

Graphene: Ηλεκτρικές και Μηχανικές Ιδιότητες

Διάκος Νικόλαος

Δι-ιδρυματικό Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα
"Νανοτεχνολογία για Ενεργειακές Εφαρμογές"

Το γραφένιο, είναι μια επίπεδη μονοστιβάδα ατόμων άνθρακα και ο πρώτος συνθετικός δισδιάστατος (2D) ατομικός κρύσταλλος [1]. Δεν υπάρχει σε ελεύθερη κατάσταση και απλούστερος τρόπος για να παράγουμε γραφένιο είναι μέσω της μεθόδου Scotchtape κατά την οποία το ανώτερο στρώμα της επιφάνειας υψηλής ποιότητας γραφίτη (ορυκτό), απομονώνεται, με χρήση κολλητικής ταινίας, εφαρμόστηκε από τους Andre Geim και Konstantin Novoselov με αποτέλεσμα να τους χαρίσει το Nobel φυσικής το 2010 [3]-[2]. Στην εργασία αυτή, θα σταθούμε στην περιγραφή των ηλεκτρικών και μηχανικών ιδιοτήτων του γραφενίου, πραγματοποιώντας αρχικά μια σύντομη εισαγωγική περιγραφή για τη δομή του.

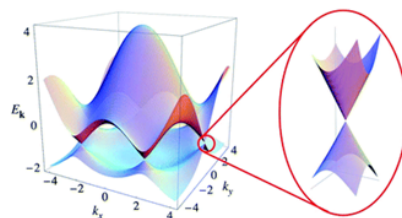
Αποτελείται από άτομα άνθρακα διατεταγμένα σε ένα εξαγωνικό κυψελοειδές «honeycomb» πλέγμα [2]. Τα έξι άτομα άνθρακα του δακτυλίου έχουν έξι ελεύθερους δεσμούς (δύο δεσμοί συντονισμού και τέσσερις απλοί δεσμοί) οι οποίοι συνδέονται ομοιοπολικά με έξι άλλα άτομα άνθρακα σχηματίζοντας κατ' επέκταση έξι άλλους δακτυλίους γραφενίου [4]. Κάθε μεμονωμένο άτομα άνθρακα σχηματίζει 3 σ δεσμούς και 1 π δεσμό με τους γείτονές του.



Εικόνα 1: Ατομική δομή γραφενίου: 24 άνθρακες συνθέτουν 7 εξαγωνα $0.9 \times 0.9 \text{ nm}$ ($\sim 0.8 \text{ nm}^2$) γραφενίου [13].

Ηλεκτρικές Ιδιότητες Γραφενίου

τα άτομα άνθρακα έχουν sp^2 υβριδισμό καθώς η σ κατάσταση και τα υπολειπόμενα p τροχιακά ηλεκτρόνια σχηματίζουν ένα συζευγμένο π δεσμό και κινούνται ελεύθερα. Τρεις σ καταστάσεις σε ένα άτομο γραφενίου συνθέτουν την χαμηλότερη ζώνη σθένους ενώ απομακρυσμένες π και π^* καταστάσεις συνθέτουν αντίστοιχα την υψηλότερη κατειλημμένη ζώνη σθένους και τη χαμηλότερη κενή ζώνη αγωγιμότητας. Το γραφένιο έχει μηδενικό ενεργειακό χάσμα, όπου η ζώνη σθένους και η ζώνη αγωγιμότητας παρουσιάζουν κωνική διασπορά και συναντιόνται στο σημείο Dirac όπως φαίνεται παρακάτω [5]-[6].



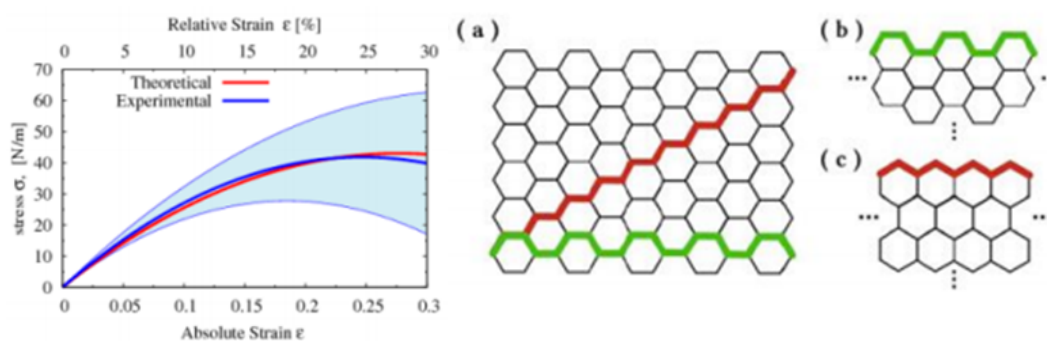
Εικόνα 2: Το ενεργειακό χάσμα του γραφενίου [12].

Κοντά στο σημείο Dirac, η ενέργεια και η ορμή παρουσιάζουν μια γραμμική σχέση

διασποράς, κάνοντας την ενεργό μάζα των ηλεκτρονίων m^* ίση με μηδέν δίνοντας έτσι εξαιρετική αγωγιμότητα στο γραφένιο [7]. Η θαυμαστή κινητικότητα ηλεκτρονίων σε θερμοκρασία δωματίου, είναι σχεδόν ανεξάρτητη από τη θερμοκρασία για τιμές μεταξύ 10K και 100K. Τα ηλεκτρόνια που διαδίδονται μέσω του πλέγματος, χάνουν την μάζα τους παράγοντας quasi-particles (φερμιόνια Dirac χωρίς μάζα) [8].

Μηχανικές Ιδιότητες Γραφενίου

Η φράση που έχει αποδοθεί το γραφένιο είναι «το σκληρότερο υλικό που μετρήθηκε ποτέ». Σε μια πρώτη πειραματική ανάλυση της αντοχής που διέπει το γραφένιο, βρέθηκε ότι το γραφένιο παρουσιάζει τόσο μη γραμμική ελαστική συμπεριφορά όσο και εύθρυπτες ρωγμές [14]. Μία από τις σημαντικότερες μηχανικές ιδιότητες του γραφενίου είναι η αντοχή σε θραύση, καθώς είναι μια ιδιότητα πολύ σχετική με εφαρμογές μηχανικής. Το όριο θραύσης λόγω εφελκυσμού είναι 200 φορές μεγαλύτερο από ένα υποθετικό φιλμ ατσαλιού, ίδιου πάχους με αυτό του γραφενίου. Επίσης το γραφένιο είναι πολύ ελαφρύ. Τέλος, διαπιστώθηκε πειραματικά ότι οι ρωγμές από τις θραύσεις διαδίδονται κυρίως σε ευθείες γραμμές - είτε στην κατεύθυνση armchair είτε στην κατεύθυνση zigzag [9].



Εικόνα 2: Θεωρητική και πειραματική καμπύλη για την ελαστική απόκριση του γραφενίου [10]. (α) πλέγμα γραφενίου απεικονίζει τους δυο τρόπους θραύσης του. (β) θραύση τύπου armchair (γ) θραύση τύπου zigzag [11].

Βιβλιογραφία

- [1] Graphene: fundamental research and potential applications Yujia Zhong, Zhen Zhen, Hongwei Zhu
- [2] Nobel Lecture: Graphene: Materials in the Flatland* K. S. Novoselov School of Physics and Astronomy, The University of Manchester, Oxford Road, Manchester M13 9PL, United Kingdom
- [3] Fradkin, E. Critical behavior of disordered degenerate semiconductors, Phys. Rev. B 33, 3263-3268 (1986).
- [4] Atomic Structures of Graphene, Benzene and Methane with Bond Lengths as Sums of the Single, Double and Resonance Bond Radii of Carbon Raji Heyrovska
- [5] Son, Y. W., Cohen, M. L. & Louie, S. G., Half-metallic graphene nanoribbons. NATURE 444 347 (2006).
- [6] Novoselov, K. S. et al., Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. NATURE 438 197 (2005).
- [7] Graphene, hexagonal boron nitride, and their heterostructures: properties and applications Jingang Wang,abcd Fengcai Ma* b and Mengtao Sun* abc
- [8] Novoselov, K. S.; Geim, A. K.; Morozov, S. V.; Jiang, D.; Katsnelson, M. I.; Grigorieva, I. V.; Dubonos, S. V.; Firsov, A. A. (2005). "Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene". Nature.
- [9] D. Sen, K.S. Novoselov, P. Reis and M.J. Buehler // Small 6 (2010) 1108
- [10] arxiv.org/pdf/1001.4112.pdf
- [11] electronicstructure.wikidot.com/Yasmin
- [12] Fundamental Properties of Graphene Zhiping Xu
- [13] "Atomic Structures of Graphene, Benzene and Methane with Bond Lengths as Sums of the Single, Double and Resonance Bond Radii of Carbon" Raji Heyrovska Institute of Biophysics, Academy of Sciences of the Czech Republic.