

و $c = 3.35 \text{ \AA}$ المسافة البينية.

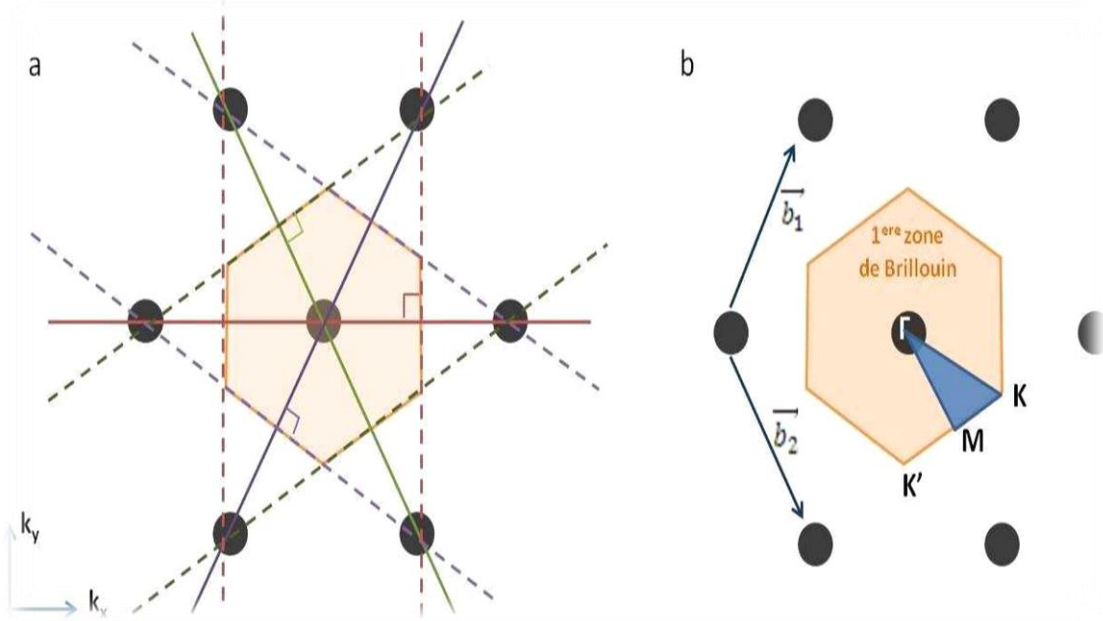


الشكل (8.2): رسم توضيحي لشبكتي Bravais ، خلية الوحدة في شبكة الجرافين الحقيقية
(a). شبكة عكسية من الجرافين تم إنشاؤها من بأشعة الاتجاه $(b) \vec{b}_1$ و \vec{b}_2 [38]

تسمى المنطقة الواقعة بين $-\pi/3a$ و $\pi/3a$ في الشبكة العكسية (الصورة 9.2 المنطقة البرتقالية) «منطقة Brillouin الأولى»، وهي الخلية البدائية لفضاء أشعة الموجة k ولها خصوصية القدرة على تمثيل الخصائص المحددة للشبكة الحقيقية [37،38]. شبكة الاتصال. توجد داخل نقاط منطقة Brillouin السداسية الأولى Γ أو M أو K (الصورة 10.2)، والتي يُقال إنها ذات تناظر عالٍ ومفيدة بشكل خاص لتوصيف الخصائص الإلكترونية لمادة صلبة. في حالة الجرافين ، يمكن تلخيص الدراسة على أنها معرفة ما يحدث بالقرب من النقطة K وإحداثياتها المتناظرة K' (Castro Neto, 2009):

$$K = \frac{2\pi}{3a}; \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}$$

$$\text{و } K' = \frac{2\pi}{3a}; -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}$$



الشكل (9.2): إعادة البناء الهندسي لمنطقة Brillouin الأولى (البرتقالية) في الفضاء المتبادل يتم تحديد هذه المنطقة من خلال المستويات المقسمة (في الخط المنقط) للخطوط المستقيمة التي تربط الأصل وأقرب نقاط الشبكة العكسية (في خط متصل) (a). تمثل النقاط Γ و M و K للتناظر العالي (b). [38]

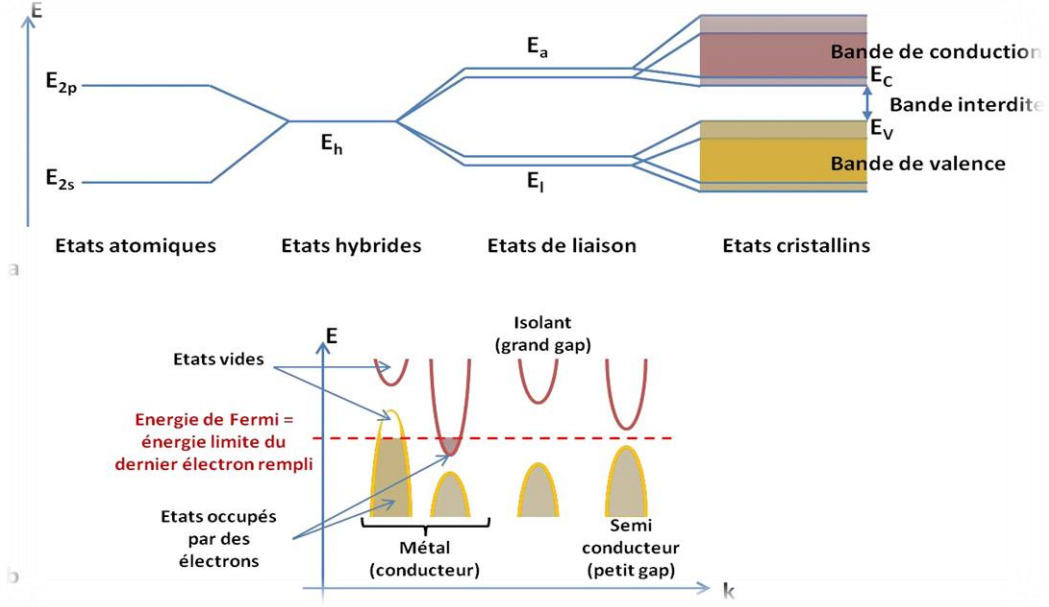
3-بنية العصابات والخصائص الكهربائية للجرافين:

لفهم خصائص النقل في الجرافين ، سيكون من الضروري فهم كيفية تفاعل غاز الإلكترون ثنائي الأبعاد 2D هذا مع بيئة بلورية تتكون من عدد لا نهائي من الذرات. في نظرية بلوخ ، من الممكن وصف الموجات الأساسية للإلكترون لوسط مستمر المعادلة (1.2)؛ في شكل موجات أخرى $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ في فضاء المتجهات \vec{k} المعادلة (5.2) هذه الموجات ، التي تسمى موجات بلوخ [37,38].

$$T_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \cdot u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (5.2)$$

3-1-تذكير على بيئة العصابات :

تمامًا كما في داخل الذرة ، لا يمكن أن تمتلك عدة إلكترونات نفس الطاقة ، في فيزياء الحالة الصلبة ، يمكن لإلكترونات البلورة بأكملها أن تأخذ قيمًا فقط ضمن مجالات طاقة دقيقة [38]. في الواقع ، مع زيادة الروابط بين الذرات ، يحدث رفع للانحلال المتتالي لحالات الرابطة التي تخلق عصابات طاقة وعصابات ممنوعة الصورة (a.10.2).



الشكل (10.2): مخطط الطاقة للحالات المختلفة لتكوين الرابطة الذرية وظهور عصابات الطاقة في بلورة (a). تمثيل تخطيطي لبنية الموجة وفقاً لمتجه الموجة لعدة أنواع من المواد ذات الطابع الموصل أو العازل أو شبه الموصل (b). [38]

من الممكن نمذجة بنية العصابات هذه عن طريق رسم مستويات الطاقة المحدودة التي تسمح بها المادة في الشبكة العكسية. لملأ هذه الإلكترونات في العصابات المختلفة للمادة نتبع توزيع فيرمي ديراك [38]. عند درجة حرارة $T=0K$.

طاقة فيرمي وتمثل الكمون الكيميائي لغاز الإلكترون. إن موقعه فيما يتعلق بمخطط العصابات هو الذي يشرح تنوع الخواص الكهربائية للمواد وموصليتها (E_F في نطاق مسموح به) ، أو عازلة أو شبه موصل (E_F في نطاق ممنوع) (الشكل 10.2.b). تتوافق كثافة الحالات الإلكترونية مع عدد الحالات الإلكترونية التي تمتلك طاقة معينة لشعاع الاتجاه k وبالتالي فإن سطح فرمي هو السطح المحدد بواسطة مجموعة الإلكترونات التي تمتلك طاقة E_F لشعاع الاتجاه $k \rightarrow$

3-2- علاقة التشنت وطريقة الربط القوية:

إن نظرية بلوخ تعطي حلاً غير متعلقة بالزمن $\psi \rightarrow (\vec{r}) = E(\vec{K})\psi \rightarrow (\vec{r})$ المعادلة (1.2) لشرودينغر ونعوض في العلاقة H الحركة $\vec{p}/\hbar = -i\vec{\nabla}$ للإلكترون تحت اسم حركة

جديد نرمل له بالشعاع \vec{k} . هذه العلاقة بين الطاقة E وشعاع الاتجاه \vec{k} ، التي تسمى التشتت ، هي بشكل عام تربيعية ، وهذا يعني أن $E \approx hk^2/2m^*$.

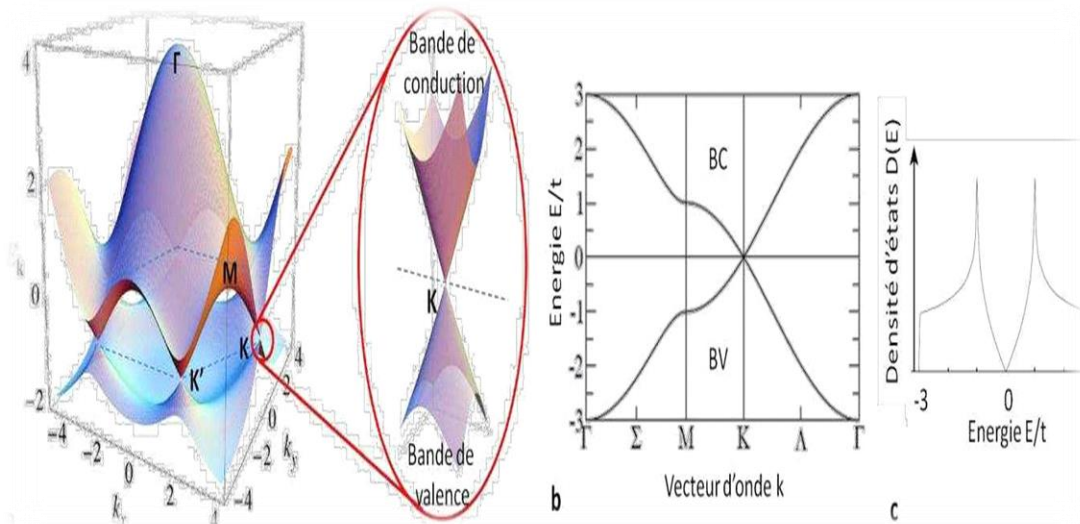
ما يسمى بطريقة "الربط القوي" يفترض أن الإلكترون الموجود في الرابطة π (من مدارين غير مهجنين $2p_z$ يمكن أن يقفز فقط إلى واحد من أقرب ثلاثة جيران قريبة له [36]. تم تطبيق هذه الطريقة لأول مرة في حالة الجرافين بواسطة P.R Wallace. في عام 1946 [39] قيمة ذاتية للهاميلتوني كدالة لشعاع الموجة \vec{k}

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm t\sqrt{3 + f(k)} - t'f(k) \quad (6.2)$$

و

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

المصطلح $t \approx 2.7eV$ يتوافق مع الطاقة المطلوبة للإلكترون π ليقفز إلى أقرب موقع مجاور [37] (من A إلى B أو من B إلى A) وغالبًا ما يتم إهماله ، طاقة القفز إلى جار قريب [40]. بالنسبة للمؤشر \pm ، فإنه يتوافق مع الحلين المحتملين اللذين يمثلان النطاقات الحدودية للتوصيل (+ ، النطاق π^* ، فارغة تمامًا من الإلكترونات) والتكافؤ (- ، النطاق π مليء بالإلكترونات) لبنية عصابة الجرافين الممثل حسب الشكل (11.2).



الشكل (11.2): علاقة تشتت الجرافين: تمثيل بياني لـ (المعادلة (6.2)) كدالة لأشعة الموجة

k_x و k_y وتوسيع هذه العلاقة بالقرب من النقطتين K و K' (a). تمثيل علاقة التشتت بدالة

نقاط التناظر العالية (b) والكثافة الإلكترونية للحالات (c) [36]

يسمح هذا الحل بستة قيم معينة في منطقة Brillouin حيث $E_- = E_+ = 0$ (الشكل 11.2. a) ونفرق بين سلسلتين من المسارات الإلكترونية تتمحور حول النقطتين K و K'. بالقرب من هذه النقاط، تشكل نطاقي التوصيل والتكافؤ مخروطين غير متكافئين يتلامسان في نفس اللحظة على مستوى فيرمي [17].

لذلك يمكن تشبيه الجرافين بأشباه الموصلات به فجوة عصابة ممنوعة صفرية (بدون فجوة) وسطح فيرمي يشبه النقطة، والكثافة الإلكترونية للحالة هي أيضاً معدومة (الشكل 11.2. c). [21] نتحدث بعد ذلك عن الجرافين كمادة شبه معدنية.

3-3- الإلكترونات "النسبية":

الشيء الأكثر إثارة للاهتمام حول علاقة تشتت الجرافين هو أنه بالقرب من K و K'، على مستوى فيرمي، لم يعد التشتت تربيعياً بل خطياً، وبالتالي يمكن التعبير عنه بحيث E يتناسب مع اللحظة $|p| = \hbar|k|$ في الواقع، يمكن تقريب معادلة التشتت على مستوى المخروط للناقلات القريبة جداً من K و K' ($|k| \ll \frac{2\pi}{a}$) بطريقة النشر من الدرجة الأولى بالشكل [39]:

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm \hbar v_F |k| \quad (7.2)$$

$$v_F = \frac{\sqrt{3}a}{2\hbar} t \approx 10^6 \text{ m. s}^{-1} \quad (8.2)$$

v_f سرعة فرمي.

مثل هذا الحل أقرب إلى معادلة ديراك النسبية للجسيمات عديمة الكتلة (مكافئ 9) منه إلى معادلة شرودنجر [42،43،44] (المعادلة 1.2):

$$E_{\pm} = \sqrt{p^2 c^2 + m^{*2} c^2} \quad (9.2)$$

بافتراض أن $m^*=0$ نجد $E_{\pm} = \pm pc^*$ حيث $C^* = \frac{\sqrt{3}a}{2\hbar} t$ هي السرعة الفعالة للضوء المماثلة لسرعة فيرمي v_f .

لذلك، هناك تشابه قوي جداً بين إلكترونات الجرافين والفرميونات عديمة الكتلة التي صاغتها معادلة ديراك ثنائية الأبعاد 2D النسبية، بحيث يمكن اعتبار حاملات شحنة الجرافين على أنها

جسيمات "نسبية شبيهة" (كونها جميعاً نفس 1/300 من سرعة الضوء في الفراغ لكنها تظل أعلى بعشر مرات من ناقلات أفضل أشباه الموصلات [45].

النقطتان K و K'، حيث تنبثق مستوى فيرمي (الشكل 2. 11)، تسمى بالتالي نقاط ديراك، ويطلق على مخروط علاقة التشتت اسم مخروط ديراك.

3-4- النقل والموصلية:

الموصلية الكهربائية σ معبراً عنها ($S.m^{-1}$) للمادة أو معكوس المقاومة ($\Omega.m$) (ρ). تتميز قدرتها على السماح بمرور تيار كهربائي. ينتج هذا التيار عن حركة الإلكترونات (الشحنات السالبة) والثقوب (الشحنات الموجبة) تحت تأثير مجال كهربائي بحيث [37]:

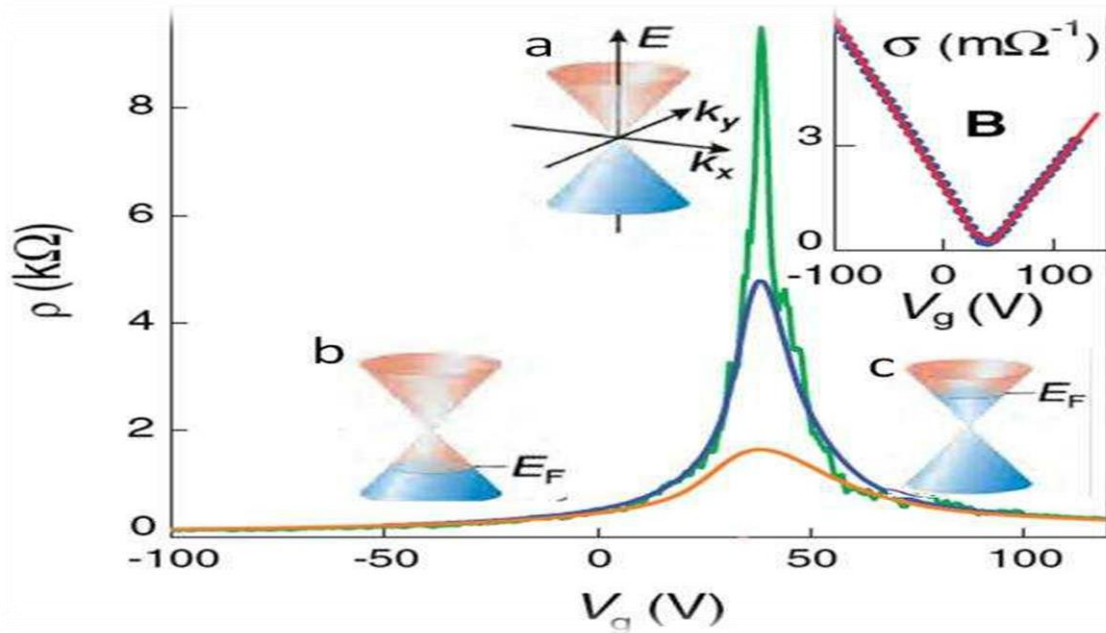
$$\sigma = ne\mu_n + pe\mu_p \quad (10.2)$$

حيث: n هي كثافة الشحنة السالبة و p كثافة الشحنة الموجبة (cm^{-2})

$$e = 1.602 \times 10^{-19} C \quad \text{هي الشحنة الأولية.}$$

$$\mu (cm^2.V^{-1}.S^{-1}) \quad \text{هي قابلية تنقل حاملات الشحنة المختلفة.}$$

من خلال تغيير موضع مستوى فيرمي على جانبي مخروط ديراك (من خلال تأثير المجال الكهربائي المطبق والتحكم فيه بواسطة فرق الجهد الملحوظ (V_g))، نحصل على نظام تيار إما تهيمن عليه الإلكترونات أو تهيمن عليه الثقوب (الشكل 2 . 12) [46]. هذا التأثير ثنائي القطب يجعل من الممكن زيادة توصيل الجرافين بسرعة عن طريق تعديل كثافة الناقل لوحد أو الآخر من شحناته.



الشكل (12.2): تأثير ثنائي القطب (المقاومة والتوصيل كدالة لجهد البوابة V_g) لطبقة أحادية من الجرافين حول نقطة ديراك عند 5 K (أخضر)، 70 K (أزرق)، 300 K (برتقالي). بالنسبة إلى $E_F = 0$ ، تكون كثافة الحاملات صفر (a). بالنسبة لـ $V_g > 0$ ، يكون الجرافين عبارة عن موصل نوع p من الثقوب (b) بالنسبة لـ $V_g < 0$ ، نقول أن الجرافين موصل نوع n الذي يهيمن عليه الإلكترون (c). هنا الحركة المقاسة $\mu = 5000\text{cm}^2 \cdot (\text{V} \cdot \text{s})^{-1}$ [46].

تتمثل إحدى خصائص الجرافين في أنه على الرغم من كثافة الحالة الصفرية عند $V_g = 0\text{V}$ حول مستوى Fermi، تظل الموصلية أكبر في جميع الأوقات من كمية الموصلية $\sigma_{min} \sim 2e^2/h$ [47]. الانتظام الممتاز للبنية البلورية للجرافين، بسبب الروابط التساهمية القوية بين المدارات sp^2 ، يسمح للإلكترونات بأن يكون لها متوسط مسار حر كبير جدًا، يقترب أحيانًا من ميكرومتر. بسبب هذا النقل شبه الباليستي في الجرافين، تم التعرف عن حركة عالية جدًا. وهكذا في عام 2008 تم الحصول على تنقل بترتيب $\mu = 200000\text{cm}^2 \cdot (\text{s})^{-1}$ من أجل كثافة $n = 2 \cdot 10^{11}\text{cm}^{-2}$ على ورقة معلقة من الجرافين المقشر [48]. تعد قابلية التنقل القياسي هذه أعلى بكثير من تلك الموجودة في InSb، ثم أشباه الموصلات المعروفة مع $\mu = 80000\text{cm}^2 \cdot (\text{V} \cdot \text{D})^{-1}$ أو غيرها من المواد المستخدمة تقليديًا في صناعة أشباه الموصلات (انظر الجدول (2.2)). من الناحية العملية، تختلف هذه النتائج اختلافًا كبيرًا اعتمادًا على تقنيات زيادة الجرافين وغالبًا ما تظهر قدرات تنقل أكثر تواضعًا.

الجدول (2.2): مقارنة بين الخصائص الإلكترونية المختلفة (عرض الفجوة وسرعة التشبع ومتوسط المسار الحر وتنقل الإلكترون) عند 300 k للعديد من أشباه الموصلات مع الجرافين لكثافة شحنة معينة تبلغ $n=10^{12} \text{ cm}^{-2}$ [49].

$n=10^{12} \text{ cm}^{-2}$	$E_g(\text{eV})$ 300K	$V_{\text{sat}}(10^7 \text{ cm/s})$	متوسط المسار الحر (nm)	$\mu_e (\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1})$ 300K
Si	1,12	1	28	600
GaAs	1,43	1,2	80	4600
In ₅₃ Ga ₄₇ As	0,72	0,8	106	7800
InAs	0,36	3,5	194	2.10^4
InSb	0,18	5	226	3.10^4
Graphène	0	8	400	$2,3.10^5$ (exfolié) 1600 (CVD) 4000 (épitaxié)

4-تغييرات في بنية العصابات للجرافين:

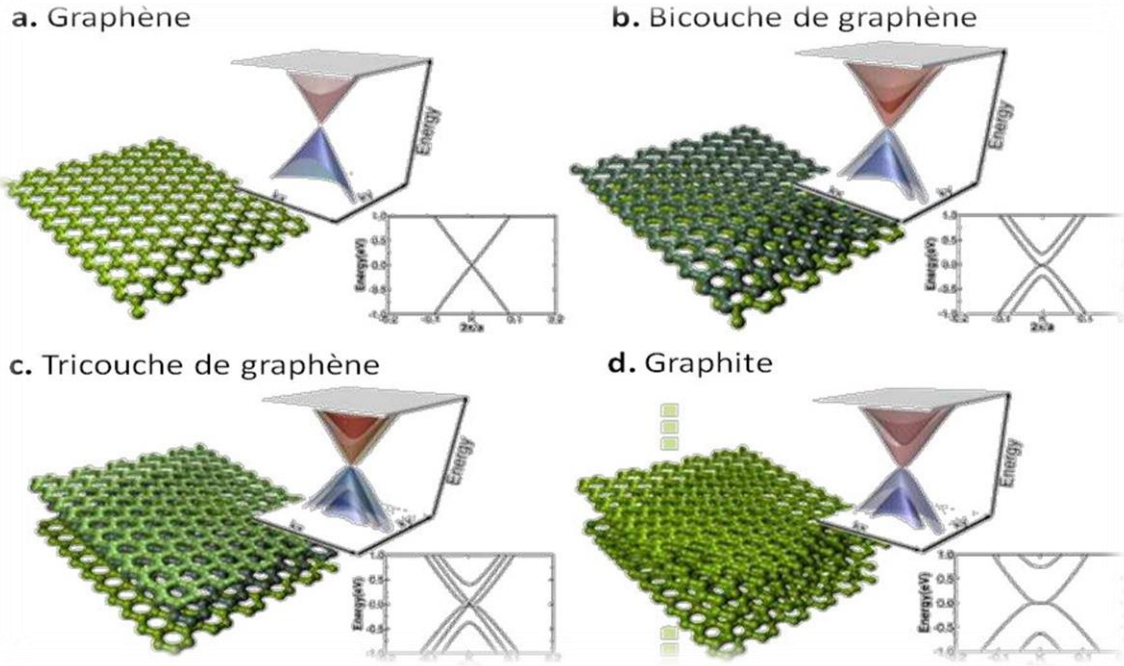
لقد أظهرنا للتو بنية العصابات لطبقة جرافين مثالية أحادية الطبقة. لقد رأينا أن بنية النطاق هذه تؤدي إلى تصور الإلكترونات على أنها جسيمات عديمة الكتلة ، شبه نسبية ، تنتشر في مستوى ثنائية الأبعاد والتي تأتي من خصائص النقل المذهلة. لكن الجرافين يتميز بخصوصية عدم وجود فجوة طاقة بين نطاق التكافؤ والتوصيل. سنرى هنا ما هي التقنيات لتعديل بنية النطاق إلى درجة صنع شبه موصل الجرافين.

4-1-طبقات الجرافين المتعددة:

للنجاح في فتح فجوة في الجرافين ، من الضروري كسر هذا الاعتماد الخطي لعلاقة التشتت بإعادة الإلكترونات إلى كتلة غير معدومة [50].

إحدى التقنيات الأولى لعلاقة التشتت بالقرب من نقاط ديراك لا يعتبر الجرافين مستويًا واحدًا من ذرات الكربون ولكن للعودة إلى كومة متعددة الصفائح تتكون من طبقتين فقط [36,51]. في الواقع ، فإن التفاعلات بين الإلكترونات من خلال الصفائح تعدل بنية العصابات. في حالة الطبقة الثنائية، تتغير علاقة التشتت إلى زوجين من العلاقات المكافئة متراكبة بشكل طفيف جدًا عند النقطتين K و K' (الشكل 2.13. b) [52,53]. من الممكن بعد ذلك فرض فرق جهد بين هاتين الطبقتين من خلال تطبيق مجال كهربائي ، مما يسمح بالتشابة الكهروستاتيكية وفتح فجوة طاقة.

يمكن أن تصل فجوة الطاقة هذه نظريًا إلى قيمة 250mev ولكن في الممارسة العملية ، تم نقل 130mev [54,55] فقط عن طريق التأثير الميداني في طبقة ثنائية من الجرافين [56].



الشكل (13.2) : تمثيل علاقات التشتت بالقرب من نقاط ديراك في حالة الجرافين (a) ، طبقة ثنائية (b) ، وثلاثي الطبقات (c) ، ومن الجرافيت (d)[57].

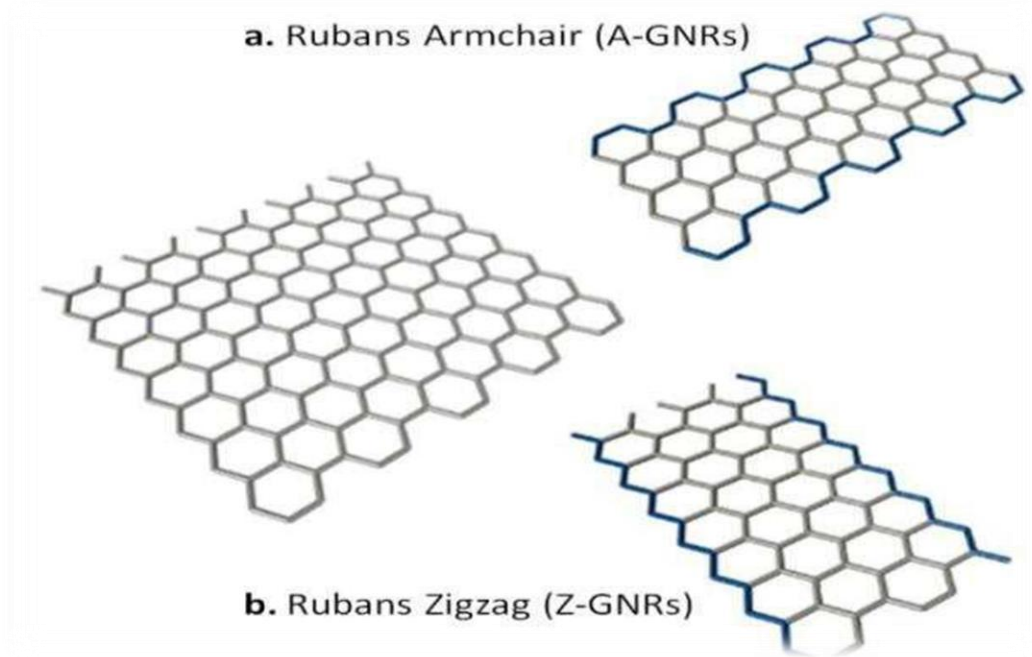
إن حالة بنية النطاق الإلكتروني لثلاثي الطبقات مثيرة للاهتمام أيضًا لأننا نجد هناك مخروطًا من إلكترونات عديمة الكتلة من الجرافين أحادي الطبقة مختلط هذه المرة مع منحنيين آخرين بالقرب من النقطتين K و K' (الشكل 13.2 .c) [57,58].

من خلال التكديس المتتالي ، سنتبنى بنية النطاق لطبقات الجرافين المتعددة شكلاً مشابهًا بشكل متزايد لشكل الجرافيت.

4-2- شرائط نانو الجرافين:

هناك طريقة أخرى محتملة تتمثل في فتح فجوة طاقة عبر حيز جانبي للإلكترونات ثنائية الأبعاد 2D في شرائط رفيعة جدًا من الجرافين ($< 100nm$) ، وهي أكثر شيوعًا تسمى شرائط النانو. في الواقع ، الجرافين بعيدًا عن كونه بلورة ثنائية الأبعاد لا متناهية له حواف حتمًا ، وبتقليل أبعاده في اتجاه واحد ، يمكننا تعديل بنية نطاق الجرافين [59].

نظرًا للهيكال البلوري السداسي للجرافين ، فإن حواف الجرافين لها تكوينان محددان لهما خصائص كهربائية مختلفة جدًا. ينتج هذان النوعان من الشرائط المسماة "كرسي بذراعين" (أو كرسى) و "متعرج" عن دوران بمقدار 30° درجة أو 90° درجة في محور القطع لمستوى الجرافين الشكل (14.2) [60] .



الشكل (14.2): التركيب البلوري لكرسى (a) و متعرج (b) .GNR [60]

تمت إضافة إلى هذين النوعين من الحواف عدد لا نهائى من أنماط متعرجة وكراسى ذات قوى مختلطة.

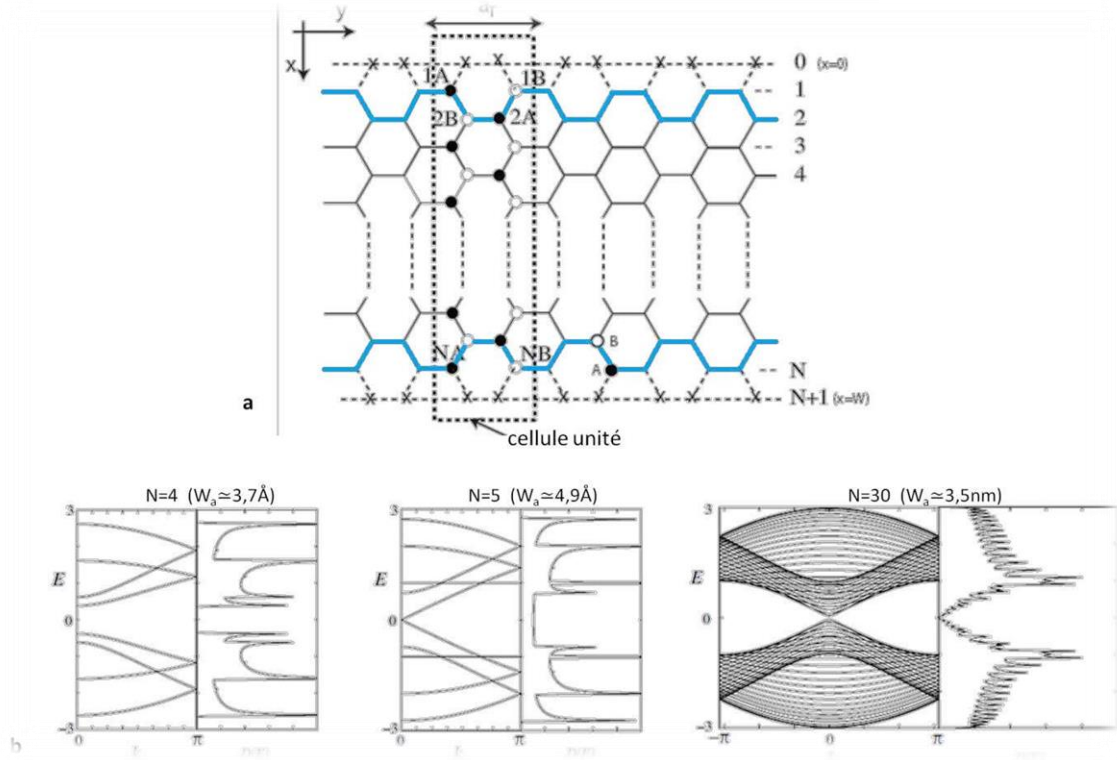
4-2-1- شرائط نانوية من نوع "كرسى":

يمكن وصف شريط الجرافين المحصور في اتجاه \vec{x} بأنه تكرر وفق \vec{y} لخلية وحدة. في حالة شريط "كرسى" ، عرض W_a لخلية الوحدة هذه من N ذرات كربون A و N ذرات كربون B (الشكل 15.2 a) وتساوي $\delta = \frac{\sqrt{3}}{2} (N - 1) W_A$ مع $W_A = 1.42 \text{ \AA}$ المسافة بين الذرات. من خلال فرض حيادية دالة الموجة على الحواف ، يمكن كتابة علاقة التشتت [61-63]:

$$E_{A,\pm}(k, p) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos(q_y) \cos\left(\frac{k}{2}\right) + (2 \cos(q_y))^2} \quad (11.2)$$

حيث يتم تحديد شعاع الموجة الكمية وفقاً لـ y ومعرف بـ $q_y = \frac{n\pi}{n+1}$ مع $n = 1.2.3... N$.

تم حساب أطيف الطاقة المختلفة بواسطة Wakabayashi [61][62] وفقاً لعدة قيم للعرض N وتم تمثيلها في الشكل (15.2 . b).



الشكل (15.2): هيكل شريط نانوي من الجرافين في تكوين حافة "الكرسي". العدد N للذرات يحدد عرض الشريط و x يرمز إلى الذرة المفقودة وبالتالي تحديد الحواف (a). طيف الطاقة وكثافة الحالات لمختلف عرض الشرائط $N = 4$ (فجوة كبيرة أشباه الموصلات)، $N = 5$ (معدني) و $N = 30$ (أشباه الموصلات ذات الفجوة المنخفضة) (b) [62].

نلاحظ أنه في معظم الحالات، تقدم بنية العصابة فجوة طاقة Δ تعتمد على العرض N للشريط [62-61]. في النهاية، يتناسب عرض العصابة الممنوعة عكسياً مع عرض W_a للشريط المحدد وفقاً لـ N و δ . يمكن تقريب فجوة الطاقة هذه عند $k = 0$ من خلال اعتبار $\frac{1}{W} \ll 1$ [62]:

$$\Delta_W(eV) \approx \begin{cases} \frac{\pi}{W + \frac{\sqrt{3}}{2}} & N = 3m \\ \frac{\pi}{W} & N = 3m + 1 \\ 0 & N = 3m - 1 \end{cases} \quad (12.2)$$

حيث m هو عدد صحيح

في الحالات الأولى حيث يتوافق عرض شريط "الكرسي" مع $N = 3m, 3m + 1$

كما هو موضح في الشكل (b.15.2)، يمكن أن تتراوح قيم فجوات الطاقة من بضعة eV لـ $N=4$ فقط قليل من meV للشرائط الأكبر كما في حالة $N = 30$ ، ولها خصائص جيدة في أشباه الموصلات.

ولكن في الحالة $N = 3m - 1$ التي تقبل فيها المعادلة (2-11) قيمة طاقة لـ $\pm 0E =$ لاجل $K=0$ ، والتي تتوافق مع سلوك معدني (الشكل 2. 15 . b حيث $N = 5$). لذلك فإن السلوك شبه الموصل أو المعدني لنوع "الكرسي" حساس جدًا لعرضه.

هذا النموذج المعتمد على طريقة الروابط الضيقة التي تقتصر على الذرات المجاورة الأولى هو بالطبع مجرد تقريب أولي ولا يأخذ في الاعتبار عددًا معينًا من التأثيرات مثل تشويه المسافات بين الذرات على الحواف. من خلال النظر في هذه التأثيرات، ينتهي بنا الأمر بإعادة كتابة فجوة الطاقة كدالة للعرض الأكثر اكتمالًا ولكن حتى في شرائط التكوين $N = 3m-1$ (التي كان يُفترض سابقًا أنها معدنية) بها فجوة صغيرة جدًا. لذلك يتضح أن أشرطة نوع "الكرسي" لها خصائص شبه موصلة.

4-2-2- شرائط نانوية من النوع "متعرج":

في حالة وجود شريط من النوع "متعرج" محصور هذه المرة على طول الاتجاه \bar{y} ، يتم تقسيم الذرات المرتبة على الحواف إلى مستويين فرعيين سفلي وعلوي، يتكون كل منهما من نفس الذرة A أو B. العرض W_Z يتم تحديده هذا الشريط من خلال $\delta - \frac{3}{2}N\delta = W_Z$. وبنفس الطريقة التي يتم بها حساب الشرائط "الكرسي"، يمكن حساب طيف الطاقة من [62-63]:

$$E_{z,\pm} = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2 \left(\frac{k}{2} \right) + 2 \cos \left(\frac{k}{2} \right) \cos(p)} \quad (13.2)$$

حيث :

$p = (k, N)$ وحلها

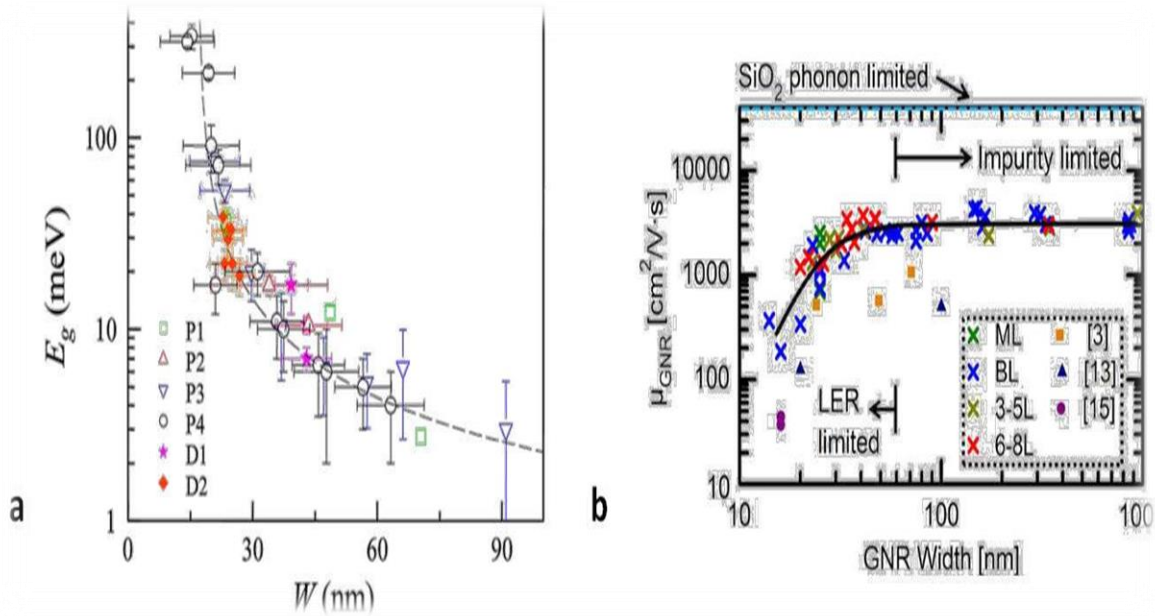
$$\sin[pN] + 2 \cos \left(\frac{k}{2} \right) \sin[p(N + 1)] = 0$$

تسمح هذه العلاقة بإضافة تمثيل رسومي لعلاقة التشتت وكثافة الحالات لقيم مختلفة لـ N والتي ترد في الشكل (2 . 16 . b) .

4-2-3- الفتح التجريبي لفجوة الطاقة:

كما رأينا ، فإن إمكانية فتح فجوة عن طريق حصر الإلكترونات في شرائط رقيقة جدًا لا يمكن أن تتم إلا في حالة حواف نوع "الكرسي". يعتمد عرض النطاق المحظور هذا على معكوس عرض الشريط. في الواقع ، من الصعب جدًا الحصول على مثل هذه الدقة من الناحية التجريبية والعديد على الحواف. تنتج معظم تقنيات صناعة شرائط النانو بالفعل العديد من العيوب على الحواف ومن الواقعي اعتبار هذه الحواف ذات تكوينات عشوائية أو مختلطة [64].

أثبتت دراسة تجريبية فتح فجوة في الطاقة يمكن أن تصل إلى بضع مئات من الملي فولت في شرائط أقل من عشرين نانومترًا [59] والتي لم يتم إتقانها. (الشكل 2 . 16 . a) .



الشكل (16.2): تطور فتح شريط محظور (E_g) وفقاً لعروض شرائط الجرافين المختلفة [59] (a). انخفاض تنقل الإلكترون لشرائط النانو (μ_{GNR}) كدالة لعرضها (b) [50].

النتيجة غير المهمة لتعديل بنية نطاق الجرافين لفتح فجوة طاقة هي أن هذا سيتم على حساب تنقل الإلكترون. يُظهر التحقق التجريبي المقدم في [50] هذا الانخفاض في التنقل كدالة لعرض GNRs الشكل (2 . 16 . b) .

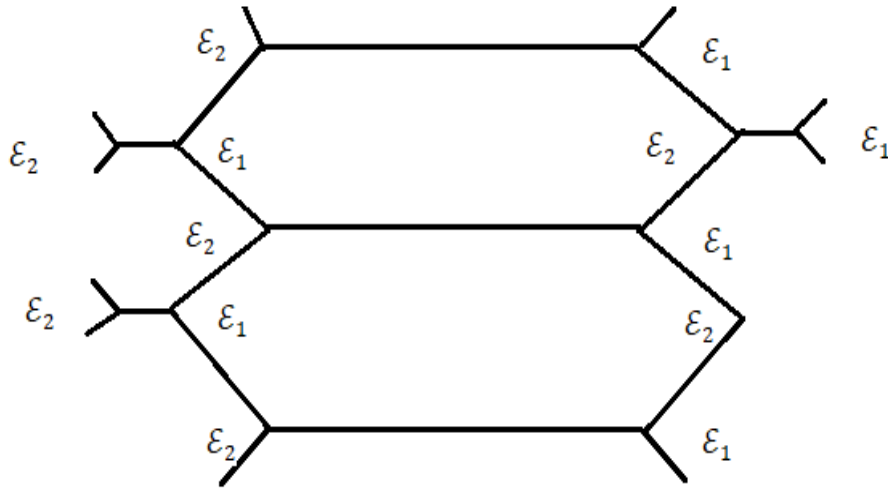
الفصل الثالث :
دراسة إمكانية تكون
أنماط ثنائيات الشوائب
على سطح الغرافين

مقدمة:

سوف نستخدم في هذا الفصل دوال Green من أجل محاكاة احتمالية تكون ثنائية الشوائب على سطح الغرافن, حيث يمكننا استخدام عملية نشر الاضطراب المنظم.

1-3 - حساب دالة Green :

من خلال الشكل (1.3) الذي يعبر عن إمكانية تشكل ثنائيات الشوائب على سطح الغرافن . والذي سوف يؤدي إلى فرق في الطاقة بين ذرات الكربون المتجاورة مثلا $\epsilon_1 > \epsilon_2$.



الشكل (1.3) : يعبر عن إمكانية تشكل ثنائيات الشوائب على سطح الغرافن .

عند إعتبارنا للجوار الأقرب فقط فإن هاملتون نموذج الارتباط الشديد $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$

سوف يتكون من الجزئين التاليين :

$$\mathcal{H}_0 = \sum_l |l\rangle \epsilon_l |l\rangle \quad (1.3)$$

$$(2.3)$$

$$\mathcal{H}_1 = V \sum_{\langle lm \rangle} |l\rangle \langle m|$$

حيث نقصد بالرمز $\langle lm \rangle$ الجمع على الجوار الأقرب فقط فإذا إعتبرنا:

\mathcal{H}_0 هو الهاملتوني الغير مضطرب .

\mathcal{H}_1 هو اضطراب .

عندها يمكننا تطبيق خواص دالة Green الموجودة في الملحقين (A) و (B) ،

حيث :

$$G(z) = (Z - \mathcal{H})^{-1} = G_0 + G_0 \mathcal{H}_1 G_0 + G_0 \mathcal{H}_1 G_0 \mathcal{H}_1 G_0 + \dots \dots \dots \quad (3.3)$$

نقوم بحصر العلاقة (3.3) بين $|l\rangle$ و $|m\rangle$ وباستعمال علاقة الإنغلاق :

$$\sum |n\rangle \langle n| = I \quad (4.3)$$

نجد أن $G(z)$ يمكن كتابتها بالشكل المفصل :

$$G(l, m) = G_0(l, m) + \sum_{n_1 n_2} G_0(l, n_1) \langle n_1 | \mathcal{H}_1 | n_2 \rangle G_0(n_2, m) + \dots \dots \dots \quad (5.3)$$

$$\sum_{n_1 \dots n_4} G_0(l, n_1) \langle n_1 | \mathcal{H}_1 | n_2 \rangle G_0(n_2, n_3) \langle n_3 | \mathcal{H}_1 | n_4 \rangle G_0(n_4, m) + \dots \dots$$

من الواضح أن :

$$G_0(n_1, n_2) = \langle n_1 | (Z - \mathcal{H})^{-1} | n_2 \rangle = G_0(n_1) \delta_{n_1 n_2}$$

حيث $G_0(n)$ عبارة عن :

$$G_0(n) = \frac{1}{Z - \varepsilon_n} \quad (6.3)$$

وعندما إستخدامنا للجوار الأقرب الأول فقط فإن :

$$\langle n_1 | \mathcal{H} | n_2 \rangle = \varepsilon_{n_1} \delta_{n_1 n_2} \quad (7.3)$$

تختلف عن الصفر فقط عندما $|n_2 - n_1| = 1$ وبالتالي يمكننا تبسيط العلاقة (3.5) كما يلي :

$$G(l, m) = \delta_{l, m} G_0(l) + G_0(l) V G_0(m) \delta_{l, m+1} + \sum_{n_1} G_0(l) V G_0(n_1) V G_0(m) + \dots \quad (8.3)$$

إن العبارة (8.3) المعقدة يمكن أن يتم تبسيطها باستخدام قواعد المخططات إنطلاقا من الموقع " l " وانتهاءا بالموقع " m " مع وجود خطوات تربط الموقع المدروس مع مواقع الجوار الاقرب [65] .

يمكن حساب كل حد من حدود العلاقة (8.3) إنطلاقا من قواعد بسيطة جدا:

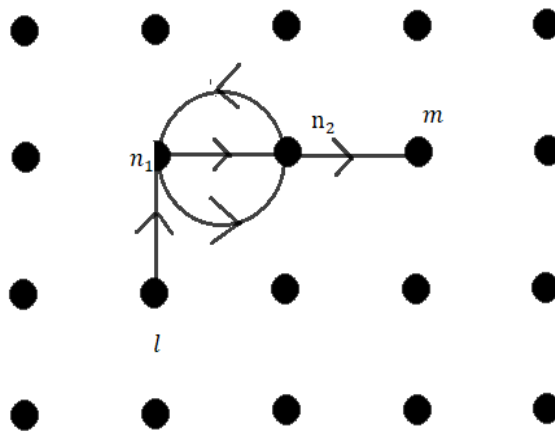
القاعدة 1:

ندخل المعامل $G_0(m)$ من أجل أي موقع "m" ثم زيارته بالمسار (او الطريق) ، بما في ذلك نقطة الانطلاق l ونقطة الوصول m .

القاعدة 2:

من أجل كل خطوة بين موقعين متجاورين نقوم بإدخال المعامل V ، فمثلا من أجل الشكل (2.3)

التالي :



الشكل (2.3) : يمثل حالة خمسة خطوات إنطلاقا من الموقع l وإنتهاءا بالموقع m .

تكون المساهمة في عبارة الدالة $G(l, m)$ هي :

$$G_0(l)V G_0(n_1)V G_0(n_2)V G_0(n_1)V G_0(n_2)V G_0(m) \quad (9.3)$$

تساهم المسارات المغلقة التي تنطلق من موقع وتعود لنفس الموقع مثلا كما في الشكل

$n_1 \rightarrow n_2 \rightarrow n_1$ عند الموقع n_1 يساهم بالقيمة $G(n_1)V G(n_2)$ عند اعتبار جميع المسارات المغلقة التي تبدأ وتنتهي عند الموقع "l" نجد :

$$V G_0(n_1) \dots \dots \dots V G_0(n) \sum_l \quad (10.3)$$

حيث \sum_l هو مجموع على كل المسارات التي نقطة بدايتها ونقطة انتهائها هي "l" والذي يساوي دالة غرين $G(l, l)$ ، وبالتالي يمكننا إخراج جميع المسارات للموقع "l" مع إستبدال $G_0(l)$ ب $G(l, l)$.

والشيء نفسه يكون صحيح من أجل الموقع التالي n_1 ولكن مع إختلاف واحد : وهو أنه يجب إزالة المسارات التي زارت الموقع l يجب إزاحتها [66], لأن هذه المسارات تم أخذها في الإعتبار عن حساب المسارات الخاصة بالموقع l .

المسارات عند الموقع n_1 يمكن إزاحتها إذا قمنا بإستبدال $G_0(n_1)$ بالعبارة $G(n_1, n_1[l])$

حيث نقصد بالرمز $[l]$ بأنه عند حساب قيمة $G(n_1, n_1[l])$ ينبغي التخلي عن المسارات التي زارت الموقع l .

أي يجب إقصاءها هذا الشرط يمكن أن يتحقق تلقائيا عند إعتبارنا $\mathcal{E}_\ell = \infty$ لأن $G_0(\ell) = 0$ في هذه الحالة).

وبالتالي $G(n_1, n_1[l])$ هي العناصر المصفوفية ل \mathcal{H} بين n_1 و n_1 مع أخذ $\mathcal{E}_\ell = \infty$.

وبطريقة مماثلة يمكن إقصاء جميع المواقع n_2 إذا قمنا في نفس الوقت بإستبدال $G_0(n_2)$ بواسطة

$$G(n_2, n_2[l, n_1])$$

حيث نقصد بالرمز $[l, n_1]$ أن كل من $\mathcal{E}_\ell, \mathcal{E}_{n_1} = \infty$

وهذه هي الطريقة من أجل تفادي حساب المسارات التي تصل n_2 مرتين , لأن هذه المسارات قد تم حسابها بالنسبة للموقعين l أو n_1 .

وبالإعتماد على الرموز السابقة فإن المجموع الجزئي في حالة $G(l, m)$ يمكن كتابته كما يلي :

$$G(l, m) = \sum G(l, l) V G(n_1, n_1[l]) V G(n_2, n_2[l, n_1]) V \dots G(m, m[l, n_1, n_2]) \quad (11.3)$$

حيث يتم الجمع على جميع المسارات المستثناة ذاتيا والتي تبدأ من الموقع " l " وتنتهي في الموقع " m "

$$l \rightarrow n_1 \rightarrow n_2 \rightarrow \dots \rightarrow m \quad (12.3)$$

فمثلا : في حالة العناصر القطرية $G(l, l)$ نجد :

$$G(l, l) = G_0(1) + \sum G(l, l) V G(n_1, n_1[l]) V G_0(l) \quad (13.3)$$

حيث يتم الجمع على جميع المسارات المغلقة والمستثناة والتي تبدأ من النقطة l وتنتهي إليها .

الكتابة $G_0(1)$ بهذه الطريقة لأن جميع المسارات للموقع النهائي l قد تم إحتسابها في الموقع الأصلي " l " والمعادلة (13.3) يمكن كتابتها بالشكل التالي :

$$G(l, l) = G_0(1) + G(l, l) \Delta(l) G_0(1) \quad (14.3)$$

حيث يسمى $\Delta(l)$ بالطاقة الذاتية والذي يأخذ الشكل :

$$\Delta(l) = \sum V G(n_1, n_1[l]) V \dots \dots \dots V \quad (15.3)$$

يمكن حل المعادلة (3.15) بسهولة لنجد :

$$G(l, l, z) = \frac{G_0(l)}{1 - G_0(l)\Delta(l, z)} = \frac{1}{z - \varepsilon - \Delta(l, z)} \quad (16.3)$$

إن مقارنة العلاقة (16.3) مع العلاقة (6.3) يفسر لنا سبب تسمية $\Delta(l)$ بالطاقة الذاتية .

إن عمليا النشر في المعادلة (11.3) إلى غاية المعادلة (15.3) تسمى عملية إعادة تنظيم نشر الإضطراب .

سوف نستعمل عملية إعادة التنظيم من أجل حساب دوال Green في حالة ثنائيات الشوائب على سطح الغرافن , حيث تصبح الشبكة ثنائية الدورية سوف يكون لدينا :

$$\Delta(l) = (n + 1)V^2 G(l + 1, l + 1 [l]) \quad (17.3)$$

لأن هناك فقط $(n + 1)$ مسار يتم تجنبها ذاتيا من الموقع l وإلى الموقع " l ". (أي كل مساريזור الجوار الأقرب فقط) , حيث تتم كتابة الكمية $G(l + 1, l + 1 [l])$ كما يلي :

$$G(l + 1, l + 1 [l]) = \frac{1}{Z - \varepsilon_{l+1} - \Delta(l + 1 [l])} \quad (18.3)$$

باستخدام إعادة التنظيم نجد أن الطاقة الذاتية يمكن أن تكتب كما يلي :

$$\Delta(l + 1 [l]) = K V^2 G(l + 2, l + 2[l + 1]) \quad (19.3)$$

حيث استخدمنا k بدلا من $(n + 1)$ لأن المسار الذاتي l مستثنى .

بترتيب المعادلات (18.3) و (19.3) نجد :

$$G(l + 1, l + 1 [l]) = \frac{1}{Z - \varepsilon_{l+1} - K V^2 G(l + 2, l + 2[l + 1])} \quad (20.3)$$

وبطريقة مماثلة :

$$G(l + 2, l + 2 [l + 1]) = \frac{1}{Z - \varepsilon_{l+2} - K V^2 G(l + 3, l + 3[l + 2])} \quad (21.3)$$

وبسبب دورية الشبكة في الشكل نجد :

$$G(l+3, l+3[l+2]) = G(l+1, l+1[l])$$

$$G(l+2, l+2[l+1]) = G(l, l[l+1])$$

بحل الجملة السابقة نجد :

$$G(l+1, l+1[l]) = \frac{(z-\varepsilon_1)(z-\varepsilon_2) - \sqrt{(z-\varepsilon_1)(z-\varepsilon_2)(z-\varepsilon_1)(z-\varepsilon_2) - 4KV^2}}{2K(z-\varepsilon_{1+1})V^2} \quad (22.3)$$

$$G(l, l[l+1]) = \frac{(z-\varepsilon_1)(z-\varepsilon_2) - \sqrt{(z-\varepsilon_1)(z-\varepsilon_2)(z-\varepsilon_1)(z-\varepsilon_2) - 4KV^2}}{2K(z-\varepsilon_1)V^2} \quad (23.3)$$

3-2- حساب عبارة كثافة الحالات:

بناء على طريقة الحساب الموجودة في الملحقين وكذلك على العنصر السابق الذي يحوي التفاصيل النظرية للحساب [67] نجد أنه في حالة تشكل ثنائيات الشوائب وليكن $\varepsilon_2, \varepsilon_1$ حيث $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$ في هذه الحالة الجوار الاقرب $Z = 3$ وبالتالي العدد $k = 2$

التقريب من الدرجة الاولى:

بما أن دالة Green تكتب في نموذج الالكترون شديد الارتباط بالعبارة كما في الملحق :

$$G(z) = \sum_k \frac{|k\rangle\langle k|}{z - E(k)} \quad (24.3)$$

فالعناصر المصفوفية لدالة Green تكتب :

$$\langle l|G(z)|m\rangle = G(l, m; z) = \sum_k \frac{\langle l|k\rangle\langle k|m\rangle}{z - E(k)} = \frac{\Omega}{N(2\pi)^d} \int_{1BZ} dk \frac{e^{ik(l-m)}}{z - E(n)} \quad (25.3)$$

حيث نقصد ب $1BZ$ بمنطقة بريلوان الاولى ، وعند حساب العناصر القطرية نجدها جميعا متساوية :

$$G(l, l; z) = \frac{\Omega}{N(2\pi)^d} \int_{1BZ} \frac{dk}{z - E(n)} \quad (26.3)$$

حسب نظرية (التركيب الخطي للمدارات الذرية) يمكننا وضع الطاقة $E(k)$ في التقريب الاول كما يلي :

$$E(k) \cong \varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 \cos \varnothing \quad (27.3)$$

وبالتالي (25.3) يمكن أن نعيد كتابتها بالشكل :

$$G(l, m; z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\varnothing \frac{e^{i\varnothing(l-m)}}{z - \varepsilon_1 - 2\varepsilon_2 \cos \varnothing} \quad (28.3)$$

نلاحظ أن هذا التكامل يتعلق بشكل أساسي بالقيمة $(l-m)$ ، حيث يمكن تحويله إلى تكامل للأعداد المركبة باستبدال المتغير $\eta = e^{i\varnothing}$

$$G(l, m; z) = \frac{1}{2\pi i |\varepsilon_2|} \oint d\eta \frac{\eta^{|l-m|}}{\eta^2 + 2y\eta + 1} \quad (29.3)$$

حيث سوف نضع $b = 2|\varepsilon_2|$ وكذلك $y = \frac{z - \varepsilon_1}{B}$

وبالتالي فكثافة الحالة بالنسبة لموقع تعطى بالقانون :

$$\rho(E) = \mp \frac{1}{\pi} I_m \{G^\pm(l, l; E)\} \quad (30.3)$$

التقريب من الدرجة الثانية :

بنفس الطريقة يمكننا استخدام نظرية التركيب الخطي للمدارات وذلك في التقريب من الدرجة الثانية حيث:

$$E = \varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 [\cos \phi_1 + \cos \phi_2] \quad (31.3)$$

حيث يصبح لدينا :

$$k(l - m) = (l_1 - m_1)\phi_1 + (l_2 - m_2)\phi_2 \quad (32.3)$$

التكامل في هذه الحالة هو :

$$G(l, m; z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\phi_2 \frac{e^{i\phi_1(l_1 - m_1) + i\phi_2(l_2 - m_2)}}{z - \varepsilon_1 - 2\varepsilon_2(\cos \phi_1 + \cos \phi_2)}$$

أي أن :

$$\rho(E) = \mp \frac{1}{\pi} I_m \{G^\pm(l, l; E)\}$$

التقريب من الدرجة الثالثة :

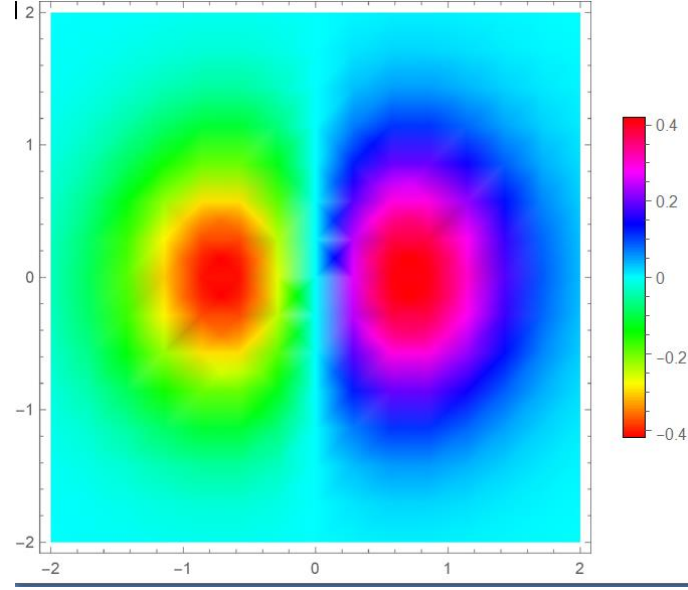
في حالة التقريب من الدرجة الثالثة نلاحظ أن نفس الحسابات يمكن الوصول إليها كما في التقريب من الدرجة الأولى مع دخول وسائط جديدة حيث تكتب دالة *Green* في هذه الحالة:

$$G(l, m; z) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\phi_2 \int_{-\pi}^{\pi} d\phi_3 \frac{\cos[(l_1 - m_1)\phi_1 + (l_2 - m_2)\phi_2 + (l_3 - m_3)\phi_3]}{z - \varepsilon_1 - 2\varepsilon_2(\cos \phi_1 + \cos \phi_2 + \cos \phi_3)}$$

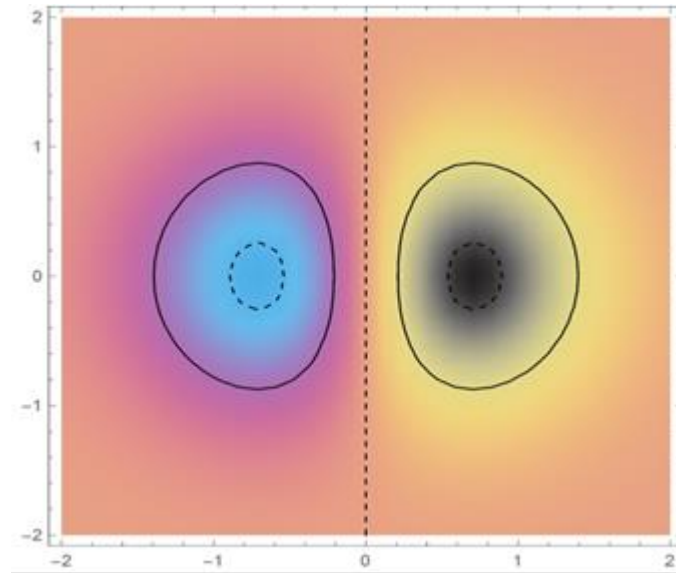
النتائج والمناقشة:

لقد إقتصر عملنا على إجراء عملية محاكاة لإمكانية تشكل ثنائيات الشوائب مستخدمين النتائج النظرية الموجودة في مختلف المراجع [68]. حيث استخدمنا التقريب من الدرجة الأولى والثانية من أجل حساب توزيع الكثافة الإلكترونية $\rho(E)$ من أجل قيم مختلفة للأعداد m_i, l_i وذلك من أجل قيم عشوائية ل \mathcal{E}_1 و \mathcal{E}_2 وفق صيغة random حيث استخدمنا برنامج Mathematica من أجل ذلك والأشكال التالية توضح ذلك:

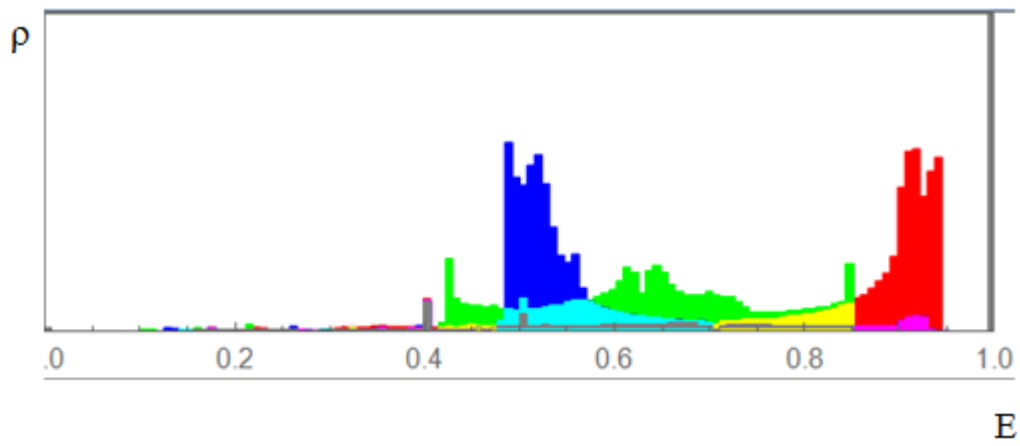
التقريب من الدرجة الأولى :



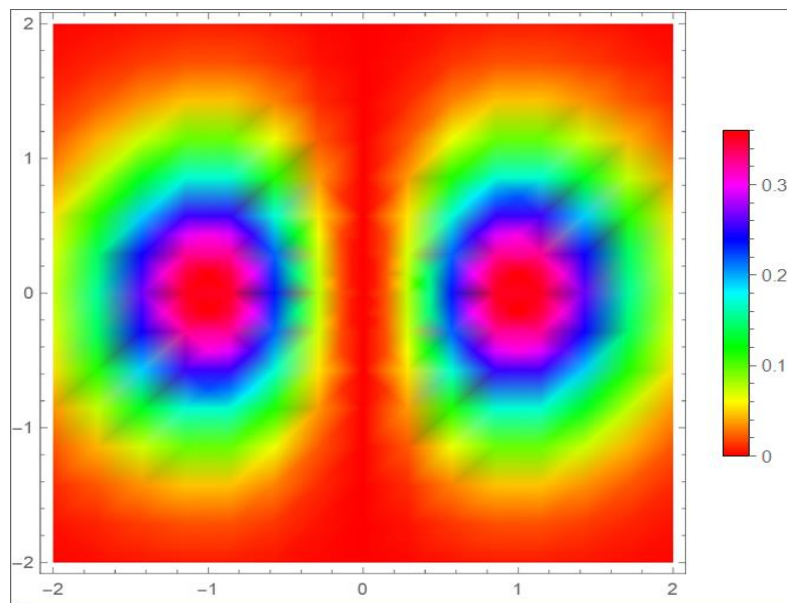
الشكل (3.3) تمثيل كثافة توزيع الإلكترونات في حالة $l_i = m_i \pm 1$.



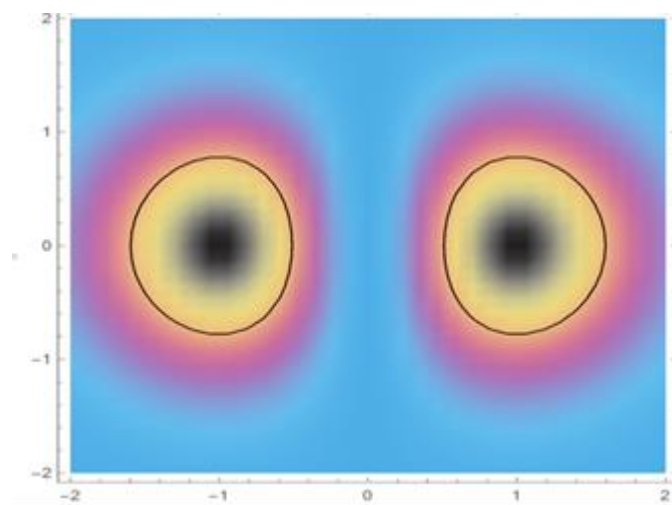
الشكل (4.3) تمثيل خطوط الطاقة في حالة $l_i = m_i \pm 1$.



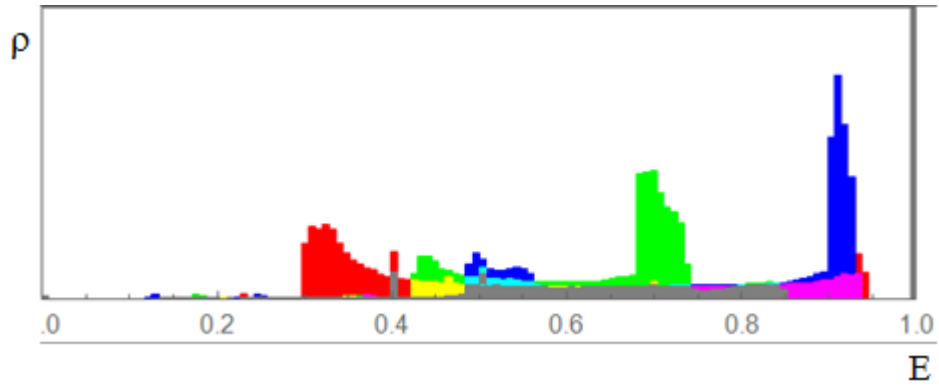
الشكل (5.3) التمثيل الطيفي للتوزيع الإلكتروني في حالة $l_i = m_i \pm 1$.



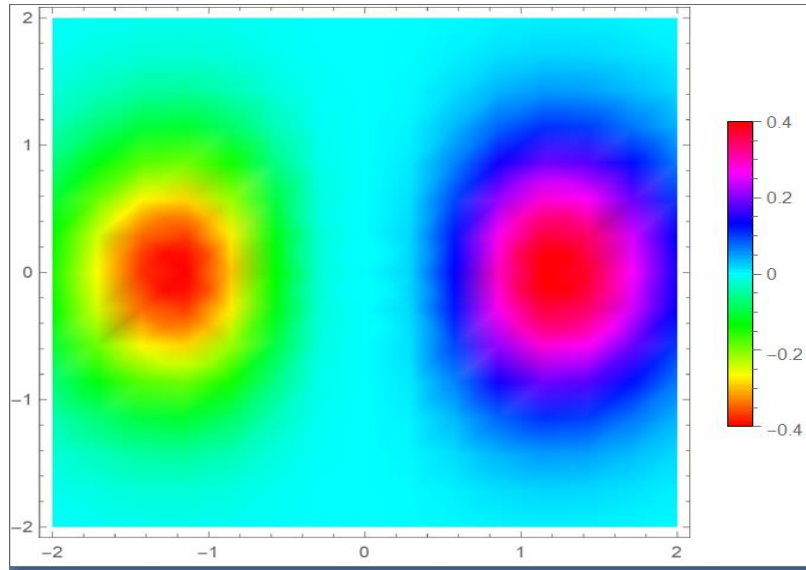
الشكل (6.3) تمثيل كثافة توزيع الإلكترونات في حالة $l_i = m_i \pm 2$.



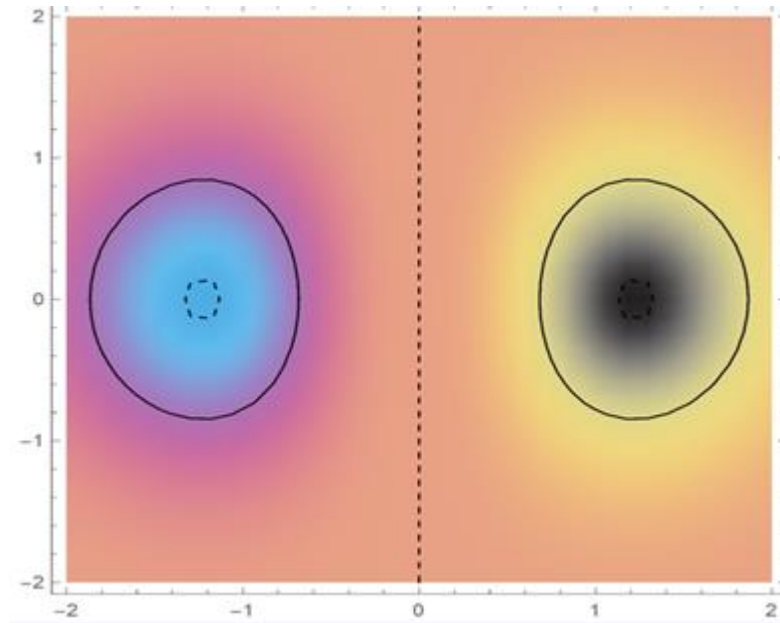
الشكل (7.3) تمثيل خطوط الطاقة في حالة $l_i = m_i \pm 2$.



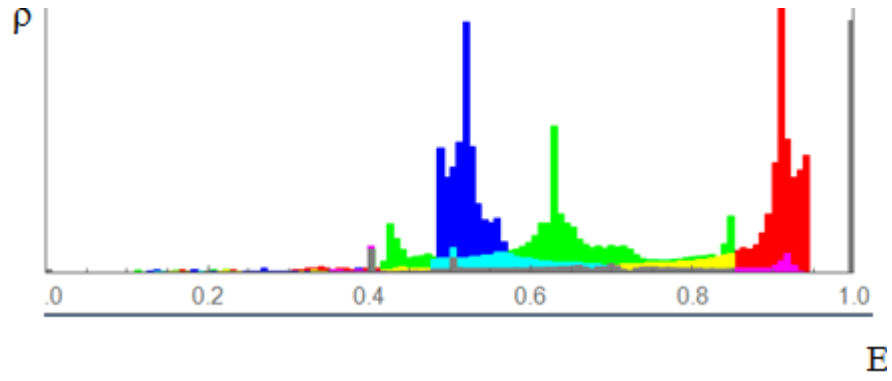
الشكل (8.3) التمثيل الطيفي للتوزيع الإلكتروني في حالة $l_i = m_i \pm 2$.



الشكل (9.3) تمثيل كثافة توزيع الإلكترونات في حالة $l_i = m_i \pm 3$.



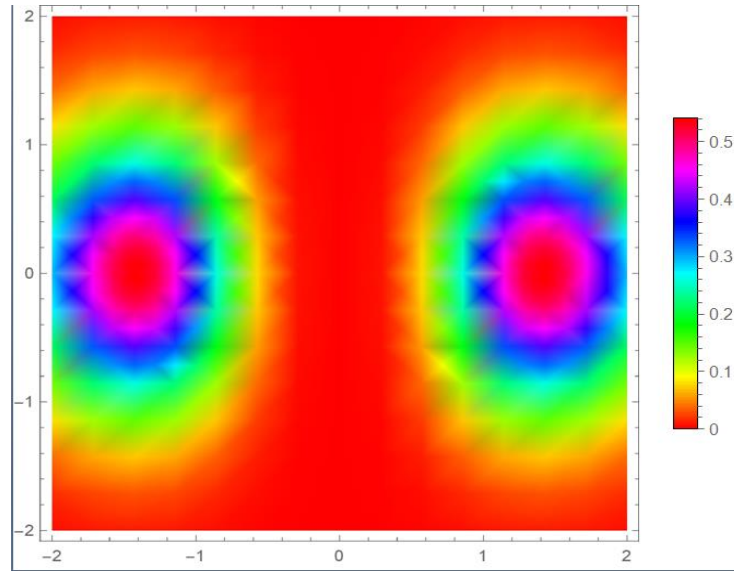
الشكل (10.3) تمثيل خطوط الطاقة في حالة $l_i = m_i \pm 3$.



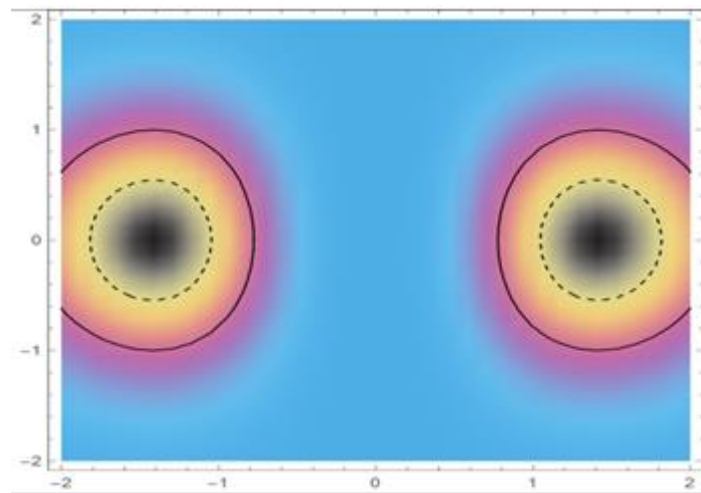
الشكل (11.3) التمثيل الطيفي للتوزيع الإلكتروني في حالة $l_i = m_i \pm 3$.

التقريب من الدرجة الثانية :

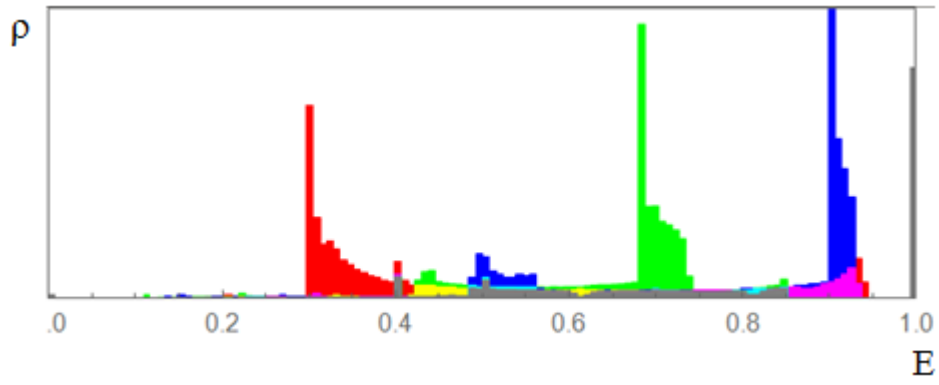
$$\rho = f(E)$$



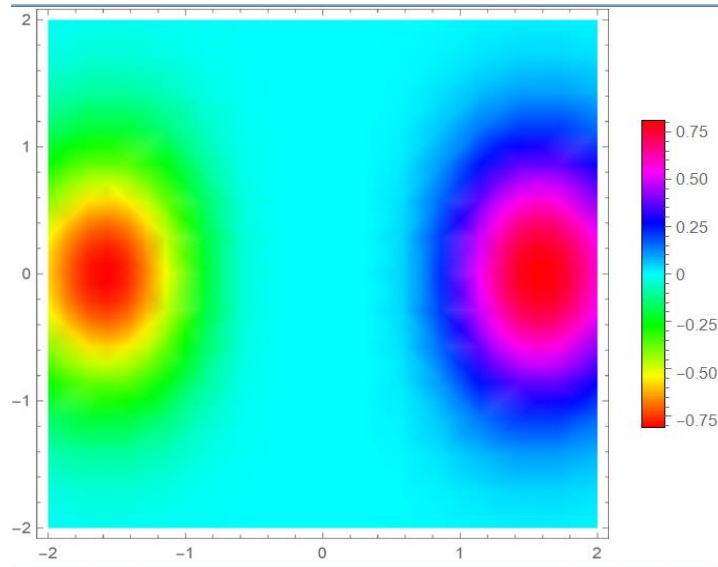
الشكل (12.3) تمثيل كثافة توزيع الإلكترونات في حالة $l = m \pm 1$.



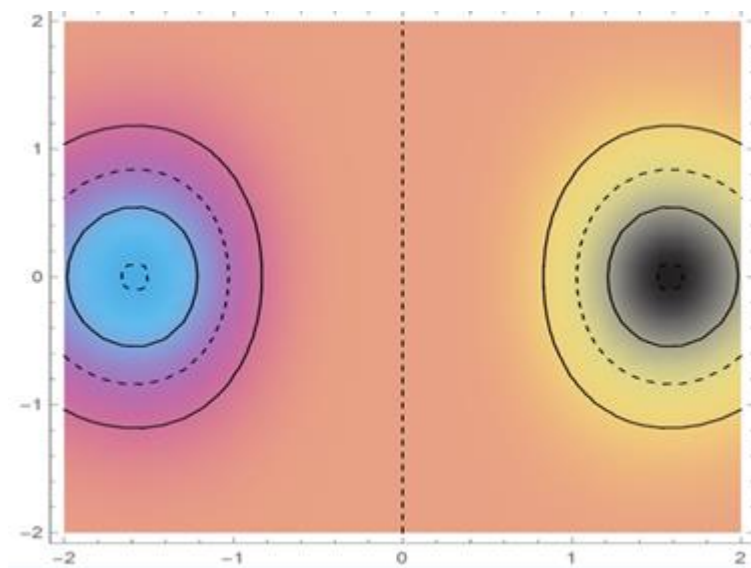
الشكل (13.3) تمثيل خطوط الطاقة في حالة $l = m \pm 1$



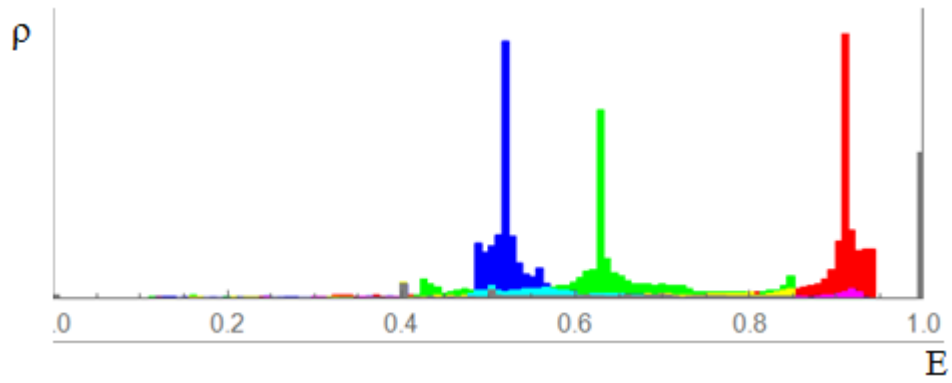
الشكل (14.3) التمثيل الطيفي للتوزيع الإلكتروني في حالة $l = m \pm 1$.



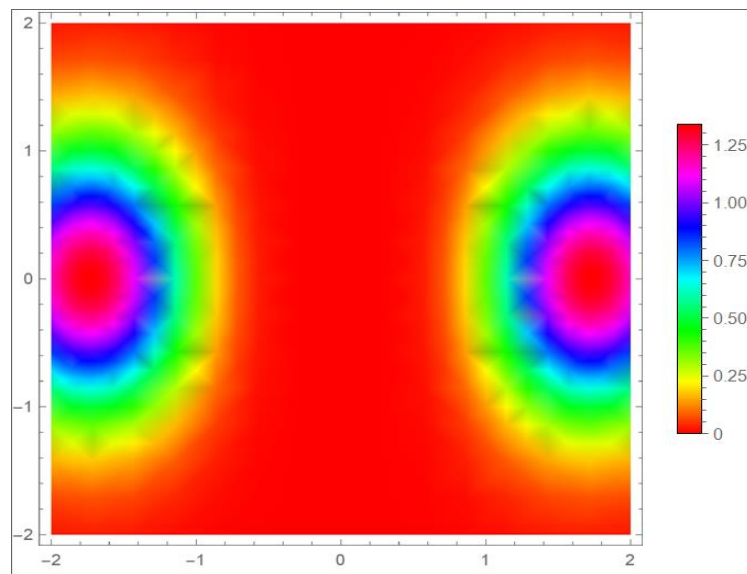
الشكل (15.3) تمثيل كثافة توزيع الإلكترونات في حالة $l = m \pm 2$.



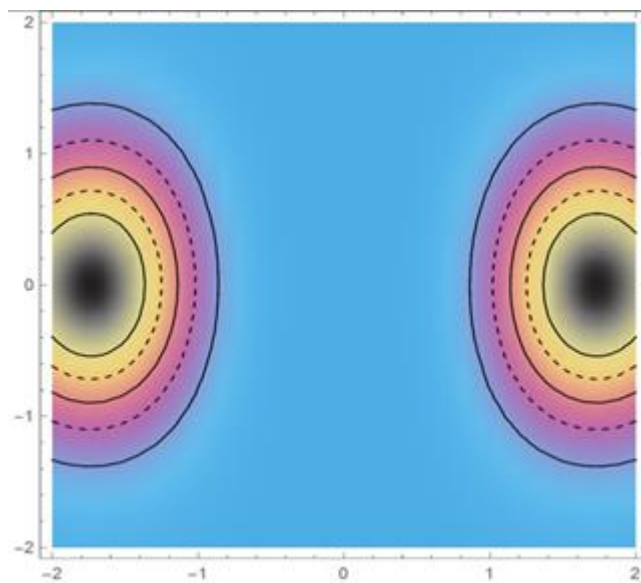
الشكل (16.3) تمثيل خطوط الطاقة في حالة $l = m \pm 2$



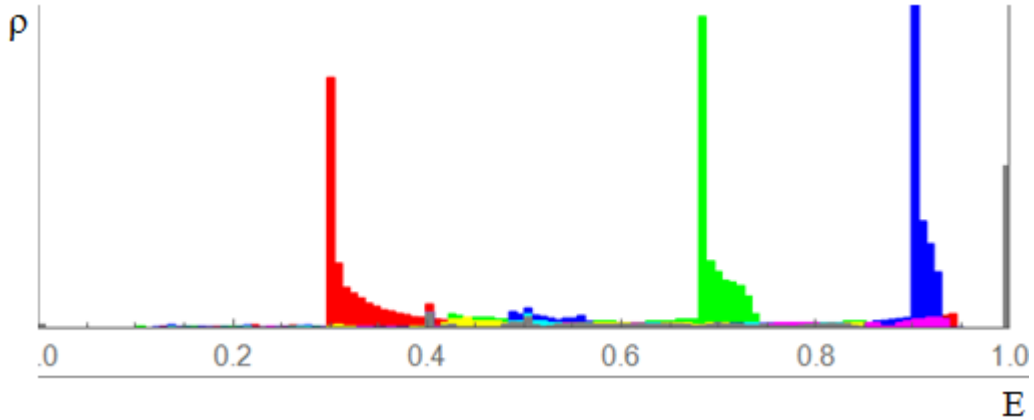
الشكل (17.3) التمثيل الطيفي للتوزيع الإلكتروني في حالة $l = m \pm 2$.



الشكل (18.3) تمثيل كثافة توزيع الإلكترونات في حالة $l = m \pm 3$.



الشكل (19.3) تمثيل خطوط الطاقة في حالة $l = m \pm 3$



الشكل (20.3) التمثيل الطيفي للتوزيع الإلكتروني في حالة $l = m \pm 3$.

من أجل قيم عشوائية ل ϵ_1 و ϵ_2

في حالة $l = m \pm 1$ نلاحظ أن المنطقة الحمراء تمتلك أقل طاقة عكس الكثافة الداخلية (أي المنطقتين الزرقاء والخضراء) وبالتالي فالنظام يفضل زيادة المنطقة الحمراء من أجل تخفيض الطاقة وهذا يعني نقص احتمال تشكل ثنائيات الشوائب. الشكل (5.3)

نلاحظ من خلال الشكل (8.3) أن المنطقة الحمراء بين الثنائيات هي التي تمتلك أقل طاقة في المخطط بينما الكثافة الإلكترونية الداخلية، والممثلة باللونين الأزرق والأخضر تمتلكان أعلى وبالتالي فالنظام يفضل زيادة المنطقة الحمراء وبالتالي يكون احتمال تشكل الثنائيات صغير.

في حالة $l = m \pm 3$ أي الجوار الثاني نلاحظ أن الأمر ينعكس حيث تصبح المنطقة الحمراء ذات طاقة أعلى من المنطقتين الزرقاء والخضراء وبالتالي فالنظام يفضل تقليل المنطقة الحمراء من أجل تخفيض الطاقة وبالتالي يزداد احتمال تشكل ثنائيات الشوائب. الشكل (11.3)

التقريب من الدرجة الثانية :

في حالة $l_i = m_i \pm 1$ نلاحظ أيضا وجود تفاصيل جديدة في الشكل حيث يحدث تمازج بين الحالات (الصفراء، الخضراء و الزرقاء) ولكن في وجود فرق كبير في الطاقة بين المنطقة الحمراء والزرقاء وبالتالي فالنظام يفضل زيادة المنطقة الحمراء وبالتالي فمن المرجح عدم تشكل ثنائيات الشوائب. الشكل (14.3)

في حالة $l_i = m_i \pm 2$ نلاحظ وجود تفاصيل إضافية يظهر فيها امتزاج شديد للحالات الخضراء والزرقاء وبالتالي سوف يحدث هناك صراع بين تشكل أو عدم تشكل الشوائب. الشكل (17.3)

في حالة $l_i = m_i \pm 3$ نلاحظ أن التفاصيل الصغيرة أصبحت أكثر وضوحا، ولكن في وجود تمازج شديد للحالات (الخضراء والزرقاء) وبالتالي سوف يكون هناك اهتزاز بين حالة تشكل أو عدم تشكل ثنائيات الشوائب. الشكل (20.3)

نتيجة عاملة

النتيجة العامة

الغرافن مادة مميزة جدا من حيث تنوع خواصها الفيزيائية والذي أدى إلى تنوع استخدامها في التكنولوجيات الحديثة. ويعتبر تصفية المحاليل أو تحلية المياه من أهم الاستخدامات وهذا يؤدي إلى تشكل الشوائب على سطح الغرافن , وتشكل ثنائيات الشوائب هو أحد المقاييس التي يمكن أن نختبر بها فعالية عملية التصفية .

عملية المحاكاة باستخدام خواص دوال Green أعطت نتائج واضحة في التقريب من الدرجة الأولى حيث يمكننا توقع تشكل ثنائيات الشوائب من عدمها , إلا أن نتائج التقريب من الدرجة الثانية لم تكن كذلك.

إن أهمية هذه العملية تستدعي دراسات أكثر ومحاكاة باستخدام تقنيات أحدث.

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] 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.
- [3] <https://www.ahbmoda.com.br/colecao/141217-45>.
- [4] Harder ,Better,Faster,Stronger ; "La Recherche Britannique Sur Le Graphene "; Science et Technologie au Royaume-Uni(2013).
- [5] Koratkar, Nikhil A. "Graphene in composite materials: synthesis, characterization and applications". DEStech Publications, Inc, 2013.
- [6] Ninno, D. "Lecture Notes on Graphene." 2013.
- [7] T.Kuilla,S.Bhadra,D.Yao,N.Hoonkin ,S.Bose,J.Heehee ; "Recent advances in graphene basepolymer composites ";progressin polymer science ; pp 1350-1375 (2010).
- [8] Nair, Rahul Raveendran, et al. "Fine structure constant defines visual transparency of graphene." Science , 2008.
- [9] <https://www.academia.edu/12156115/graphene>
- [10] Ray, Sekhar Chandra. "Applications of Graphene and Graphene-Oxide based Nanomaterials."2015
- [11] Bharech, Somnath, and Richa Kumar. "A Review on the Properties and Applications of Graphene" . 2015.
- [12] Brownson, Dale AC, and Craig E. Banks. "The handbook of graphene electrochemistry". 2014.
- [13] Ke, Qingqing, and John Wang. "Graphene-based materials for supercapacitor electrodes–A review." Journal of Materiomics 2016.
- [14] Clavel, Milène. " Etude de l'intégration de transistors à canal en graphène épitaxié par une technologie compatible CMOS". Diss. Université de Grenoble, 2011.
- [15] Ke, Qingqing, and John Wang. "Graphene-based materials for supercapacitor electrodes–A review." Journal of Materiomics 2016.
- [16] <https://lafayettefirefighters.com/difference-between-graphite-and-graphene>
- [17] Développement de dispositifs à base de graphène pour des applications hautes

fréquences - Scientific Figure on ResearchGate. Available from:

https://www.researchgate.net/figure/1-Structure-cristalline-du-graphite-a-et-du-diamant-b_fig47_304249025[accessed 8 Jun, 2022]

- [18] Y. Baskin et L. Meyer, « Lattice Constants of Graphite at Low Temperatures », *Phys. Rev.*, vol. 100, n° 2, p. 544-544, oct. 1955.
- [19] S. Bae, H. Kim, Y. Lee, X. Xu, J.-S. Park, Y. Zheng, J. Balakrishnan, T. Lei, H. Ri Kim, Y. I. Song, Y.-J. Kim, K. S. Kim, B. Özyilmaz, J.-H. Ahn, B. H. Hong, et S. Iijima, « Roll-to-roll production of 30-inch graphene films for transparent electrodes », *Nat. Nanotechnol.*, vol. 5, n° 8, p. 574-578, juin 2010.
- [20] M. I. Katsnelson, « Graphene: carbon in two dimensions », *Mater. Today*, vol. 10, n° 1, p. 20–27, 2007.
- [21] S. Iijima, « Helical microtubules of graphitic carbon », *Nature*, vol. 354, n° 6348, p.56-58, nov. 1991.
- [22] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, et R. E. Smalley, « C₆₀:Buckminsterfullerene », *Nature*, vol. 318, n° 6042, p. 162-163, nov. 1985.
- [23] S. Iijima et T. Ichihashi, « Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter », *Nature*, vol. 363, n° 6430, p. 603-605, juin 1993.
- [24] P. R. Wallace, « The Band Theory of Graphite », *Phys. Rev.*, vol. 71, n° 9, p. 622-634, mai 1947.
- [25] N. D. Mermin, « Crystalline order in two dimensions », *Phys. Rev.*, vol. 176, n° 1, p.250, 1968.
- [26] A. Fasolino, J. H. Los, et M. I. Katsnelson, « Intrinsic ripples in graphene », *Nat. Mater.*, vol. 6, n° 11, p. 858-861, nov. 2007.
- [27] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, et A. A. Firsov, « Electric field effect in atomically thin carbon films », *Science*, vol. 306, n° 5696, p. 666–669, 2004.
- [28] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S.V. Dubonos, et A. A. Firsov, « Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene », *Nature*, vol. 438, n° 7065, p. 197-200, nov. 2005.
- [29] M. C. Lemme, T. J. Echtermeyer, M. Baus, et H. Kurz, « A Graphene

- Field-Effect Device », *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 28, n° 4, p. 282-284, avr. 2007.
- [30] Graphene- The Nobel Prize in Physics 2010 honours two scientists, who have made the decisive contributions to this development. They are Andre K. Geim and Konstantin S. Novoselov
- [31] E. P. Adams, « Review: E. Schrödinger, Mémoires sur la Mécanique Ondulatoire », *Bull. New Ser. Am. Math. Soc.*, vol. 39, n° 11, p. 854-854, nov. 1933.
- [32] W. Pauli, *Exclusion principle and quantum mechanics*. Springer, 1994.
- [33] « Orbitale atomique », *Wikipédia*.
- [34] J. Schneider, « Propriétés Électroniques du Graphite », Université de Grenoble, 2010.
- [35] A. H. Castro Neto, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, et A. K. Geim, « The electronic properties of graphene », *Rev. Mod. Phys.*, vol. 81, n° 1, p. 109-162, janv. 2009.
- [36] Henry Mathieu et H. Fanet, *Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques*, 6^e éd. Paris: Dunod, 2009.
- [37] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. New York: John Wiley and Sons, 1996.
- [38] Y. H. Wu, T. Yu, et Z. X. Shen, « Two-dimensional carbon nanostructures: Fundamental properties, synthesis, characterization, and potential applications », *J. Appl. Phys.*, vol. 108, n° 7, p. 071301, 2010.
- [39] S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, et E. Rossi, « Electronic transport in two- dimensional graphene », *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, n° 2, p. 407-470, mai 2011.
- [40] M. Gerl et J. P. Issi, *Physique des matériaux*. PPUR presses polytechniques, 1997.
- [41] D. P. DiVincenzo et E. J. Mele, « Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds », *Phys. Rev. B*, vol. 29, n° 4, p. 1685, 1984.
- [42] P. Avouris, « Graphene: Electronic and Photonic Properties and Devices », *Nano Lett.*, vol. 10, n° 11, p. 4285-4294, nov. 2010.

- [43] J.-N. Fuchs, M. O. Goerbig, et M. Potemski, « Des électrons sans masse dans une feuille de carbone », *Images Phys. CNRS*, p. 50–56, 2007.
- [44] P. Avouris, Z. Chen, et V. Perebeinos, « Carbon-based electronics », *Nat. Nanotechnol.*, vol. 2, n° 10, p. 605–615, 2007.
- [45] A. K. Geim et K. S. Novoselov, « The rise of graphene », *Nat. Mater.*, vol. 6, n° 3, p. 183-191, mars 2007.
- [46] J.-H. Chen, C. Jang, S. Adam, M. S. Fuhrer, E. D. Williams, et M. Ishigami, « Charged-impurity scattering in graphene », *Nat. Phys.*, vol. 4, n° 5, p. 377-381, avr. 2008.
- [47] K. I. Bolotin, K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, et H. L. Stormer, « Ultrahigh electron mobility in suspended graphene », *Solid State Commun.*, vol. 146, n° 9-10, p. 351-355, juin 2008.
- [48] D. R. Cooper, B. D’Anjou, N. Ghattamaneni, B. Harack, M. Hilke, A. Horth, N. Majlis, M. Massicotte, L. Vandsburger, E. Whiteway, et others, « Experimental review of graphene », *ArXiv Prepr. ArXiv11106557*, 2011.
- [49] Yinxiao Yang et R. Murali, « Impact of Size Effect on Graphene Nanoribbon Transport », *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 31, n° 3, p. 237-239, mars 2010.
- [50] T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, et E. Rotenberg, « Controlling the electronic structure of bilayer graphene », *Science*, vol. 313, n° 5789, p. 951–954, 2006.
- [51] Y. H. Ho, J. Y. Wu, Y. H. Chiu, J. Wang, et M. F. Lin, « Electronic and optical properties of monolayer and bilayer graphene », *Philos. Trans. R. Soc. Math. Phys. Eng. Sci.*, vol. 368, n° 1932, p. 5445-5458, déc. 2010.
- [52] A. S. Mayorov, D. C. Elias, M. Mucha-Kruczynski, R. V. Gorbachev, T. Tudorovskiy, A. Zhukov, S. V. Morozov, M. I. Katsnelson, A. K. Geim, et K. S. Novoselov, « Interaction-driven spectrum reconstruction in bilayer graphene », *Science*, vol. 333, n° 6044, p. 860–863, 2011.
- [53] Y. Zhang, T.-T. Tang, C. Girit, Z. Hao, M. C. Martin, A. Zettl, M. F. Crommie, Y. R. Shen, et F. Wang, « Direct observation of a widely tunable bandgap in bilayer graphene », *Nature*, vol. 459, n° 7248, p. 820-823, juin 2009.
- [54] Y. Guo, W. Guo, et C. Chen, « Tuning field-induced energy gap of bilayer

- graphene via interlayer spacing », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 92, n° 24, p. 243101, 2008.
- [55] F. Xia, D. B. Farmer, Y. Lin, et P. Avouris, « Graphene Field-Effect Transistors with High On/Off Current Ratio and Large Transport Band Gap at Room Temperature », *Nano Lett.*, vol. 10, n° 2, p. 715-718, févr. 2010.
- [56] M. Terrones, A. R. Botello-Méndez, J. Campos-Delgado, F. López-Urías, Y. I. Vega- Cantú, F. J. Rodríguez-Macías, A. L. Elías, E. Muñoz-Sandoval, A. G. Cano-Márquez, J.-C. Charlier, et H. Terrones, « Graphene and graphite nanoribbons: Morphology, properties, synthesis, defects and applications », *Nano Today*, vol. 5, n° 4, p. 351-372, août 2010.
- [57] T. Taychatanapat, K. Watanabe, T. Taniguchi, et P. Jarillo-Herrero, « Quantum Hall effect and Landau-level crossing of Dirac fermions in trilayer graphene », *Nat. Phys.*, vol. 7, n° 8, p. 621-625, juin 2011.
- [58] M. Han, B. Özyilmaz, Y. Zhang, et P. Kim, « Energy Band-Gap Engineering of Graphene Nanoribbons », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, n° 20, mai 2007.
- [59] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, et M. S. Dresselhaus, « Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence », *Phys. Rev. B*, vol. 54, n° 24, p. 17954, 1996.
- [60] K. Wakabayashi, « Low-Energy Physical Properties of Edge States in Nano-Graphites », PhD thesis, University of Tsukuba, 2000.
- [61] K. Wakabayashi, K. Sasaki, T. Nakanishi, et T. Enoki, « Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions », *Sci. Technol. Adv. Mater.*, vol. 11, n° 5, p. 054504, oct. 2010.
- [62] Z. Johari, M. T. Ahmadi, D. C. Y. Chek, N. A. Amin, et R. Ismail, « Modelling of Graphene Nanoribbon Fermi Energy », *J. Nanomater.*, vol. 2010, août 2010.
- [63] Y. Sui, T. Low, M. Lundstrom, et J. Appenzeller, « Signatures of Disorder in the Minimum Conductivity of Graphene », *Nano Lett.*, vol. 11, n° 3, p. 1319-1322, mars 2011.
- [64] G. Barton. Elements of Green's Functions and Propagation: Potentials, Diffusion and Waves. Clarendon, Oxford, 1989.
- [65] I. Stakgold. Green's Functions and Boundary Value Problems. Wiley, NewYork, second edition, 1998.

- [66] D.G.Duffy. Green's Functions with Applications. Chapman and Hall/CRC, Boca Raton, FL, 2001.
- [67] Michael D. Greenberg, Applications of Green's Functions in Science and Engineering, Dover (2015)
- [68] Introduction to Green's Functions in Physics, K. A. I. L. Wijewardena Gamalath, Alpha Science International, Limited, 2019
- [69] Green's Functions and Condensed Matter, G. Rickayzen, Dover (1980)
- [70] Elements of Green's Functions and Propagation: Potentials, Diffusion, and Waves, György Barton, Gabriel Barton, Oxford (1989)
- [71] Green's Functions For Solid State Physicists, S Doniach, Ernst Sondheimer, S Doniach, Ernst Sondheimer, Imperial college press (1989)
- [72] Green's Functions and Condensed Matter, G. Rickayzen, Dover (1980).
- [73] Wang Huaiyu, Green's Function in Condensed Matter Physics, Science Press (2012)
- [74] Dean G. Duffy, Green's Functions with Applications, CRC Press (2018)

ملخص

الهدف الرئيسي من هذا العمل هو التحقيق في إمكانية إنشاء ثنائيات الشوائب في الجرافين , حيث أدت محاكاة الكثافة الإلكترونية للاتجاهات العشوائية للمدارات الذرية إلى تقريب من الدرجة الأولى لاحتمال هذه الظاهرة , لكن التقريب الثاني لم تسفر عنه نتائج واضحة .

الكلمات المفتاحية : الجرافين - الثنائيات - شائبة - العشوائية

Abstract

The main objective of this work is to investigate the possibility of creating dimers of impurities in graphene , the simulation of the electron density of the random directions of the atomic orbitals leads to an approximation of the first degree of probability of this phenomenon, but the second approximation did not yield clear results.

Keywords: Graphene – dimmers – impurity - Random

Résumé

L'objectif principal de ce travail est d'étudier la possibilité de créer des dimères d'impuretés dans le graphène , la simulation de la densité électronique des directions aléatoires des orbitales atomiques conduit à une approximation de le premier degré de probabilité de ce phénomène , mais la deuxième approximation n' a pas donné de résultats clairs.

Mots clés : graphène - dimères – impureté – aléatoires.

الملحق A:

دوال Green ونظرية الإضطرابات:

إن مسألة إيجاد القيم الذاتية والدوال الذاتية للهاملتوني $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$ يمكن حلها باستخدام دوال غرين [70] وذلك بإتباع الخطوات التالية :

1- حساب دالة Green $G_0(z)$ الخاصة بالهاملتوني غير المضطرب \mathcal{H}_0 .

2- القيام بنشر $G(z)$ على شكل سلسلة اضطراب بدلالة $G_0(z)$ و \mathcal{H}_0 ,

حيث : $G(z)$ هي دالة غرين الخاصة بالهاملتوني \mathcal{H} .

3- القيام باستخراج المعلومات المتعلقة بالقيم الذاتية والأشعة الذاتية الخاصة بالهاملتوني \mathcal{H} باستعمال

$G(z)$ حيث تكتب دوال Green $G_0(z)$ و $G(z)$ كما يلي :

$$G_0(z) = (Z - \mathcal{H}_0)^{-1} \quad (A.1)$$

$$G(z) = (Z - \mathcal{H})^{-1} \quad (A.2)$$

باستخدام المعادلتين (A.1) وكذلك (A.2) يمكننا أن نكتب $G(z)$ على الشكل :

$$G(z) = (Z - \mathcal{H}_0 - \mathcal{H}_1)^{-1} = \{(Z - \mathcal{H}_0)[1 - (Z - \mathcal{H}_0)^{-1}\mathcal{H}_1]\}^{-1} \quad (A.3)$$

$$= [1 - (Z - \mathcal{H}_0)^{-1}\mathcal{H}_1]^{-1} (Z - \mathcal{H}_0)^{-1}$$

$$= [1 - G_0(Z)\mathcal{H}_1]^{-1} G_0(Z) \quad (A.4)$$

عند القيام بعملية نشر للمؤثر $(1 - G_0\mathcal{H}_1)^{-1}$ في سلسلة قوى نجد مايلي :

$$G = G_0 + G_0\mathcal{H}_1G_0 + G_0\mathcal{H}_1G_0\mathcal{H}_1G_0 + \dots \quad (A.5)$$

يمكننا كتابة المعادلة (A.5) بشكل أكثر اختصارا كما يلي :

$$G = G_0 + G_0\mathcal{H}_1(G_0 + G_0\mathcal{H}_1G_0 + \dots) = G_0 + G_0\mathcal{H}_1G_0 \quad (A.6)$$

أو بشكل مكافئ :

$$G = G_0 + (G_0 + G_0\mathcal{H}_1G_0 + \dots)\mathcal{H}_1G_0 = G_0 + G\mathcal{H}_1G_0 \quad (A.7)$$

يلعب مؤثر التشتت $T(Z)$ دورا مهما في حسابات التشتت [71] وهو على علاقة مباشرة بدالة Green كما يلي :

$$T(Z) = \mathcal{H}_1 G(Z) (Z - \mathcal{H}_0) \quad (A.8)$$

باستخدام المعادلة (A.8) والمعادلة (A.5) فإنه يمكننا كتابة المؤثر $T(Z)$ كما يلي :

$$T(Z) = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_1 G_0(Z) \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_1 G_0(Z) \mathcal{H}_1 G_0(Z) \mathcal{H}_1 + \dots \quad (A.9)$$

ويمكننا تبسيط المجموع (A.9) كما يلي :

$$T(Z) = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_1 (G_0 + G_0 \mathcal{H}_1 G_0 + \dots) \mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_1 G \mathcal{H}_1 \quad (A.10)$$

$$= \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_1 G_0 (\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_1 G_0 \mathcal{H}_1 + \dots) = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_1 G_0 T$$

$$= \mathcal{H}_1 + (\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_1 G_0 \mathcal{H}_1 + \dots) G_0 \mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_1 + T G_0 \mathcal{H}_1$$

وبمساعدة T فالمعادلة (A.6) يمكن إعادة كتابتها كما يلي :

$$G(Z) = G_0(Z) + G_0(z) T(Z) G_0(Z)$$

وهذا يعني أن معرفتنا لعبارة $T(Z)$ تسمح لنا بمعرفة عبارة G مباشرة .

الملحق B :

هاملتوني الارتباط الشديد في وجود شوائب:

يكتب هاملتوني الارتباط الشديد بالعبارة التالية :

$$\mathcal{H} = \sum_l |l\rangle \mathcal{E}_l \langle l| + \sum_{lm} |l\rangle V_{lm} \langle m| \quad (B.1)$$

حيث تمثل الحالات $|l\rangle$ مايشبه المدارات الذرية المتمركزة حول المواقع $\{l\}$ التي تشكل الشبكة .

ويلعب الهاملتوني السابق دورا مهما في فيزياء الحالة الصلبة [72].

وفي حالة الشبكة الإنسحابية , حيث لايتغير الهاملتوني عند الانسحاب بشعاع l يعطى في حالة شبكة بعدها d :

$$l = \sum_{a=1}^d l_a r_a, \quad l_a = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \dots \quad (B.2)$$

حيث تمثل r_a أشعة أساس مستقلة للشبكة , ويكون عددها d شعاع . وتعرف المدارات الذرية المرافقة للذرة الموجودة في الموقع " l " بالعبارة :

$$\phi(r-l) = \langle r|l \rangle \quad (B.3)$$

وباعتبار التعامد والتجانس للمدارات الذرية , يمكننا كتابة العناصر المصفوفية للهاملتوني كما يلي [73] :

$$\langle l|\mathcal{H}|m \rangle = \mathcal{E}_l \delta_{lm} + V_{lm} \quad (B.4)$$

كما أن صمود الهاملتوني بالانسحاب في الشبكة الدورية بشعاع l , يسمح لنا ان نكتب :

$$\forall l \quad \mathcal{E}_l = \mathcal{E}_0 \quad (B.5)$$

$$V_{lm} = V_{l-m} \quad (B.6)$$

إن التعامل مع الهاملتوني (B.1) سلس جدا , بحيث يمكننا التعميم في حالة إدخال شبكات تحتية حيث يصبح الهاملتوني متناظرا إنسحابيا , شعاع إنسحاب الشبكة $\{A\}$ أو شعاع إنسحاب الشبكة $\{B\}$. وفي هذه الحالة [74] :

$$\mathcal{E}_l = \begin{cases} \mathcal{E}_A & l \in \{A\} \\ \mathcal{E}_B & l \in \{B\} \end{cases} \quad (B.7)$$

ومن أجل التبسيط يمكننا ان نعتبر الجوار الأقرب فقط :

$$V_{lm} = \begin{cases} V & , |l - m| = 1 \\ 0 & , |l - m| > 1 \end{cases} \quad (B.8)$$

ففي حالة وجود شائبة واحدة في الموضع l مثلا فالعناصر المصفوفية القطرية \mathcal{E}_l سوف تساوي $\mathcal{E}_0 + \mathcal{E}$ بينما تكون مساوية \mathcal{E}_0 في بقية المواقع [74] .

حيث يكون الجزيئ الغير مضطرب \mathcal{H}_0 :

$$\mathcal{H}_0 = \sum_m |m\rangle \mathcal{E}_0 \langle m| + V \sum_{mm'} |n\rangle \langle m| \quad (B.5)$$

بينما يكون حد الاضطراب الناتج عن وجود الشائبة [74] , وذلك عند إعتبار تأثير العناصر الغير قطرية :

$$\mathcal{H}_1 = |l\rangle \mathcal{E} \langle l| \quad (B.6)$$

باستخدام معادلات الملحق (A) نجد :

$$\begin{aligned} T &= |l\rangle \mathcal{E} \langle l| + |l\rangle \mathcal{E} \langle l| G_0 |l\rangle \mathcal{E} \langle l| + |l\rangle \mathcal{E} \langle l| G_0 |l\rangle \mathcal{E} \langle l| G_0 |l\rangle \mathcal{E} \langle l| + \dots \\ &= |l\rangle \mathcal{E} \{ 1 + \mathcal{E} G_0(l, l) + [\mathcal{E} G_0(l, l)]^2 + \dots \} \langle l| \\ &= |l\rangle \frac{\mathcal{E}}{1 - \mathcal{E} G_0(l, l)} \langle l| \end{aligned} \quad (B.7)$$

حيث :

$$G_0(l, l) = \langle l| G_0 |l\rangle \quad (B.8)$$

وبمجرد حصولنا على عبارة T فإن G يمكن الحصول عليها تلقائيا:

$$G = G_0 + G_0 T G_0 = G_0 + G_0 |l\rangle \frac{\mathcal{E}}{1 - \mathcal{E} G_0(l, l)} \langle l| G_0 \quad (B.9)$$