

خواص الکتریکی نانولوله های کربنی

مؤلف: یونس نهاوندی بگلری

خواص الکتریکی نانو لوله‌های کربنی

تألیف:

یونس نهاوندی



- سرشناسه : نهانندی بگلری، یونس، ۱۳۶۹-
عنوان و نام پدیدآور : خواص الکتریکی نانو لوله‌های کربنی/تالیف یونس نهانندی بگلری.
مشخصات نشر : تهران: یافته، ۱۴۰۳.
مشخصات ظاهری : ۱۸۳ ص.: مصور (بخشی رنگی)، نمودار (بخشی رنگی).
شابک : ۹۷۸-۶۲۲-۴۸۵۷-۴۰-۸
وضعیت فهرست نویسی : فیپا
یادداشت : کتابنامه: ص. ۱۷۹-۱۸۳.
موضوع : نانو لوله‌های کربنی -- خواص الکتریکی

Carbon nanotubes -- Electric properties

ترانزیستورها با اثر میدان

Field-effect transistors

- رده بندی کنگره : ۹/۴۱۸TA
رده بندی دیویی : ۵/۶۲۰
شماره کتابشناسی ملی : ۹۷۳۹۵۸۸
اطلاعات رکورد کتابشناسی: فیپا



یافته

ناشر کتب دانشگاهی

نشر یافته: ناشر کتاب‌های دانشگاهی

عنوان: خواص الکتریکی نانو لوله‌های کربنی

تألیف: یونس نهانندی

صفحه‌آرایی: یونس نهانندی بگلری

چاپ و صحافی: مؤسسه مهراد

طراحی جلد: امین حیدری

چاپ اول: ۱۴۰۳

شمارگان: ۱۰۰ جلد

شابک: ۹۷۸-۶۲۲-۴۸۵۷-۴۰-۸

حق چاپ محفوظ است.

تهران، خیابان فخر رازی، خیابان شهید وحید نظری، پلاک ۸۵، طبقه چهارم

این کتاب را تقدیم می‌کنم

به مهربان‌ترین همراهان زندگی ام

پدر و مادر عزیزم

که حضورشان همیشه کرمانش روح من بوده است.

فهرست مطالب

فصل اول: مقدمه ای بر کربن و اشکال مختلف آن	۱۱
مقدمه	۱۲
۱-۱ گونه های مختلف کربن در طبیعت	۱۲
۱-۱-۱ کربن بی شکل	۱۲
۱-۱-۲ الماس	۱۳
۱-۱-۳ گرافیت	۱۴
۱-۱-۴ فلورن و نانولوله های کربنی	۱۵
۱-۲ سنتز نانولوله های کربنی	۱۶
۱-۳ پیشرفت تحقیقات نانولوله کربنی تک دیواره	۱۹
۱-۴ هدایت بالستیک	۲۱
۱-۵ ظرفیت حمل جریان، جریان اشباع	۲۲
۱-۶ نانولوله ی کربنی نیمه رسانا	۲۳
فصل دوم: بررسی ساختار هندسی و الکتریکی گرافیت و نانولوله های کربنی	۲۵
مقدمه	۲۶
۲-۱ ساختار الکترونی کربن	۲۶
۲-۲ اربیتال ۲p کربن	۲۷
۲-۲-۱ روش وردشی	۲۷
۲-۲-۲ هیبریداسون اربیتال های کربن	۲۹
۲-۳ ساختار هندسی گرافیت و نانولوله ی کربنی	۳۳
۲-۳-۱ ساختار هندسی گرافیت	۳۳
۲-۳-۲ ساختار هندسی نانولوله های کربنی	۳۵
۲-۴ یاخته ی واحد گرافیت و نانولوله ی کربنی	۳۹
۲-۴-۱ یاخته ی واحد صفحه ی گرافیت	۳۹
۲-۴-۲ یاخته واحد نانولوله ی کربنی	۳۹
۲-۵ محاسبه ساختار نواری گرافیت و نانولوله ی کربنی	۴۲
۲-۵-۱ مولکول های محدود	۴۲

۴۴	۲-۵-۲ ترازهای انرژی گرافیت
۴۶	۲-۵-۳ ترازهای انرژی نانولوله ی کربنی
۴۹	۲-۵-۴ چگالی حالات در نانولوله ی کربنی
۵۱	۲-۶ نمودار پاشندگی فونون ها در صفحه ی گرافیت و نانولوله های کربنی
۵۱	۲-۶-۱ مدل ثابت نیرو و رابطه ی پاشندگی فونونی برای صفحه ی گرافیت
۵۷	۲-۶-۲ رابطه ی پاشندگی فونونی برای نانولوله های کربنی
۵۹	فصل سوم: پراکندگی الکترون فونون
۶۰	مقدمه
۶۰	۳-۱ تابع توزیع الکترون
۶۵	۳-۲ محاسبه نرخ پراکندگی کل
۶۷	۳-۳ شبیه سازی پراکندگی الکترون - فونون
۶۹	۳-۴ محاسبه جریان و مقاومت نانولوله ی کربنی
۷۰	۳-۵ ضرورت تعریف روال واگرد
۷۳	۳-۶ نرخ پراکندگی
۷۴	۳-۷ تابع توزیع در شرایط مختلف فیزیکی
۷۶	۳-۸ بررسی سرعت میانگین الکترون ها، جریان، مقاومت و تحرک پذیری الکترون
۷۶	۳-۸-۱ بررسی توزیع سرعت در نانولوله های زیگزاگ نیمرسانا
۷۸	۳-۸-۲ بررسی جریان الکتریکی در نانولوله های زیگزاگ نیمرسانا
۷۸	۳-۸-۳ بررسی مقاومت نانولوله های زیگزاگ نیمرسانا
۷۹	۳-۸-۴ بررسی تحرک پذیری الکترون در نانولوله های زیگزاگ نیمرسانا
۸۱	فصل چهارم: ترانزیستور های اثر میدان مبتنی بر نانو لوله های کربنی
۸۲	مقدمه
۸۲	۴-۱ ترانزیستور های اثر میدان مبتنی بر نانو لوله های کربنی
۸۶	۴-۲ ترانزیستور های اثر میدانی نانولوله کربنی چند جداره ای
	۴-۳ ترانزیستور های فیلم نازک شبکه نانولوله کربنی و آرایه های ردیف شده مسطح نانولوله های کربنی
۸۷	
۹۲	۴-۴ اثر سد شاتکی در پیوند نانولوله کربنی با فلز اتصال

۹۷	۴-۵ ساختارهای بهبود یافته
۹۷	۴-۵ الف) ترانزیستور نانولوله کربنی با دو گیت
۱۰۰	۴-۵ ب) C_CNFET
۱۰۱	۴-۵ پ) TUNNELING CNTFET
فصل پنجم: نانوربین های گرافنی و مقدمه ی بر ساخت ترانزیستور اثر میدانی با نانوربین	
۱۰۳	های گرافنی
۱۰۴	مقدمه
۱۰۴	۵-۱ نانوربین های گرافنی
۱۰۶	۵-۲ سنتز گرافن
۱۰۹	۵-۳ مهندسی شکاف باند
۱۱۰	۵-۴ ترانزیستور های اثر میدان گرافن
۱۱۰	۵-۵ ترانزیستورهای گرافنی پیشرفته
۱۱۲	۵-۶ FET های گرافن تک لایه
۱۱۵	۵-۷ FET های گرافن دولایه
۱۱۶	۵-۸ FET های نانوربین گرافنی
۱۱۸	پیشنهادهای
۱۲۱	ضمائم
۱۲۲	ضمیمه (الف) تعریف چگالی حالت
۱۲۵	ضمیمه (ب) تعریف عملگر همیلتونی
۱۲۷	ضمیمه (ج) تعریف هادی بالستیک
۱۳۰	ضمیمه (د) تعریف مخروط دیراک
۱۳۳	نگاره های برگزیده
۱۳۹	فهرست منابع

سخن نویسنده

نانولوله های کربنی بدلیل خواص الکتریکی ویژه ای که دارند، در صنعت الکترونیک مدرن، استفاده زیادی پیدا کرده اند. با کمک نانولوله های کربنی، اندازه ترانزیستورها در حال کاهش است و همچنین سرعت عمل آنها نیز افزایش یافته است. در این کتاب قصد داریم به بررسی خواص الکتریکی نانولوله های کربنی و همچنین کاربرد نانولوله های کربنی در ساخت ترانزیستور های اثر میدانی پرداختیم. نانولوله های کربنی به خاطر ساختار منحصر به فرد و خواص الکتریکی، حرارتی و مکانیکی عالی بسیار زیاد مورد توجه قرار در همین راستا پژوهش هایی زیادی بر روی روشهای اصلاح نانولوله ها از طریق باز کردن، عامل دار کردن، پر کردن و اتصال مولکول ها، رسانایی و مقاومت الکتریکی ساختار نانومواد های جدید برای استفاده در زمینه های گوناگون از جمله الکترونیک دارورسانی و پزشکی انجام گرفته است. لذا بر آن شدیم که مطالبی در باب آشنایی با این مواد ارائه کنیم با امید به اینکه این نوشته گشایش جدید در بینشی نو برای یکایک عزیزان باشد.

یونس نهاوندی ۱۴۰۳

مقدمه

در سال ۱۹۸۵، مولکولی به نام سیاه دانه توسط گروهی از محققان دانشگاه رایس کشف شد. این مولکول از ۶۰ اتم کربن در پیوندهای هیبرید شده sp^2 تشکیل شده بود که به شیوه ای بسیار متقارن مرتب شده بودند. جایزه نوبل به ریچارد اسمالی^۱، رابرت کرل^۲ و هری کروتو^۳ برای کشف این آلوتروپ دید کربن اهدا شد. این کشف برای حوزه پر جنب و جوش نانوتکنولوژی کربن پیشگامانه بود. نانولوله های کربنی که در سال ۱۹۹۱ توسط سومیو ایجیما^۴ کشف شد، از اعضای خانواده فولرن هستند. مورفولوژی آن ها معادل است با ورق گرافن در یک لوله یکپارچه که در هر دو انتها پوشیده شده است، نورد می شود. نانولوله های کربنی تک دیواره (SWNT) ها دارای قطری به ترتیب تک قطری هستند و طول آن ها می تواند از ده ها نانومتر تا چندین متر متغیر باشد. SWNT ها همچنین خواص مکانیکی فوق العاده ای را برای کاربرد در مواد کامپوزیت تقویت شده و سیستم های نانوالکترومکانیکی (MEMS) نشان می دهند: مدول یانگ بیش از ۱TPa و مقاومت کششی حدود ۲۰۰GPa است.

علاوه بر این، SWNT^۵ ها ساختارهای بانندی بسیار جالبی دارند. بسته به آرایش اتمی اتم های کربن که نانولوله را تشکیل می دهند، خواص الکترونیکی می توانند در طبیعت فلزی یا نیمه رسانا باشند و ایجاد دستگاه ها، مدارها و رایانه های نانوالکترونیک را با استفاده از SWNT ها ممکن می سازند. این کتاب نانولوله های کربنی و خواص الکتریکی را بررسی می کند. این حوزه با سرعت سرسام آوری در حال پیشرفت است و سالانه هزاران مقاله در این زمینه منتشر می شود. پیشرفت کنونی و کاربردهایی که SWNT ها در آن ها به کار برده اند بسیار چشمگیر است، زیرا وجود

^۱ Richard Smalley

^۲ Robert Curl

^۳ Harry Kroto

^۴ Sumio Iijima

^۵ single-walled carbon nanotube

فولرن ها تنها برای ۲۰ سال شناخته شده است. این کتاب فرض می کند که خواننده درک پایه ای از شیمی و فیزیک دارد. امیدوارم دانش آموزان دبیرستانی و دانشجویان مقطع کارشناسی با این کتاب آشنا شوند، انگیزه لازم را برای تحصیل علم پیدا کنند و در زمینه تحقیقات نانوتکنولوژی فعالیت کنند.



فصل اول:

مقدمه ای بر کربن و اشکال مختلف آن

مقدمه

کربن عنصری شیمیایی با نماد C و عدد اتمی ۶ است. این عنصر، که در رده عناصر غیرفلزی^۱ جای می گیرد که چهار ظرفیتی^۲ است، به این معنی که چهار الکترون در دسترس برای تشکیل پیوندهای شیمیایی کووالانسی دارد. کربن از گروه چهاردهم در جدول تناوبی و دارای سه ایزوتوپ طبیعی است. این ایزوتوپها عبارتند از کربن-۱۲ و کربن-۱۳ که ایزوتوپهای پایدار هستند و کربن-۱۴ یک ایزوتوپ پرتوزا محسوب می شود و زمان نیمه عمر واپاشی آن حدود ۵۷۳۰ سال است. از دوران باستان تا سال ۱۶۹۹ میلادی، تنها سیزده عنصر توسط بشر شناسایی شده بودند که کربن یکی از آنها بود. گونه های متفاوت دیگری از کربن نیز وجود دارند که تفاوت این گونه ها صرفاً به شکل گیری اتم های کربن نسبت به هم یا به ساختار شبکه ای آنها بر می گردد. کربن به خاطر لایه ظرفیت خود، قادر است تا شکل های گوناگونی از دگرشکلها مانند الماس و گرافیت را تولید نماید. در دهه های اخیر بسیاری از دگرشکلها و اشکال گوناگون از کربن کشف شده است از جمله این موارد اشکال کروی مانند فولرن با کمینستر و ورقه هایی مانند گرافین است. در مقیاس بزرگتر می توان به سازه های کربنی همچون نانولوله ها نانوجوانه ها و نانورویانها اشاره داشت. شکل های غیر معمول دیگر از کربن در درجه حرارت بسیار بالا یا فشارهای شدید وجود دارند. در زمان حاضر حدود ۵۰۰ دگرشکل از کربن شناخته شده با توجه به SACADA پایگاه داده شناخته شده است.

۱-۱ گونه های مختلف کربن در طبیعت

انواع گوناگون کربن که تاکنون مشاهده شده اند به صورت زیر می باشد.

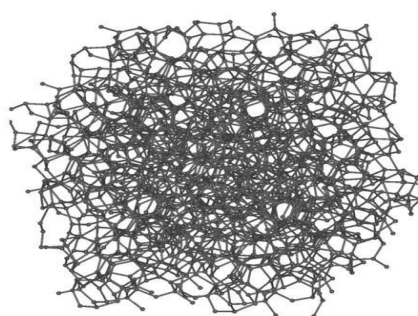
۱-۱-۱ کربن بی شکل^۳

^۱ Nonmetallic

^۲ Tetravalent

^۳ Amorphous

از سوختن ناقص بسیاری از هیدروکربن ها و یا مواد آلی (مثل چوب یا پلاستیک) ماده سیاه رنگی به جا می ماند که کربن بی شکل یا آمورف نام دارد. این ماده که پس مانده ی سوخت ناقص مواد آلی است از دیر باز جهت تولید انرژی بشر قرار می گرفت. ذغال چوب و ذغال سنگ از انواع مواد کربن بی شکل هستند که انسان با سوزاندن آن ها انرژی زیادی را بدست می آورد.



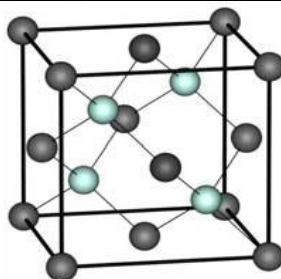
شکل ۱-۱ ساختار کربن بی شکل

۲-۱-۱ الماس^۱

الماس گونه ی شناخته شده دیگری از کربن می باشد که دارای ساختار بلوری منظمی است. در این ساختار هر اتم کربن با چهار اتم کربن دیگر پیوند برقرار می کند. شبکه الماس، ترکیب دو شبکه fcc^۲ است که یکی در موقعیت (۰ ۰ ۰) و دیگری در (۱/۴ ۱/۴ ۱/۴) با ثابت شبکه $a = ۰/۳۵۶ \text{ nm}$ قرار دارند. طول پیوند کربن - کربن در این ساختار برابر $۰/۱۵ \text{ nm}$ گزارش شده است. این ماده به دلیل سختی بالا تمام عناصر موجود در طبیعت را می خراشد و از این رو در تراش فلزات سخت، سرامیک ها و شیشه از آن استفاده می کنند. این ماده به دلیل درخشش بالایی که دارد از دیرباز در جواهر آلات نیز مورد استفاده قرار می گرفته است. پیوندهای هیبرید شده sp^3 خاصیت عایق الکتریکی و شفافیت نوری آن را تشکیل می دهند.

^۱ Diamond

^۲ face-centred cubic

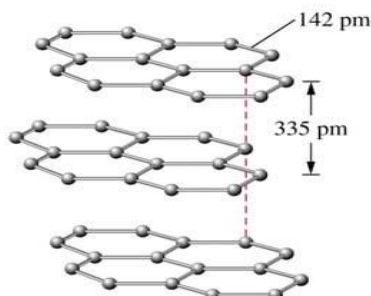


شکل ۱-۲ الماس خالص ترین شکل کربن است

۳-۱-۱ گرافیت^۱

گرافیت یک آلوتروپ دیگری از کربن است که از لایه‌هایی از اتم‌های کربن تشکیل شده‌است. این کانی از دگرگونی زغال سنگ پدید می‌آید این لایه‌ها می‌توانند به راحتی روی یکدیگر بلغزند و این امر آن را به یک ماده معدنی بسیار نرم تبدیل کرده‌است. گرافیت رنگی خاکستری تیره و درخشی فلزی دارد. گرافیت الکتریسته را به راحتی هدایت می‌کند زیرا بین لایه‌های اتم‌های کربن الکترون وجود دارد. در فشارها و دماهای خیلی بالا، گرافیت به الماس تبدیل می‌شود. این فرآیند در واقع نحوه تولید الماس مصنوعی است. از گرافیت به دلیل داشتن خاصیت رسانایی الکتریکی بالا، در ساخت الکترودهای کوره‌های قوس الکتریکی، باتری‌ها و صفحات خورشیدی استفاده می‌شود. هندسه متفاوت پیوندهای شیمیایی گرافیت را نرم، لغزنده، کدر و رسانای الکتریکی می‌کند. برخلاف الماس، هر اتم کربن در یک ورقه گرافیت تنها به سه اتم دیگر متصل است؛ الکترون‌ها می‌توانند آزادانه از یک اوربیتال p غیرهیبریدی به یک اوربیتال دیگر حرکت کنند و یک شبکه پیوند پراکنده بی پایان را تشکیل دهند که باعث رسانایی الکتریکی می‌شود. یک تک لایه از گرافیت گرافن نامیده می‌شود که دارای خواص فوق‌العاده الکتریکی، حرارتی و فیزیکی می‌باشد.

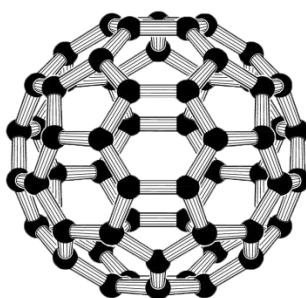
^۱ Graphit



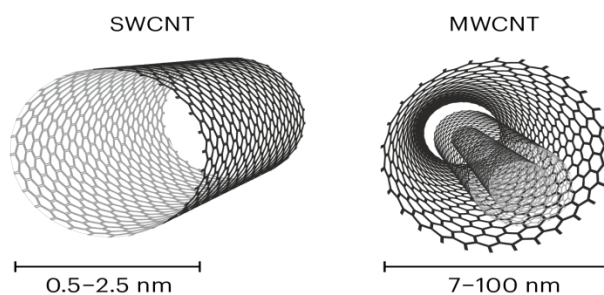
شکل ۱-۳ کریستالی شش ضلعی گرافیت

۱-۱-۴ فلورن^۱ و نانو لوله های کربنی^۲

در سال ۱۹۸۵ ریچارد اسملی ساختاری جدید از کربن را کشف کرد که فلورن نامگذاری شد. C_{60} اولین فلورنی بود که کشف شد. این ملکول همانند یک توپ فوتبال کروی است و شامل ۶۰ اتم کربن می باشد که در گوشه های شش ضلعی های منتظم و تعدادی مشخص پنج ضلعی قرار دارد. سطح یک کره را نمی توان تنها با شش ضلعی های منتظم پوشش داد بنا بر این اتم های کربن جهت قرار گیری بر روی یک سطح کروی ناچار هستند در بعضی از مکان ها تشکیل پنج ضلعی بدهند. مولکول C_{60} متشکل از ساختاری با ۲۰ شش ضلعی و ۱۲ پنج ضلعی است. هندسه C_{60} پیوند اتم های کربن هیبرید شده با کربن، خواص جدیدی را ایجاد می کند.

شکل ۱-۴ مدل فولرن C_{60} ^۱ Fullerene^۲ Carbon nanotube

بعد از گزارش کشف مولکول C_{60} دانشمندان زیادی شروع به انجام آزمایش های جدید جهت ساخت مولکول های جدید از کربن کردند. سرانجام در سال ۱۹۹۱ ایجیما^۱ موفق به کشف نانولوله های چند دیواره ی کربنی^۲ شد. دو سال بعد از گزارش کشف نانولوله های کربنی چند دیواره، ایجیما و همکارانش موفق به ساخت نانولوله های کربنی تک دیواره^۳ شدند. نانولوله های کربنی به دلیل خواص الکتریکی جالبی که دارند در قطعات الکتریکی موارد استفاده زیادی می توانند داشته باشند. این مواد به دلیل رسانش یک بعدی در مقیاس نانو می توانند جایگزین مناسبی برای فلزات و یا نیمه رسانا ها باشند.



شکل ۱-۵ نمایش شماتیک نانولوله های یک جداره و چند جداره

نانولوله ها بنا بر پیکربندی هندسی خود می توانند خواص رسانایی و یا نیمه رسانایی از خود نشان دهند و همین موضوع این مواد را از سایر مواد مشابه متمایز می کند. نانولوله ها علاوه بر سبک بودن استحکامی چند برابر فولاد نیز دارند. علاوه بر این، چون CNT ها می توانند هم فلزی و هم نیمه رسانا باشند، یک دستگاه الکترونیکی تمام نانولوله ای را می توان پیش بینی کرد.

۲-۱ سنتز نانولوله های کربنی^۴

^۱ Iijima

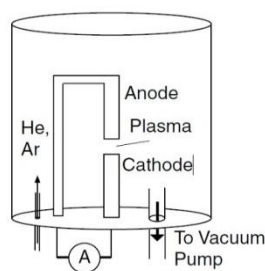
^۲ MWCNT

^۳ SWCNT

^۴ Chemical synthesis

رسوب گذاری بخار شیمیایی^۱، قوس الکتریکی^۲ و تبخیر لیزری^۳ عمومی ترین روش هایی هستند که جهت تولید نانو ساختار ها از جمله نانولوله های کربنی به کار می روند.

قوس الکتریکی اولین روش برای تولید نانولوله های کربنی می باشد برای اولین بار توسط ایجیما در سال ۱۹۹۳ برای تولید نانولوله های تک دیواره به کار رفت. در این روش از تبخیر قوس دو میله کربنی، که دو انتهای آنها به فاصله تقریبی یک میلی متر از هم قرار داده شده اند در محفظه بسته ای پر از گازهای خنثی (هلیوم، آرگون) در فشار پایین بین (۵۰ تا ۷۰۰ میلی بار) استفاده می شود که برای این کار از جریان مستقیم ۵۰ تا ۱۰۰ آمپر استفاده می شود. که اخیراً از این روش در نیتروژن مایع نیز استفاده می شود. اگر در این روش کاتد را با کاتالیست های فلزی از قبیل Ni, Co, Fe پر کنیم، نانولوله های تک دیواره به صورت رشته ای تولید خواهد شد. در این روش کاتد و آند معمولاً به صورت عمود بر یکدیگر نصب گشته و یک قوس الکتریکی بین دو الکترود برقرار می شود و محصول به صورت نانولوله های که ذرات کاتالیست آن به صورت ناخالصی در دیواره نانولوله وجود دارد، بدست می آید.



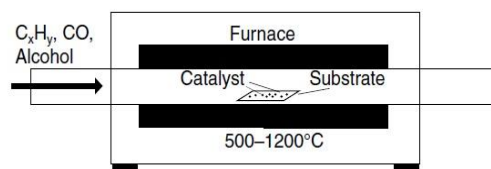
شکل ۱-۶ شمای دستگاه سنتز نانولوله به روش قوس الکتریکی

^۱ Chemical Vapor Deposition

^۲ Arc Discharge

^۳ Laser Vaporization

تکنیک CVD به طور گسترده در ساخت مدارهای مجتمع (IC)^۱ سیلیکونی، برای رشد لایه های نازک فلزی، نیمه هادی و عایق بکار می رود. یکی از کاربردهای جدید CVD استفاده از آن برای تولید نانولوله ها می باشد. این روش برای تولید نانولوله ها در مقیاس کیلو گرم مفید است. این روش با قرار دادن یک چشمه کربنی در فاز گازی و استفاده از یک منبع انرژی پلاسمایی و یا سیم پیچ مقاومت حرارتی برای انتقال انرژی به مولکولهای گاز کربن انجام می شود. این عمل منجر به رسوب دهی فیلمی از عناصری با ترکیب دلخواه بر روی یک زیر لایه می گردد. برای چشمه کربنی گازی معمولاً از متان، منواکسید کربن و استیلن استفاده می شود و همچنین فلزات واسطه مانند Fe, Ni و Co به عنوان کاتالیزور جهت رشد نانولوله ها استفاده می شود. در این روش فرایند شامل دو مرحله است: اول آماده سازی کاتالیزر و سپس رشد نانولوله می باشد. آماده سازی کاتالیزر معمولاً با ریز کردن یک فلز واسطه و پخش آن روی ماده پایه و سپس استفاده از حکاکی شیمیایی و یا سرد کردن تدریجی به منظور ایجاد هسته سازی ذرات کاتالیزر انجام می شود. سرد شدن تدریجی منجر به تشکیل خوشه روی ماده پایه می شود و از این خوشه ها رشد نانولوله ها شکل می گیرد. که از آمونیاک به عنوان ماده شیمیایی حکاک استفاده می شود.

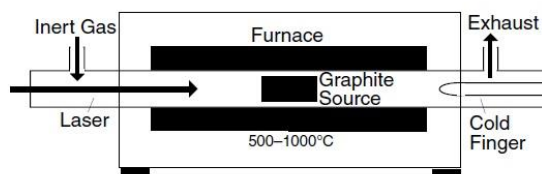


شکل ۱-۷ شماتیک از فرآیند CVD

روش تبخیر لیزری جهت تولید نانولوله ی کربنی در سال ۱۹۹۵ به وسیله ی گروه ریچارد اسملی مورد استفاده قرار گرفت. در این روش جهت بخار کردن گرافیت که در کوره حرارتی قرار گرفته از لیزر استفاده

^۱ Integrated circuit

می کنند. بخار داغ گرافیت را به سرعت سرد می کند از چگالش بخار گرافیت بر روی سرد کننده نانولوله هایی با خلوص بالا تولید می شود.



شکل ۸-۱ شماتیک تبخیر لیزر

نانولوله های کربنی موارد استفاده زیادی دارند. از آن ها می توان به عنوان ذخیره کننده هیدروژن استفاده کرد. همچنین در ادوات الکتریکی می توان از آن ها جهت سیم های ارتباطی در ابعاد نانو استفاده کرد. اما یکی از کاربردهای دیگر نانولوله ها که ما در این پروژه به بررسی آن پرداختیم استفاده آن ها در ترانزیستور های اثر میدانی است.

۳-۱ پیشرفت تحقیقات نانولوله کربنی تک دیواره^۱

SWNT^۲ ها دسته متمایزی از نانولوله ها هستند که ویژگی های منحصر به فردی از خود نشان می دهند. از زمان کشف نانولوله های کربنی (CNTs)، ایده های متعددی برای کاربرد در طیف گسترده ای از رشته های علمی از جمله الکترونیک (سیم، ترانزیستور، سوئیچ، اتصالات داخلی، ذخیره سازی حافظه) مطرح شده است. در مدارها تراشه های کامپیوتری، ترانزیستورها و سیم ها توسط لیتوگرافی تولید می شوند. قانون مور افزایش نمایی قدرت کامپیوتر را در طول چندین دهه پیش بینی کرده است، اما دستیابی به این میزان پیشرفت در چند سال آینده به دلیل محدودیت در مواد درگیر دشوارتر خواهد شد. مدارهای کوچک تر و ارزان تر ممکن است با استفاده از

^۱ Progress of single-walled carbon nanotube research

^۲ Single Wall Carbon Nanotubes

نانوساختارهای مولکولی امکان پذیر باشند CNT ها به عنوان نانوساختارهای مولکولی شبه یک بعدی (D۱) متقاضیان کاملی برای ترانزیستورها یا سیم های نانومقیاس هستند.

از نظر انتقال، ماهیت یک بعدی CNT ها فضا را به شدت کاهش می دهد. فضا برای پراکندگی، به CNT ها اجازه می دهد تا حداکثر تحرک توده ای ممکن از این ماده را داشته باشد. احتمال پراکندگی کم و تحرک بالا، جریان روشن بالا بیش از $1 \mu\text{m}/\text{mA}$ در ترانزیستورهای CNT نیمه رسانا هستند. علاوه بر این، ثبات شیمیایی و ساختار CNT نشان می دهد که تحرک حامل در میدان های بالا گیت ممکن است تحت تاثیر پردازش و پراکندگی زیری، مانند کانال نیمه رسانای متعارف، قرار نگیرد. به طور مشابه، در CNT های فلزی، پراکندگی کم، همراه با پیوند شیمیایی قوی و رسانایی گرمایی فوق العاده، به آن ها اجازه می دهد تا چگالی جریان بسیار بالا را تحمل کنند.

علاوه بر این، چون CNT ها می توانند هم فلزی و هم نیمه رسانا باشند، یک دستگاه الکترونیکی تمام نانولوله ای را می توان پیش بینی کرد. در این مورد، CNT های فلزی می توانند به عنوان جریان بالا حامل اتصالات محلی عمل کنند، در حالی که CNT های نیمه رسانا دستگاه های فعال را تشکیل می دهند. در سال ۱۹۹۷، محققان دانشگاه فناوری

دلفت^۱ در هلند^۲ و دانشگاه رایس در تگزاس اولین کسانی بودند که SWNTS را به عنوان سیم های کوانتومی واقعی نشان دادند. اندازه گیری آن ها از ویژگی های انتقال الکتریکی SWNT ها این پیش بینی نظری را تایید کرد که یک SWNT به صورت الکتریکی به عنوان یک مولکول رفتار می کند. در سال ۱۹۹۸، دو گروه ۱۴ و ۱۵ از دانشگاه فن آوری دلفت اولین ترانزیستور مولکولی را با استفاده از نانولوله کربنی نشان دادند. آن ها با یک نانولوله نیمه رسانا روی یک سطح

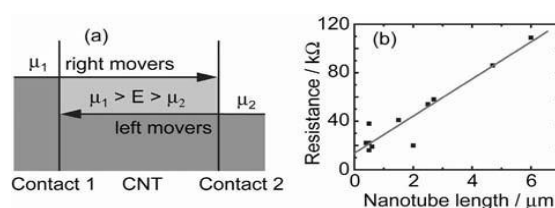
^۱ Delft University of Technology

^۲ Rice University

SiO_2 تماس گرفتند و رسانایی آن را با استفاده از یک گیت پستی تعدیل کردند. این دستگاه امکان کار کردن ترانزیستورها در مقیاس نانو را در دمای اتاق نشان داد و زمینه هیجان انگیز و رو به رشد نانولوله ها را باز کرد. بعدها در سال ۲۰۰۱، SWNT ها با مدارهای منطقی در IBM ادغام شدند در همان سال، جاوی و همکارانش اولین ترانزیستور بالستیک را با استفاده از نانولوله کربنی به نمایش گذاشتند. آن ها از پالادیوم، یک فلز با عملکرد کاری بالا، برای تماس با لوله، حذف مانع شوتکی تماس ها و به دست آوردن شفافیت کامل برای تزریق بار استفاده کردند. همچنین در سال ۲۰۰۱، Kociak و همکارانش نشان دادند که رشته های SWNT ها ذاتا ابررسانایی زیر K ۵۵ هستند، که اولین مشاهده ابررسانایی در سیستمی با چنین تعداد کمی کانال رسانایی بود.

۴-۱ هدایت بالستیک^۱

مقاومت رساناهای کوتاه یک بعدی مستقل از ترکیب آن ها یا طول هادی تنها تابعی از تعداد کانال های رسانش موجود و انتقال در تماس ها است. برای یک کانال رسانش با ۱۰۰ درصد تماس های شفاف، مقاومت کوانتومی یک ثابت جهانی است که توسط $RQ = h/2e^2 \approx 25.8 \text{ k}\Omega$ این رفتار اغلب رسانش بالستیک نامیده می شود، زیرا الکترون ها بین دو پایانه بدون هیچ گونه رویداد پراکندگی حرکت می کنند.



شکل ۱-۹ اشباع فعلی در یک نانولوله کربنی فلزی، جریان مشخصه های ولتاژ نشان دهنده اشباع جریان در بایاس بالا است. شروع: مقاومت $R = V/I$ در مقابل ولتاژ بایاس

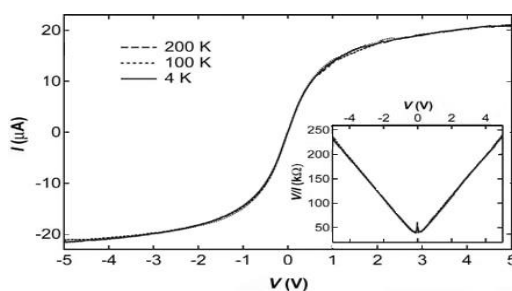
^۱ Ballistic transport

* (توجه داشته باشید که مقاومت یک رسانای بالستیک صفر نیست، حتی اگر هیچ پراکندگی در کانال هدایت وجود نداشته باشد و هیچ پس رفتی برای الکترون هایی که از رسانا خارج می شوند وجود نداشته باشد.)

مقاومت کوانتومی (یا مقاومت در برابر تماس گاهی اوقات نامیده می شود) از عدم تطابق بین تعداد زیادی از مدهای موجود در تماس های ماکروسکوپی که جریان در آن ها توزیع می شود، و تعداد کمی از مدهای الکترونیکی (زیربندهای یک بعدی) موجود در رسانای یک بعدی سرچشمه می گیرد.

۵- ظرفیت حمل جریان، جریان اشباع^۱

نانولوله کربنی می تواند تا ۲۵ میکرو جریان را حمل کند. این مربوط به چگالی جریان فوق العاده بالای 10^9 A/cm^2 است. در شکل ۱-۱۰، یک مشخصه $I - V$ معمول برای یک نانولوله کربنی فلزی نشان داده شده است. جریان به صورت خطی در بایاس پایین (رژیم بالستیک) افزایش می یابد، اما سپس غلت می خورد و در بایاس بالا اشباع می شود. در آغاز شکل، داده ها به روش دیگری رسم می شوند، یعنی مقاومت $R = V / I$ به عنوان تابعی از ولتاژ بایاس. بالاتر از چند ۱۰۰ میلی ولت مقاومت به صورت خطی با ولتاژ افزایش می یابد.



شکل ۱۰-۱ اشباع فعلی در یک نانولوله کربنی فلزی (مشخصه جریان- ولتاژ نشان دهنده اشباع جریان در بایاس بالا است)

^۱ Current-carrying capacity, current saturation

مدلی که شامل تحریک فونون است می تواند افزایش خطی مقاومت را توضیح دهد و مقدار جریان اشباع را در حدود $25\mu A$ به درستی پیش بینی کند. دو فرض مهم در این مدل وجود دارد: یک آستانه انرژی $ev = h\Omega$ وجود دارد که در زیر آن تحریک فونون ها غیرممکن است و دومین فرض انتقال بالستیک است. (V ولتاژ بایاس) و $h\Omega$ انرژی فونون است. البته فونون های آکوستیکی با انرژی بسیار کم وجود دارند، اما جفت شدن الکترون ها به این فونون ها در نانولوله های کربنی ضعیف است. فرض دوم بیان می کند که وقتی الکترون انرژی اضافی کافی برای تحریک فونون نوری به دست آورد، فرآیند شتاب در میدان الکتریکی اعمال شده و تحریک فونون نوری تکرار می شود تا زمانی که الکترون به تماس مخالف برسد.

۶-۱ نانولوله ی کربنی نیمه رسانا^۱

نانولوله های کربنی نیمه رسانا شکاف بانندی دارند که به طور معکوس با قطر لوله، $E_g = 0.84 eV/d [nm]$ مقیاس می شود. لذا از طریق قطر نانولوله های نیمه رسانا به موقعیت دقیق سطح فرمی دست پیدا می کنیم همچنین با دوپینگ شیمیایی یا الکترواستاتیک می تواند تغییر قابل توجه در رسانایی انجام داد. به عنوان مثال، در عمق باند ظرفیت، آن ها تقریباً به خوبی لوله های فلزی عمل می کنند، زیرا آن ها همچنین چهار کانال در دسترس دارند. دو باند ظرفیت شبه منحنی، که هر کدام می توانند اسپین را به بالا یا پایین حمل کنند. رسانش بایاس پایین در مقیاس های طول ۱۰۰ نانومتر بالستیک است، و جریان های بیشینه قابل دستیابی با تماس های بهینه $20\mu A$ هستند، مشابه آنچه در لوله های فلزی مشاهده می شود. وابستگی شدید رسانایی به پتانسیل الکتروشیمیایی در نانولوله کربنی می تواند برای ساخت دستگاهی که مانند یک سوئیچ عمل می کند، مورد استفاده قرار گیرد. هنگامی که پتانسیل روی یک گیت جفت شده خازنی اعمال می شود سطح فرمی را به سمت نوار ظرفیت یا رسانش حرکت می دهد و هنگامی که سطح فرمی در شکاف باند قرار دارد،

^۱ Semiconducting carbon nanotubes

به عنوان عایق عمل می کند. این نوع دستگاه در صنعت نیمه هادی به خوبی شناخته شده است که ترانزیستور اثر میدان (FET) نامیده می شود.

ترانزیستورهای اثر میدان نیمه هادی اکسید فلزی سیلیکون (MOSFET) از اهمیت تکنولوژیکی زیادی برخوردار است. اساساً تمام تراشه های کامپیوتری مدرن مبتنی بر منطق MOS هستند.

فصل دوم:

بررسی ساختار هندسی و الکتریکی گرافیت و نانولوله های کربنی

مقدمه

جهت بررسی نظری نانولوله های کربنی می توان آن ها را به صورت صفحات گرافیتی تصور کرد که به دور یک استوانه پیچیده شده باشند. در واقع جهت بررسی خواص الکتريکی نانولوله ها ابتدا به بررسی خواص الکتريکی گرافیت می پردازیم سپس فرض می کنیم این صفحات گرافیتی به دور یک استوانه پیچیده شده اند. با این فرض مجبور به اعمال شرایط مرزی^۱ مناسبی می شویم. چون صفحات گرافیت از اتم های کربن تشکیل شده اند و اربیتال های π در این صفحات در امر رسانش دخیل هستند جهت درک روشنی از امر رسانش در صفحه ی گرافیت و در پی آن نانولوله های کربنی بهتر است ابتدا به بررسی ساختار الکترونی کربن و پیوندهایی که برقرار می کند پردازیم.

۱-۲ ساختار الکترونی کربن

در گونه های مختلف کربن بجز الماس الکترون های π هستند که در امر رسانش دخالت می کنند. اوربیتال مولکولی π زمانی تشکیل می شود که دو اوربیتال اتمی p به صورت موازی به همدیگر نزدیک شوند. در این حالت هم پوشانی این اوربیتال ها اوربیتال مولکولی π را می دهد جهت بررسی روش تنگ بست^۲ در مورد صفحه ی گرافیتی و بدست آوردن نوارهای انرژی ابتدا باید درک روشنی از انرژی های پیوندی و ماهیت پیوند ها داشت. از این رو در این بخش ابتدا به بررسی اربیتال های کربن و سپس به بررسی انواع هیبریدهایی که کربن در پیوند با اتم های کربن دیگر به وجود می آورد می پردازیم.

یکی از ستون های اصلی مکانیک کوانتومی، معادله شرودینگر است. این معادله توصیف کننده نحوه تغییر حالت کوانتومی یک سیستم با زمان است. در این معادله از اوپراتوری تحت عنوان هامیلتونی استفاده شده است. در کوانتوم مکانیک، هامیلتونی، معادل با اوپراتوری است که با استفاده از آن

^۱ Boundry condition

(روش تنگ بست روش محاسباتی نیمه تجربی هست که به کمک آن میتوان ساختار باند انرژی Tight binding^۲ را محاسبه کرد و اثر کرنش، میدان الکتريکی، تابش نوری در ساختار مواد را مشاهده و لحاظ کرد)

مجموع انرژی های پتانسیل و جنبشی اندازه گیری می شود. معمولاً هامیلتونی را با نمادهای $\hat{H}$ نمایش می دهند. هامیلتونی برگرفته از اسم «ویلیام هامیلتون» است که علم مکانیک را متحول کرد.

۲-۲-۱۲ اربیتال ۲p کربن

اتم کربن شامل ۶ الکترون است. به منظور بدست آوردن تابع موج در اتم کربن معادله ی مستقل از زمان شرودینگر را باید برای اتم کربن حل نمود. جملاتی که در هامیلتونی مسئله ظاهر می شوند شامل قسمت مربوط به انرژی جنبشی، اندرکنش کولنی الکترون با هسته و اندرکنش کولنی الکترون ها با یکدیگر است. این هامیلتونی را در نهایت می توان به شکل زیر نوشت.

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \sum_{i=1}^5 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}_i|} \quad (2-1)$$

جمله اول سهم مربوط به انرژی جنبشی است. جمله دوم مربوط به اندرکنش کولنی الکترون با هسته است و جمله سوم مربوط به اثر کولنی الکترون با ۵ الکترون دیگر است. $|\vec{r} - \vec{r}_i|$ اندازه فاصله بین الکترون اربیتال ۲p و الکترون iام است. معادله ی ویژه مقداری مستقل از زمان به صورت زیر می باشد.

$$\left\{ \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \sum_{i=1}^5 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}_i|} \right\} \Psi_{2p}(\vec{r}) = E_{2p} \Psi_{2p}(\vec{r}) \quad (2-2)$$

چون فاصله بین الکترون ۲p و سایر الکترون ها معلوم نیست این معادله به صورت معمول قابل حل نیست. به منظور حل این معادله بعضی از تقریب ها را باید منظور کرد.

۲-۲-۱ روش وردشی^۱

اساس این روش بر این مبنا استوار است که معادله شرودینگر (۲-۱) تنها به ازای ویژه توابع خود دارای انرژی کمینه است. در این روش ابتدا پتانسیلی را به عنوان سهم مربوط به اندرکنش کولنی الکترون - الکترون پیشنهاد می کنند و یک حدس برای تابع موج در نظر می گیرند. سپس انرژی

^۱ Variational Method

مربوط به تابع موج را کمینه می کنند. با کمینه کردن این انرژی ضرایب مجهولی که در تابع موج قرار دارد بدست می آید. تابع پیشنهادی به تابع وردشی معروف است. این تابع را می توان به صورت توابع اسلاتر^۱ پیشنهاد داد. قسمت زاویه ای توابع اسلاتر همان هماهنگ های کروی هستند که در مورد اتم هیدروژن گونه بدست آمد. اما قسمت شعاعی این توابع به صورت زیر داده می شود.

$$R_{n\ell}(\rho) = \left\{ \frac{(\xi_{n\ell})^{n+1}}{(n)!} \right\}^{\frac{1}{n}} \rho^{n-1} e^{(-\xi_{n\ell}\rho)} \quad (2-3)$$

n عدد کوانتومی اصلی، ℓ اندازه حرکت زاویه ای و $\rho = \frac{r}{a}$ می باشد. a شعاع بوهر برای اتم هیدروژن می باشد. وردش مورد نظر که باید بدست آید $\xi_{n\ell}$ می باشد. پتانسیلی را که در هامیلتونی (۲-۲) می توان پیشنهاد کرد پتانسیل هارتری است. در این پتانسیل فرض می شود که الکترون یک میدان مرکزی حاصل از بار هسته و چگالی باری که برابر مجموع مجذور توابع موج الکترون های دیگر است حرکت می کند.

$$V_h(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3\vec{r}' \quad (2-4)$$

$$\rho(\vec{r}) = e \sum_i \psi_i(\vec{r}) \psi_i^*(\vec{r}) \quad (2-5)$$

با قرار دادن این پتانسیل در معادله ی شرودینگری که انرژی کل اتم را در بر بگیرد و کمینه کردن چشمداشتی انرژی نسبت به تابع موج کلی که به صورت دترمینان اسلاتر توابع اسلاتر در نظر گرفته می شود، می توان توابع موج وردشی را به دست آورد. البته می توان تابعی را که حاصل ضرب ۶ تابع موج اربیتال اسلاتر باشد، با علم بر این موضوع که هیچ کدام اعداد کوانتومی اصلی را در بر نمی گیرند در نظر گرفت و محاسبات را سبکتر کرد.

$$\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_6) = \prod_{k=1}^6 u_k(\vec{r}_k) \quad (2-6)$$

^۱ Slater

در این رابطه u_k توابع موج اسلاتری هستند که قسمت شعاعی آنها با رابطه ی (۲-۳) بیان می شود و قسمت زاویه ای آن همان هماهنگ های کروی هستند. تابع موج (۲-۶) هنگامی بهینه^۱ می شود که تک تک توابع موج اسلاتر u_k دارای انرژی کمینه شوند.

$$E_k = \langle u_k(\vec{r}) | -\frac{\nabla_k^2}{2} - \frac{e^2}{r} | u_k(\vec{r}) \rangle + (۲-۷)$$

$$\langle u_k(\vec{r}) | \sum_{i \neq k} \int \frac{u_i(\vec{r}') u_i^*(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' | u_i(\vec{r}) \rangle$$

$$\sum_{j=1}^6 \frac{\partial E_k}{\partial \xi_j} = 0, k = 1 \dots 6 \quad (۲-۸)$$

در رابطه ی (۲-۸) j وردش تابع موج وردشی است که باید بدست آید. رابطه ی (۲-۸) تشکیل یک دستگاه شش معادله شش مجهول می کند که با حل آن وردش های متفاوت j به دست می آیند. مقادیر بدست آمده در منابع برای اربیتال $2p$ اتم کربن عدد ۱/۵۶۷۹ را برای وردش پیشنهاد می کند.

۲-۲-۲ هیبریداسون^۲ اربیتال های کربن

اربیتال $2p$ اتم کربن در جامدات کربنی بر اساس تابع شعاعی اسلاتر که در بخش قبل بیان کردیم به صورت زیر نوشته می شود.

$$u_{2p}(\vec{r}) = R_{2p}(r) Y_{1,m}(\theta, \varphi) \quad (۲-۹)$$

مؤلفه های اربیتال $2p$ را در راستای محورهای مختصات دکارتی به صورت زیر می توان نوشت.

$$u_{2p_x}(\vec{r}) = R_{2p}(r) \sin(\theta) \cos(\varphi) \quad (۲-۱۰-الف)$$

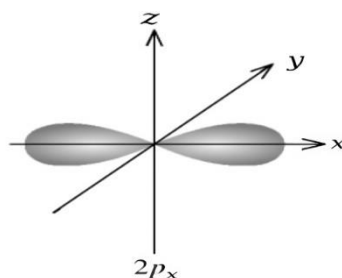
$$u_{2p_y}(\vec{r}) = R_{2p}(r) \sin(\theta) \sin(\varphi) \quad (۲-۱۰-ب)$$

$$u_{2p_z}(\vec{r}) = R_{2p}(r) \cos(\theta) \quad (۲-۱۰-ج)$$

^۱ optimum

^۲ Hybridization

اندازه این اربیتال ها در یکسری از نقاط ویژه در فضا مقدار قابل ملاحظه ای را اتخاذ می کند. اگر این نقاط را در فضا رسم کنیم مشاهده می کنیم که این اربیتال ها به صورت دمبل هایی هستند که در امتداد محورهای مختصات قرار گرفته اند. همان گونه که در شکل (۱-۲) نشان داده ایم اربیتال $2p_x$ دارای یک بازو با دامنه ی منفی و بازوی دیگر با دامنه ی مثبت است. این موضوع را از رابطه ی (۱۰-۲ الف) به سادگی می توان فهمید. تجزیه شدن اربیتال $2p$ در مولکول ها و جامدات کربنی منشأ پیدایش هیبرید های گوناگون این عنصر می شود.



شکل ۱-۲ اربیتال $2p_x$ دارای شکل دمبلی با دو بازو است

چون فاصله تراز بالاتر $2p$ از تراز پایین تر $2s$ چندان زیاد نیست بنابراین توابع موج این دو اربیتال می توانند با هم به صورت خطی ترکیب شوند. از نحوه ی ترکیب شدن اربیتال $2s$ با سه مؤلفه ی اربیتال $2p$ هیبریدهای گوناگونی به وجود می آیند. به طور مثال اگر یک مؤلفه ی اربیتال $2p$ با اربیتال $2s$ ترکیب شود تابع موج جدید را هیبرید sp می گویند. استیلن با فرمول شیمیایی C_2H_2 دارای هیبرید sp است. به همین ترتیب اگر دو مؤلفه از اربیتال $2p$ با اربیتال $2s$ ترکیب شود. هیبرید sp^2 و اگر سه مؤلفه ی اربیتال $2p$ با اربیتال $2s$ ترکیب شود هیبرید sp^3 خواهیم داشت. تابع موج هیبرید sp را می توان به صورت زیر بدست آورد.

هر مؤلفه از اربیتال $2p$ ، دارای دو بازو است که یک بازوی آن دارای دامنه ی منفی و بازوی دیگر دارای دامنه ی مثبت است. در مورد هیبرید sp چون اربیتال $2s$ دارای تقارن کروی است دو نوع متفاوت از ترکیب شدن وجود دارد. در حالت اول دامنه ی بازوی سمت راست مؤلفه اربیتال $2p$

مثبت و در حالت دوم این بازو دارای دامنه ی منفی است (شکل ۲-۲). در این دو حالت، مؤلفه ی اربیتال $2p$ با دامنه ی مثبت را با این فرض که این مؤلفه ها در راستای محور x باشند به صورت زیر می توان نوشت.

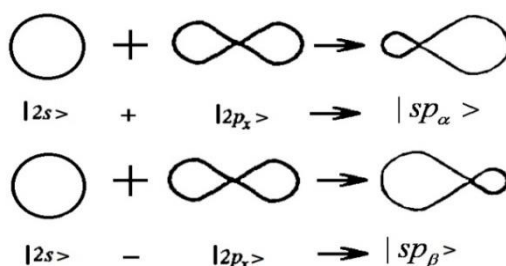
$$2p_{x\alpha} = (1, 0, 0) \quad (11-2-الف)$$

$$2p_{x\beta} = (-1, 0, 0) \quad (11-2-ب)$$

را با توجه به روابط (۱۱-۲ الف) و (۱۱-۲ ب) و با در نظر گرفتن شرط بهنجارش می توان به صورت زیر نوشت.

$$|sp_{\alpha}\rangle = C_1|2s\rangle + \sqrt{1-C_1^2}|2p_x\rangle \quad (12-2-الف)$$

$$|sp_{\beta}\rangle = C_2|2s\rangle - \sqrt{1-C_2^2}|2p_x\rangle \quad (12-2-ب)$$



شکل ۲-۲. دو نوع مختلف ترکیب شدن اربیتال با اربیتال

از آن جایی که اربیتال $2s$ دارای تقارن کروی می باشد و اندازه ی دامنه بر روی هر سطح کروی روی آن مثبت و عددی ثابت است انتظار داریم مجموع احتمالات در راستای اربیتال $2s$ برابر واحد شود.

$$C_1^2 + C_2^2 = 1 \quad (13-2)$$

شرط تعامد باعث آن می شود که تمامی ضرایب برابر مقدار $\frac{\sqrt{2}}{2}$ شود. اسیتیلن با فرمول شیمیایی C_2H_2 دارای این هیبریداسیون است. هیبرید sp_{α} از یک اتم کربن با هیبرید sp_{β} از اتم کربن

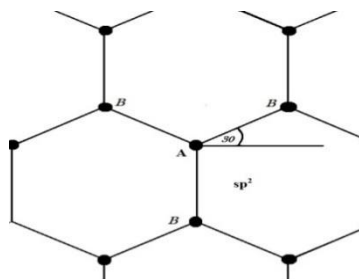
دیگر در راستای یک خط مستقیم ایجاد یک پیوند قوی به نام σ می کند. دو مؤلفه ی اربیتال $2p$ از هر اتم بر این خط و بر هم دیگر عمود هستند و با مؤلفه های متناظر خود از اتم دیگر ایجاد یک پیوند ضعیف به نام پیوند π می کنند.

در مورد هیبرید sp^2 که در صفحه ی گرافیت و مولکول بنزن وجود دارد نیز به همین روش عمل می کنیم. از ترکیب دو مؤلفه ی گوناگون اربیتال $2p$ با یکدیگر می توان توابع موج جدیدی را بدست آورد که در راستای خاصی از فضا دارای دامنه ی مثبت و در راستای دیگر دارای دامنه ی منفی باشد. در مورد هیبرید sp^2 مطابق شکل (۳-۲) آنچه انتظار داریم آن است که پیوند های σ در راستای خطوطی واقع بر یک صفحه باشند که با هم دیگر زاویه 120° درجه بسازند. بنابراین می توان سه ترکیب متفاوت از مؤلفه های اربیتال $2p$ نوشت که در راستای این خطوط دارای دامنه ی مثبت باشند. همان گونه که در شکل (۳-۲) مشاهده می کنید این سه راستا برای اتم A به صورت $(0, -1, 0)$ ، $(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ و $(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ می باشند بنابراین ۳ هیبرید متفاوت برای اتم A به شکل زیر خواهیم داشت.

$$|sp^2_\alpha\rangle = C_1|2s\rangle - \sqrt{1-C_1^2}|2p_y\rangle \quad (الف-۲-۱۴)$$

$$|sp^2_\beta\rangle = C_2|2s\rangle + \sqrt{1-C_2^2}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}|2p_x\rangle + \frac{1}{2}|2p_y\rangle\right) \quad (ب-۲-۱۴)$$

$$|sp^2_\gamma\rangle = C_3|2s\rangle + \sqrt{1-C_3^2}\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}|2p_x\rangle + \frac{1}{2}|2p_y\rangle\right) \quad (ج-۲-۱۴)$$



شکل ۳-۲. ساختاری دوبعدی که نشان دهنده هیبرید sp^2 است.

ضرایب را از شرط تعامد و توجیهی که منجر به رابطه ی (۲-۱۳) شد می توان بدست آورد .

$$C_1 = C_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad C_3 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \quad (2-15)$$

در مورد اتم B نیز به همین صورت باید عمل نمود. در این حالت تابع موجی که باید نوشت همانند آنچه در دسته روابط (۲۳-۱۴) آوردیم است. با این تفاوت که در (۲-۱۴ الف) ضریب $|2p_y\rangle$ را باید مثبت گذاشت و در بقیه ی روابط این ضریب را باید منفی کرد.

۳-۲ ساختار هندسی گرافیت و نانولوله ی کربنی

جهت بررسی ساختار نواری صفحه ی گرافیت از روش تنگ بست و نظریه ی بلاخ^۱ استفاده می کنیم. چون در این محاسبات احتیاج به تقارن ها و همسایه های نزدیک هر اتم داریم بنا بر این قبل از پرداختن به محاسبه ی ساختار نواری گرافیت بهتر است ابتدا با ساختار هندسی گرافیت و نانولوله ها آشنا شویم.

۳-۱-۲ ساختار هندسی گرافیت

گرافیت دارای یک ساختار دو بعدی است که در آن اتم های کربن در گوشه های شش ضلعی های منتظمی قرار گرفته اند. فاصله پیوندی کربن - کربن برابر 0.142 nm می باشد و زاویه پیوندی برابر 120° است. هر اتم کربن در صفحه ی گرافیت با سه اتم مجاور خود پیوند های قوی σ بر قرار می کند اربیتال π هر اتم کربن بر این صفحه عمود است. در شکل (۲-۴) ساختار هندسی صفحه ی گرافیت نشان داده شده است. همان گونه که مشاهده می کنید گرافیت یک ساختار شبکه ای براوه نیست. در یک شبکه ی براوه دو بعدی می توان از هر اتم در شبکه به وسیله ی بردار انتقالی که بر اساس دو بردار پایه شبکه تعریف می شود به هر اتم دیگری در شبکه دست یافت. ولی در مورد گرافیت هر چند تمام اتم ها کربن هستند اما یک سری از اتم ها دارای بازوهای پیوندی متفاوت با سری دیگر هستند. در شکل (۲-۴) این تفاوت را به صورت واضحی نشان داده ایم. ما به سری

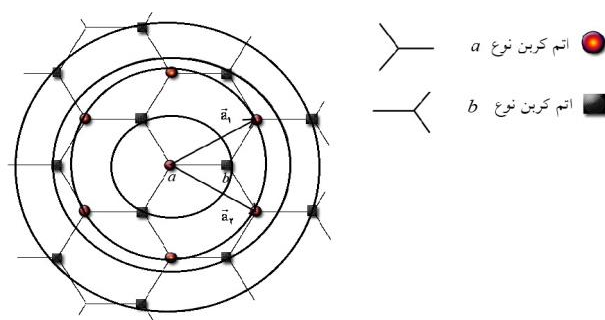
^۱ Bloch

اول اتم ها برچسب 'a' و به سری دوم برچسب 'b' را می زنیم. حال می توان با تعریف بردارهای پایه از هر اتم 'a' به اتم دیگر 'a' به وسیله ی بردار انتقال $\vec{R}$ رفت. به عبارت دیگر اتم های نوع 'a' و یا اتم های نوع 'b' با هم دیگر در یک صفحه ی گرافیت تولید شبکه ی براوه ای با ثابت شبکه $0.246nm$ می کنند. بردارهای پایه همان طور که در شکل (۲-۴) نشان داده شده اند به صورت زیر تعریف می شوند.

$$\vec{a}_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right) \quad (۱۶-۲-الف)$$

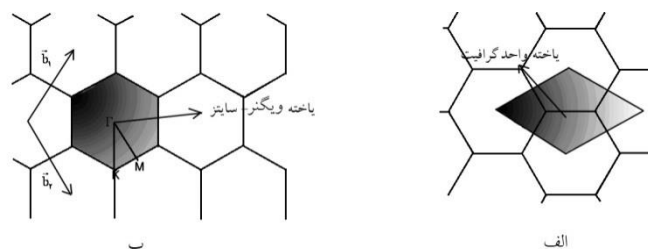
$$\vec{a}_2 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) \quad (۱۶-۲-ب)$$

در این روابط a ثابت شبکه^۱ می باشد. فضای وارون صفحه ی گرافیت به وسیله ی بردارهای پایه ای که نسبت به بردارهای پایه ی شبکه ی مستقیم آن تعریف شده مشخص می شود.



شکل ۲-۴. در این شکل دو بردار پایه ی صفحه ی گرافیت و دو نوع کربن 'a' و 'b' نشان داده شده است. چهار همسایه اول برای اتم 'a' نیز نشان داده شده است.

^۱ Lattice constant



شکل ۲-۵. (الف) یاخته واحد شبکه مستقیم گرافیت. (ب) یاخته ویگنر - سائیز شبکه وارون گرافیت.

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (۱۷-۲-الف)$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (۱۷-۲-ب)$$

در این روابط $\vec{a}_1$ و $\vec{a}_2$ همان بردارهایی هستند که در دسته رابطه های (۲-۱۶) آوردیم و $\vec{a}_3$ بردار پایه ای در راستای $\vec{a}_1 \times \vec{a}_2$ می باشد. در شکل (۲-۵) یاخته ی واحد شبکه مستقیم و یاخته واحد ویگنر - سائیز^۱ شبکه وارون گرافیت نشان داده شده است.

۲-۳-۲ ساختار هندسی نانولوله های کربنی

نانولوله های کربنی را همان طور که پیش تر گفتیم می توان به صورت صفحات گرافیتی دانست که به دور یک استوانه پیچیده شده باشند. اگر تنها یک صفحه ی گرافیت را به دور استوانه پیچانیم شکل حاصل یک نانولوله ی تک دیواره خواهد بود. اگر چندین صفحه ی گرافیت را به دور استوانه پیچانیم نانولوله ی چند دیواره خواهیم داشت. مشاهدات تجربی نشان داده اند که فاصله بین هر جداره از نانولوله های چند دیواره تقریباً برابر فاصله بین صفحات گرافیتی و برابر 0.34 nm است. اتم O را در شکل (۲-۶) در نظر بگیرید. از این اتم به وسیله ی بردار $\vec{C}$ که به صورت زیر تعریف می شود به اتم A می رسمیم .

$$\vec{C} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (۱۸-۲)$$

^۱ Wigner-Seitz

حال اگر محوری را عمود بر بردار $\vec{C}$ از نقطه ی A رسم کنیم و همین کار را در نقطه ی O انجام دهیم و صفحه ی گرافیت را از روی این خط ها ببریم شکل حاصل به صورت یک مستطیل با عرضی (طول) برابر $|\vec{C}|$ خواهد شد (شکل ۶-۲). اگر با این مستطیل یک استوانه درست کنیم یک نانولوله ی تک دیواره خواهیم داشت. محیط این نانولوله دقیقاً برابر بردار $\vec{C}$ است. چون نانولوله ها را می توان به وسیله ی بردار $\vec{C}$ تولید کرد از این پس به این بردار نام ویژه ای را اختصاص می دهیم و آن را با نام بردار کایرال^۱ می شناسیم. این بردار به وسیله ی دو مؤلفه ی (n, m) مشخص می شود بنابر این نانولوله ها را می توان بر اساس همین موضوع با جفت اعداد طبیعی (n, m) نام گذاری یا معرفی کرد.



شکل ۶-۲ در این شکل بردار هایی که تولید انواع نانولوله را می کنند نشان داده شده است.

سه گونه مختلف نانولوله را می توان بر اساس نحوه ی انتخاب بردار کایرال $\vec{C}_h$ تولید کرد. اگر در بردار کایرال مقدار $n = m$ باشد نانولوله ی حاصله را آرمیچر^۲ می نامند و اگر $m = 0$ باشد نانولوله ی حاصله را زیگزآگ^۳ می نامند. در بقیه ی حالت ها نانولوله را کایرال می نامند. در شکل (۶-۲) بردارهای زیگزآگ و آرمیچر نشان داده شده اند. اندازه ی بردار کایرال و قطر نانولوله از روابط زیر بدست می آیند.

^۱ Chiral Vector

^۲ Armchair

^۳ Zigzag

$$|\vec{C}_h| = a(n^2 + m^2 + nm)^{\frac{1}{2}} \quad (2-19)$$

$$d = \frac{|\vec{C}_h|}{\pi} \quad (2-20)$$

زاویه ی کایرال را به صورت زاویه ی بین محور زیگزاگ و بردار کایرال تعریف می کنند. در شکل (۲-۶) این زاویه با نماد θ نشان داده شده است. بابررسی بیشتر در این شکل می توان رابطه ی زیر را بدست آورد.

$$\vec{C}_h \cdot \vec{a}_1 = |\vec{C}_h| |\vec{a}_1| \cos(\theta) \quad (2-21)$$

با توجه به مجموعه روابط (۲-۱۶) و (۲-۱۹) می توان زاویه ی کایرال را بر حسب اعداد مشخصه ی (n, m) به صورت زیر محاسبه کرد.

$$\cos(\theta) = \frac{2n + m}{2\sqrt{(n^2 + m^2 + nm)}} \quad (2-22)$$

مقدار این زاویه در گستره ی زیر قرار خواهد گرفت.

$$\theta \in [0^\circ, 30^\circ] \quad (2-23)$$

بردار زیگزاگ کمترین زاویه یعنی صفر را دارد و بردار آرمیچر بیشترین زاویه را اتخاذ می کند. اگر در جهت محور نانولوله شروع به حرکت کنیم بعد از پیمودن مسافت $\vec{T}$ به وضعیت مشابه هندسی خواهیم رسید. در واقع بردار انتقال $\vec{T}$ همان بردار پایه ی شبکه ی یک بعدی نانولوله می باشد. این بردار را به لحاظ هندسی به این صورت تصور کنید که از نقطه ی O نشان داده شده در شکل (۲-۶) عمود بر بردار کایرال $\vec{C}_h$ به اولین اتمی که از نوع اتم O باشد برداری رسم می کنیم این بردار همان بردار انتقال $\vec{T}$ است در واقع در طول نانولوله اگر از هر نقطه به اندازه ی بردار انتقال جلو یا عقب برویم به موقعیت یکسان هندسی خواهیم رسید. اما این بردار را می توان به صورت

جبری نیز بر حسب اعداد مشخصه ی (n, m) نیز بیان کرد. مؤلفه های این بردار را می توان بر حسب بردارهای پایه ی شبکه ی گرافیت به صورت زیر نوشت.

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 \quad (2-24)$$

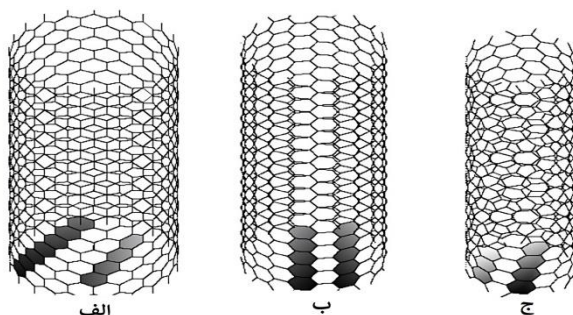
شرط عمود بودن این بردار بر بردار کایرال به صورت زیر اعداد t_1 و t_2 را به ما می دهد.

$$(t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2) \times (n \vec{a}_1 + m \vec{a}_2) = 0 \quad (2-25)$$

واضح است که انتخاب اعداد زیر شرط $(2-25)$ را برآورده می کند.

$$t_1 = n + 2m \quad (2-26 \text{ الف})$$

$$t_2 = -(2n + m) \quad (2-26 \text{ ب})$$



شکل ۷-۲. (الف) نانولوله ی زیگزآگ $(2,0)$ (ب) نانولوله ی آرمیچر $(10,10)$

(ج) نانولوله ی کایرال $(10,5)$

با انتخاب این اعداد ما برداری موازی بردار انتقال خواهیم داشت. اگر این دو عدد را بر بزرگترین شمارنده ی مشترکشان تقسیم کنیم آنگاه بردار انتقال به صورتی که در $(2-24)$ آمده بدست می آید.

$$t_1 = \frac{(n + 2m)}{p} \quad (2-27 \text{ الف})$$

$$t_2 = -\frac{(2n + m)}{p} \quad (2-27 \text{ ب})$$

P بزرگترین شمارنده ی مشترک $n + 2m$ و $2n + m$ است. در شکل (۷-۲) سه گونه متفاوت از نانولوله های کربنی را نشان داده ایم.

۲-۴-۲ یاخته ی واحد گرافیت و نانولوله ی کربنی

در این بخش به بررسی یاخته ی واحد در شبکه ی گرافیت و نانولوله ی کربنی می پردازیم. دامنه ی بررسی خود را در مورد فضای وارون بیشتر معطوف به منطقه ی اول بریلوئن می کنیم.

۲-۴-۱ یاخته ی واحد صفحه ی گرافیت

یاخته ی واحد و محدوده ی اول بریلوئن مربوطه در شکل (۵-۲) با رنگ خاکستری نشان داده شده است. بردارهای پایه ی شبکه ی وارون به وسیله ی دسته رابطه های (۱۷-۲) داده می شوند. سه نقطه، با تقارن بالا در شبکه وارون Γ ، K و M نیز در شکل (۵-۲) نشان داده شده اند. نقطه ی Γ جایی است که در آن $|\vec{K}|=0$ باشد و $\vec{K}$ بردار موج می باشد. در اینجا Γ درست در قسمت مرکزی شش گوشه ی شبکه ی وارون است. نقطه ی K در قسمت گوشه ی شش ضلعی واقع شده است و نقطه ی M درست در وسط خطی که دو نقطه ی K را به هم وصل می کند قرار است.

۲-۴-۲ یاخته واحد نانولوله ی کربنی

یاخته ی واحد نانولوله ی کربنی که هنوز دوران داده نشده است به وسیله ی مستطیل $OAB'B$ در شکل (۶-۲) نشان داده شده است. مساحت این مستطیل به راحتی به صورت زیر قابل محاسبه است.

$$A = |\vec{T} \times \vec{C}_h| = \frac{\sqrt{3}(\vec{C}_h \cdot \vec{C}_h)}{P} \quad (2-28)$$

تعداد اتم های هر یاخته ی واحد برابر ۶ است. هر اتم کربن بین ۳ یاخته ی واحد مشترک است. بنابراین ۲ اتم کربن متعلق به هر یاخته ی واحد صفحه ی گرافیت است. تعداد شش گوشه های متعلق به یاخته ی واحد نانولوله ی کربنی را می توان با تقسیم مساحت مستطیل مربوطه که در رابطه

ی (۱۹-۲) بدست آوردیم بر مساحت یاخته ی واحد صفحه ی گرافیت بدست آورد. بنابراین تعداد شش گوشه های موجود در هر سلول واحد از نانولوله به صورت زیر قابل محاسبه است.

$$N = \frac{|\vec{T} \times \vec{C}_h|}{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|} = \frac{2(n^2 + m^2 + nm)}{p} \quad (2-29)$$

این تعداد برای نانولوله های زیگزاگ $(n,0)$ و آرمیچر (n,n) برابر $2n$ است. بردار موج $\vec{K}$ که در فضای وارون تعریف می شود را می توان بر حسب دو بردار $\vec{K}_\perp$ و $\vec{K}_\parallel$ نوشت. این نام گذاری نسبت به بردارهای $\vec{C}_h$ و $\vec{T}$ از شبکه ی مستقیم صفحه ی گرافیتی نامگذاری شده است. $\vec{K}_\perp$ بردار موجی است که در راستای بردار کایرال قرار می گیرد. $\vec{K}_\parallel$ بردار موجی که در راستای محور نانولوله قرار می گیرد. از آنجایی که $\vec{K}_\perp$ در راستای بردار کایرال است، بعد از دوران صفحه ی گرافیت مؤلفه ی عمودی بردار موج هم دوران پیدا می کند و بر محیط نانولوله قرار می گیرد بنا بر این شرایط مرزی ایجاب می کند که محیط نانولوله مضرب صحیحی از طول موج آن باشد.

$$v\lambda = |\vec{C}_h| \quad (2-30)$$

که در آن v یک عدد صحیح است و λ طول موج مربوط به $\vec{K}_\perp$ است.

$$K_{\perp,v} = \frac{2\pi}{\lambda} = v \frac{2\pi}{|\vec{C}_h|} = v \frac{2}{d} \quad (2-31)$$

در این رابطه $K_{\perp,v} = vK_\perp$ است.

$$K_\perp = \frac{2\pi}{|\vec{C}_h|} \quad (2-32)$$

اکنون باید مشخص کنیم که چه محدودیتی در مورد ν که مشخص کننده ی تعداد حالت های مجاز کوانتش بردار موج است، وجود دارد. چون $\vec{K}_{\perp}$ بردار موج در فضای وارون و موازی با $\vec{C}_h$ است و $\vec{K}_{\parallel}$ موازی با $\vec{T}$ است. بنا بر این روابط زیر را می توان استخراج کرد.

$$\vec{C}_h \cdot \vec{K}_{\perp} = 2\pi, \quad \vec{T} \cdot \vec{K}_{\perp} = 0 \quad (2-33 \text{ الف})$$

$$\vec{C}_h \cdot \vec{K}_{\parallel} = 0, \quad \vec{T} \cdot \vec{K}_{\parallel} = 2\pi \quad (2-33 \text{ ب})$$

این چهار معادله را می توان با توجه به روابط (۲۷-۲) و (۲۹-۲) و رابطه ی $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ حل نمود.

$$\vec{K}_{\perp} = \frac{1}{N} (-t_1 \vec{b}_1 + t_2 \vec{b}_2) \quad (2-34 \text{ الف})$$

$$\vec{K}_{\parallel} = \frac{1}{N} (m \vec{b}_1 - n \vec{b}_2) \quad (2-34 \text{ ب})$$

همانطور که قبلاً در روابط (۱۷-۱) عنوان کردیم اعداد t_1 و t_2 بر بزرگترین شمارنده ی مشترک شان تقسیم کرده ایم بنابراین $N\vec{K}_{\perp}$ کوچکترین برداری است که در فضای وارون و در راستای عمود بر محور نانولوله وجود دارد. این بردار شبکه وارونی است که در منطقه ی اول بریلوئن قرار می گیرد. برای آنکه $\vec{K}_{\perp, \nu}$ در منطقه ی اول بریلوئن نانولوله باشد بیش ترین مقدار ν برابر N است. بنا بر این مقدار N مجزا برای $\vec{K}_{\perp}$ وجود دارد. $\vec{K}_{\parallel}$ در راستای محور نانولوله است و مقدار آن با فرض نامتناهی بودن طول نانولوله مقداری پیوسته است. در مورد نانولوله هایی با طول محدودتر مقدار $\vec{K}_{\parallel}$ نیز گسسته خواهد شد اما معمولاً از این کوانتش صرف نظر می شود.

۲-۵ محاسبه ساختار نواری گرافیت و نانولوله ی کربنی

در این بخش با توجه به روابط بدست آمده در قسمت قبل اقدام به محاسبه ساختار نواری نانولوله ی کربنی می کنیم.

۲-۵-۱ مولکول های محدود

یک مولکول با تعدادی معین از اتم ها را در نظر بگیرید. هر اتم شامل الکترون های نواری ظرفیت است که اربیتال های اتمی را تشکیل می دهند. تابع موج مولکول را می توان بر حسب یک ترکیب خطی از تابع موج اتم ها به صورت زیر نوشت.

$$\Psi_M(\vec{r}) = \sum_i c_i \phi_i(\vec{r}) \quad (2-35)$$

در این رابطه اندیس i مربوط به تمام اربیتال ها در تمام اتم های تشکیل دهنده مولکول است. c_i ضرایب بسط هستند. اگر این تابع موج را در رابطه ی ویژه مقداری انرژی با هامیلتونی کل مولکول قرار دهیم.

$$\hat{H}_M \Psi_M(\vec{r}) = E \Psi_M(\vec{r}) \quad (2-36)$$

آن گاه از (۲-۳۵) رابطه ی زیر را می توان استخراج کرد.

$$\sum_i c_i \hat{H}_M \phi_i(\vec{r}) = E \sum_i c_i \phi_i(\vec{r}) \quad (2-37)$$

با ضرب رابطه ی بالا در $\phi_j^*(\vec{r})$ و انتگرال گیری روی کل فضا به رابطه ی زیر می رسیم.

$$\sum_{i=1}^{\eta} c_i \langle \phi_j(\vec{r}) | \hat{H}_M | \phi_i(\vec{r}) \rangle = E \sum_{i=1}^{\eta} c_i \langle \phi_j(\vec{r}) | \phi_i(\vec{r}) \rangle \quad (2-38)$$

$$\sum_{i=1}^{\eta} c_i H_{ij} = E \sum_{i=1}^{\eta} c_i S_{ij} \quad (j = 1, \dots, \eta) \quad (2-39)$$

در این رابطه H_{ij} المان ماتریس تبادلی و S_{ij} انتگرال همپوشانی است و η تعداد کل اربیتال ها است. رابطه ی (۲-۳۹) را به صورت جبری می توان به صورت زیر نوشت.

$$\hat{H} \cdot \hat{C} = E \hat{S} \cdot \hat{C} \quad (2-40)$$

در این رابطه C یک بردار ستونی از ضرایب C_i ها است. برای بدست آوردن انرژی باید دترمینان ماتریس ضرایب را برابر صفر قرار داد.

$$\det(\hat{H} - E\hat{S}) = 0 \quad (2-41)$$

ابعاد ماتریس H و S را تعداد و نوع اتم هایی که در مولکول وجود دارد معین می کند. اگر ۲ اتم کربن یک مولکول تشکیل دهند چون هر اتم کربن دارای ۴ الکترون ظرفیت است بنا به رابطه ی (۲-۳۸) می توان دید که ابعاد این ماتریس 8×8 است. با افزایش اتم ها این ابعاد به صورت سرسام آوری زیاد می شوند. اما با فرضیات محدود کننده ای از جمله تاثیر همسایه ی اول و یا نادیده گرفتن انتگرال هم پوشانی می توان ابعاد این ماتریس را کاهش داد.

راه حل اساسی در مورد ساختارهایی با تعداد نامتناهی از مولکول ها، تشکیل یک سلول واحدی است که در کل ساختار به صورت تناوبی تکرار شود. برای رفتن از یک یاخته به یاخته ی دیگر از یک عامل فاز استفاده می شود. نظریه ی بلاخ^۱ در شبکه های تناوبی به صورت زیر بیان می شود.

$$\varphi(\vec{r} + c\vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \varphi(\vec{r}) \quad (2-42)$$

$\vec{R}$ برداری در شبکه است که بر حسب بردارهای پایه قابل بسط است. همان گونه که در بالا اشاره کردیم عامل فاز $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$ برای ارتباط بین دو یاخته تعریف شده است. با استفاده از این نظریه عناصر

^۱ Bloch

ماتریسی هامیلتونی (۲-۳۹) با در نظر گرفتن تاثیر همسایه های اول همان انرژی پیوندی ارییتال های π است که در یک عامل فاز ضرب شده باشند.

۲-۵-۲ ترازهای انرژی گرافیت

همان گونه که قبلا اشاره کردیم صفحه ی گرافیت شامل دو نوع اتم کربن است. هر اتم 'a' با سه اتم 'b' پیوند برقرار می کند و بالعکس. بنابراین در نظر گرفتن تقریب نزدیک ترین همسایه با توجه به شکل (۲-۴) عناصر ماتریس هامیلتونی که یک ماتریس هرمیتی است به صورت زیر محاسبه می شوند.

$$H_{aa} = H_{bb} = \alpha \quad (۲-۴۳)$$

$$H_{ab} = \left\langle \varphi_{\pi}(\vec{r} + d_{cc}\hat{x}) \left| \hat{H} \right| \varphi_{\pi}(\vec{r}) \right\rangle + \left\langle \varphi_{\pi} \left(\vec{r} - \frac{d_{cc}}{2}\hat{x} + \frac{d_{cc}\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right) \left| \hat{H} \right| \varphi_{\pi}(\vec{r}) \right\rangle \\ + \left\langle \varphi_{\pi} \left(\vec{r} - \frac{d_{cc}}{2}\hat{x} - \frac{d_{cc}\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right) \left| \hat{H} \right| \varphi_{\pi}(\vec{r}) \right\rangle \quad (۲-۴۴)$$

d_{cc} در این روابط طول پیوند کربن - کربن است. با

استفاده از رابطه ی (۲-۴۲) این ماتریس و هم چنین ماتریس انتگرال هم پوشانی به صورت زیر بیان می شود.

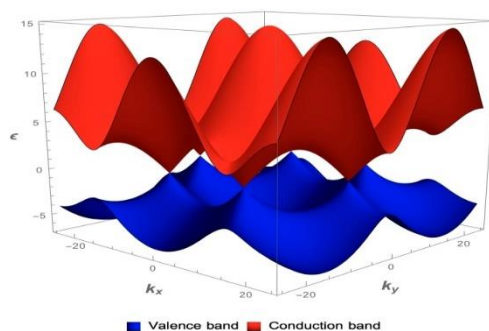
$$H = \begin{pmatrix} \alpha & \beta f(\vec{k}) \\ \beta f^*(\vec{k}) & \alpha \end{pmatrix} \quad (۲-۴۵)$$

$$S = \begin{pmatrix} 1 & sf(\vec{k}) \\ sf^*(\vec{k}) & 1 \end{pmatrix} \quad (۲-۴۶)$$

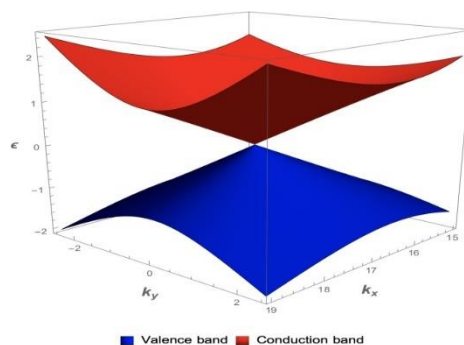
تابع $f(\vec{k})$ با توجه به رابطه ی (۲-۴۲) و هندسه مربوط به صفحه ی گرافیت به صورت زیر بین می شود.

$$f(\vec{k}) = e^{-ik_x \frac{a}{\sqrt{r}}} + \sqrt{2} e^{-i \frac{k_x a}{\sqrt{r}}} \cos\left(\frac{k_y a}{\sqrt{r}}\right) \quad (2-47)$$

در این روابط β انرژی پیوندی دو اربیتال π اتم های 'a' و 'b' است، a ثابت شبکه و S مقدار انتگرال همپوشانی این دو اربیتال است. انرژی پیوندی الکترون های π در منابع به صورت $0.33/3 \text{ eV}$ و انتگرال هم پوشانی آن ها به صورت 0.129 آورده شده است. با در نظر گرفتن تقریب مرتبه ی اول، عناصر قطری ماتریس H در (2-45) بی معنا می شود در واقع عناصر این ماتریس انرژی پیوندی دو اتم را می دهد و



نمودار ۲-۸ نمودار سه بعدی ترازهای انرژی گرافیت.



نمودار ۱-۲-۸ یک نمودار بزرگنمایی شده در نسخه متمتیکا از رابطه پراکندگی انرژی گرافن در مجاورت یکی از نقاط دیراک

چون در تقریب مرتبه اول اتم مشابهی برای هر کدام از اتم های 'a' و 'b' وجود ندارد این مقدار برابر صفر است. با صفر قرار دادن دترمینان (۲-۴۱) تراز های انرژی برای صفحه ی گرافیت بدست می آید.

$$E_{\pm} = \frac{\pm \beta |f(\vec{k})|}{1 \pm s |f(\vec{k})|} \quad (2-48)$$

۳-۵-۲ ترازهای انرژی نانولوله ی کربنی

نانولوله ی کربنی به عنوان صفحه ی گرافیتی که به دور یک استوانه پیچیده شده است در نظر گرفته می شود. همان گونه که در بخش (۲-۴-۲) عنوان شد در مورد نانولوله های کربنی مؤلفه ای از بردار موج که عمود بر راستای نانولوله است دارای مقادیر گسسته خواهد شد. تعداد خطوط مجاز که در اولین منطقه ی بریلوئن از یاخته ی واحد نانولوله قرار می گیرد برابر N است و N در بخش (۲-۴-۲) معرفی شده است. از آنجا که مؤلفه ی بردار موج موازی با محور نانولوله ی نامتناهی مقداری پیوسته است بنابراین می توان آن را به صورت بردار پیوسته ای در راستای $\vec{K}_{\parallel}$ دانست. در حالت کلی بردار موج کل نانولوله به صورت حاصل جمع مؤلفه ی عمودی و موازی با محور نانولوله معین می شود.

$$\vec{K}_{NT}^v = \left(k \frac{\vec{K}_{\parallel}}{|\vec{K}_{\parallel}|} + v \vec{K}_{\perp} \right), \quad \frac{\pi}{|\vec{T}|} \leq k \leq \frac{\pi}{|\vec{T}|}, \quad v=0,1,\dots,N-1 \quad (2-49)$$

چون یک شبکه ی یک بعدی با ثابت شبکه T دارای شبکه وارونی با محدوده ی منطقه ی اول بریلوئن برابر $-\frac{\pi}{T} \leq k \leq \frac{\pi}{T}$ است. بنا بر این در رابطه ی (۲-۴۹) k بین محدوده ی نامبرده تغییر می کند. منحنی هایی که بر روی سطوح انرژی گرافیت به ازای رابطه ی (۲-۴۹) بدست می آید

همان تراز های انرژی نانولوله هستند. بنابراین ترازهای انرژی نانولوله ی کربنی به صورت زیر بدست می آیند.

$$E_{NT}^v(k) = E_{\text{graphit}} \left(k \frac{\vec{K}_{\parallel}}{|\vec{K}_{\parallel}|} + v \vec{K}_{\perp} \right) \quad (2-50)$$

در نمودار (۲-۲) این سطوح انرژی برای نانولوله ی زیگزاگ و آرمیچر رسم شده است. همانگونه که در این نمودار مشاهده می کنید هرچند تعداد خطوط مجاز باید N یعنی برای نانولوله ی $(1,0)$ و $(0,1)$ برابر ۲۰ باشد ولی تنها ۱۱ حالت برای نوار رسانش و ظرفیت دیده می شود دلیل این امر به خاطر تبهگنی خطوط انرژی مجاز در نانولوله های زیگزاگ و آرمیچر است. همان طور که در نمودار (۲-۲ الف) مشاهده می کنید نوار ظرفیت نوار رسانش را در نانولوله های زیگزاگ $(1,0)$ لمس نمی کند و یک گاف انرژی کوچکی میان آن ها وجود دارد. بنابراین نانولوله ی $(1,0)$ نیمرسانا است. اما در مورد نانولوله ی آرمیچر نوار ظرفیت نوار رسانش را لمس کرده است. بنا بر این نانولوله ی $(1,0)$ از خود خواص رسانایی نشان می دهد همان گونه که بعداً خواهیم دید تمام نانولوله های آرمیچر رسانا هستند. در شکل (۲-۸) تبهگنی خطوط انرژی برای نانولوله ی زیگزاگ $(1,0)$ را نشان داده ایم.

همان گونه که در نمودار (۲-۱) مشاهده می کنید سطوح انرژی صفحه ی گرافیت در نقاط K در اولین منطقه ی بریلوئن دارای تبهگنی است. بنابراین اگر بردار موج نانولوله ی کربنی از این نقاط عبور کند نانولوله ی حاصله از خود خواص رسانایی نشان می دهد در غیر این صورت نانولوله خواص نیمرسانا از خود نشان می دهد. موقعیت نقطه ی K با برداری که از مبدا در اولین منطقه ی

بریلوئن رسم شود به صورت $\vec{K} = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right)$ داده می شود. با توجه به روابط (۲-۴۹) و (۲-۳۳) الف و ب) رابطه زیر را می توان استخراج کرد.

$$\vec{K}_{NT}^v \cdot \vec{C}_h = 2\pi v \quad (2-51)$$

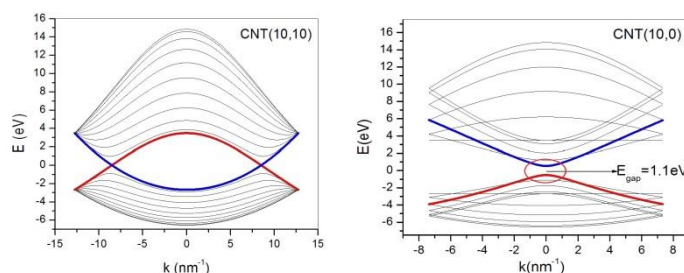
مطابق روابط (۲-۱۶) الف و ب) و (۲-۱۸) بردار کایرال به صورت زیر تعریف می شود:

$$\vec{C}_h = \left(\frac{(n+m)\sqrt{3}}{2}, \frac{n-m}{2} \right) a \quad (2-52)$$

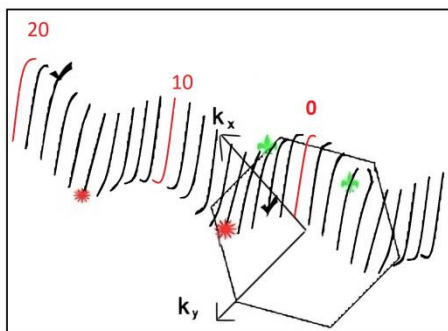
اگر بردار موج نانولوله را در رابطه ی (۲-۵۱) معادل با $\vec{K} = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right)$ قرار دهیم رابطه ی زیر را بدست می آوریم.

$$\frac{2n+m}{3} = v \quad (2-53)$$

از آنجایی که اعداد m, n و v همگی صحیح هستند، شرط عبور بردار موج نانولوله ی کربنی مطابق معادله ی (۲-۵۳) آن است که $2n+m$ مضرب صحیحی از ۳ باشد. این شرط معادل آن است که بگوییم $n-m$ مضرب صحیحی از ۳ باشد. بنا بر این اگر شرط (۲-۵۳) برقرار باشد ما یک نانولوله ی رسانا داریم.



نمودار ۲-۹ الف) نمودار سطوح انرژی برای نانولوله زیگزاگ $(10,0)$ ب) سطوح انرژی نانولوله آرمیچر $(10,10)$



شکل ۲-۱۰ در این شکل تبهگنی خطوط مجاز انرژی را برای نانولوله ی (۱,۰) نشان داده ایم هرچند تعداد خطوط مجاز برابر ۲۰ عدد است اما خطوطی که از ۱۰ فراتر می روند معادلی بین ۰ تا ۱۰ دارند. این خطوط معادل را با علامت های یژه نشان داده ایم. همینطور برای اعداد کوانتومی مشخص کننده تراز انرژی که منفی باشند نیز خطوط معادلی بین ۰ تا ۱۰ وجود دارد از این موضوع در فصل آینده جهت صرفه جویی در تعداد محاسبات به دفعات زیادی استفاده می شود.

۴-۵-۲ چگالی حالات^۱ در نانولوله ی کربنی

چگالی حالات در نانولوله های کربنی به دفعات زیاد در نظریه پراکندگی الکترون - فونون مورد استفاده قرار می گیرد بنا بر این بدست آوردن این کمیت بسیار ضروری می باشد. از آنجایی که ساختار نواری نانولوله ی کربنی یک ساختار تک بعدی است و در نقاط زیادی دارای کمینه و بیشینه است بنابراین انتظار تکینگی های وان هوف^۲ در آن را باید داشت. چگالی حالات برای یک ساختار یک بعدی و برای هر تراز به صورت زیر تعریف می شود.

$$g_n(\varepsilon) = \frac{T}{\pi} \frac{1}{\left| \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial k} \right|_{\varepsilon=\varepsilon_n}} \quad (2-54)$$

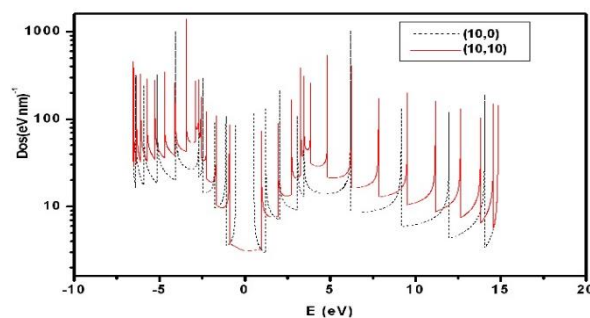
^۱) DOS (Density Of States

^۲ Vane hove

چگالی حالات کل با جمع زنی مقدار (۵۴-۲) بر روی تمام ترازها انجام می شود. در محاسبات

مربوط به پراکندگی معمولاً از چگالی حالت کل را به صورت $DOS = \frac{\pi}{T} \sum_n g_n(\varepsilon)$ تعریف می کنند.

در نمودار (۳-۲) چگالی حالات کل در واحد طول شبکه ی وارون را برای دو نانولوله ی زیگزاگ $(10,10)$ و آرمیچر $(10,0)$ نشان داده شده است. همانگونه که در نمودار (۳-۲) مشاهده می کنید نانولوله ی رسانای آرمیچر در حوالی سطح فرمی ($E_F = 0$) دارای چگالی حالت اندکی است. در حالی که نانولوله ی زیگزاگ در این محدوده فاقد چگالی حالت است. اما اگر به نمودار (۲-۲) توجه کنید متوجه می شوید که هر تراز انرژی نانولوله ی $(10,0)$ دارای یک کمینه است اما این موضوع در مورد نانولوله ی $(10,10)$ صادق نیست به گونه ای که در بعضی از ترازها این تعداد از یک تجاوز کرده و حتی در کمینه ی نوار رسانش و یا بیشینه نوار ظرفیت جایی که دو نمودار همدیگر را لمس می کنند مشتق نمودار وجود ندارد. بنا بر این تعداد نقاط تکینه ی وان هوف برای نانولوله ی آرمیچر بیشتر از نانولوله ی زیگزاگ است.



نمودار ۲-۱۱ در این شکل چگالی حالت برای دو نانولوله ی $(1,0)$ و $(1,1)$ رسم شده است. همان گونه که مشاهده می کنید نانولوله ی آرمیچر در حوالی انرژی فرمی $E_F = 0$ دارای چگالی حالات اندکی است اما نانولوله زیگزاگ در این محدوده انرژی دارای هیچ گونه چگالی حالتی نیست.

۲-۶ نمودار پاشندگی فونون ها در صفحه ی گرافیت و نانولوله های کربنی

برای بررسی نحوه ی ترابرد حامل ها در نانولوله ی کربنی باید انواع پراکندگی های موجود را بررسی کرد با فرض کامل بودن شبکه گرافیت و نظریه ی الکترون مستقل، همواره مدهای فونونی یا نوسانات گرمایی شبکه وجود دارند و باعث پراکندگی الکترون ها در این مواد می شوند. بنا بر این قبل از آنکه وارد حل مسئله پراکندگی الکترون فونون شویم لازم است انواع مدهای فونونی را در نانولوله های کربنی بررسی کنیم. در اینجا مشابه حالتی که در بخش قبل برای بدست آوردن انرژی ترازهای رسانش و ظرفیت انجام دادیم ابتدا به محاسبه ترازهای انرژی انواع مدهای فونونی در صفحه ی گرافیت می پردازیم و سپس نتایج مربوطه را بر اساس تقریب نگاشت صفحه ی گرافیت به یک استوانه (منطقه ی انباشته)^۱، به نانولوله های کربنی توسعه می دهیم. به منظور بررسی نوسانات اتم های کربن در نانولوله های کربنی و صفحه ی گرافیت از مدل ثابت نیرو^۲ استفاده می کنیم. در این مدل فرض می شود که نیروی بین دو اتم کربن متناسب با جابجایی فاصله ی بین دو اتم کربن است. در این مدل اثر برهمکنش را تا چهارمین همسایه ی نزدیک مورد بررسی قرار می دهیم.

۲-۶-۱ مدل ثابت نیرو و رابطه ی پاشندگی فونونی برای صفحه ی گرافیت

برآیند نیروهایی که به اتم i ام وارد می شود به صورت زیر است.

$$\vec{F}_i = \sum_j K^{ij} \left(\vec{u}_j(\vec{R}_j) - \vec{u}_i(\vec{R}_i) \right) \quad (2-55)$$

^۱ Zone folding

^۲ Force constant model

$\vec{R}_i = (x_i, y_i, z_i)$ بردار مکان اتم $\vec{R}_i$ است و $\vec{u}_i(\vec{R}_i)$ ها جابه جایی اتم $\vec{R}_i$ است و حاصل جمع زنی روی j تا چهارمین همسایه ی اول را در بر می گیرد. K^{ij} یک ماتریس 3×3 است که به ماتریس ثابت نیرو بین اتم $\vec{R}_i$ و $\vec{R}_j$ معروف است. معادله ی حرکت اتم $\vec{R}_i$ مطابق قانون دوم نیوتن توصیف می شود.

$$\vec{M}_i \ddot{\vec{u}}_i(\vec{R}_i) = \sum_j K^{ij} (\vec{u}_j(\vec{R}_j) - \vec{u}_i(\vec{R}_i)) \quad , \quad i=1, \dots, \eta \quad (2-56)$$

M_i جرم اتم $\vec{R}_i$ است. وابستگی زمانی جابه جایی اتم $\vec{R}_i$ را به صورت $e^{-i\omega t}$ در نظر می گیریم بنابراین $\ddot{\vec{u}}_i$ به صورت زیر داده می شود.

$$\ddot{\vec{u}}_i(\vec{R}_i) = -\omega^2 \vec{u}_i(\vec{R}_i) \quad (2-57)$$

با توجه به آنالیز فوریه معادله حرکت اتم $\vec{R}_i$ به صورت زیر است.

$$\vec{u}_i(\vec{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\vec{q}} e^{-i(\vec{q} \cdot \vec{R}_i - \omega t)} \vec{u}_i(\vec{q}) \quad (2-58)$$

مجموع بر روی تمام بردارهای موج $\vec{q}$ در اولین منطقه بریلوئن زده می شود.

با قرار دادن روابط (2-57) و (2-58) در رابطه (2-56) داریم:

$$\begin{aligned} \left(\sum_j K^{ij} - \omega^2 M_i I \right) \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\vec{q}} e^{-i(\vec{q} \cdot \vec{R}_i - \omega t)} \vec{u}_i(\vec{q}) \\ = \sum_j K^{ij} \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{\vec{q}} e^{-i(\vec{q} \cdot \vec{R}_j)} e^{i\omega t} \vec{u}_j(\vec{q}) \end{aligned} \quad (2-59)$$

در این رابطه I ماتریس یک 3×3 است. با ضرب طرفین در $e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i}$ و جمع زنی روی تمام $\vec{R}_i$ ها بدست می آوریم.

$$\sum_{\vec{R}_i} e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\vec{R}_i} = N_a \delta_{\vec{q},\vec{q}'} \quad (2-60)$$

$$\left(\sum_j K^{ij} - \omega^2 M_i I \right) \bar{u}_i(\vec{q}) - \sum_j K^{ij} e^{i(\vec{q}-\Delta\vec{R}_{ij})} \bar{u}_j(\vec{q}) = 0, \quad (i=1, \dots, \eta) \quad (2-61)$$

با قرار دادن تمام η جابجایی ها در یک بردار به صورت زیر

$$\bar{u}(\vec{q}) = [\bar{u}_1(\vec{q}), \dots, \bar{u}_\eta(\vec{q})]^T \quad (2-62)$$

معادله ی (۲-۶۱) را می توان به صورت زیر خلاصه کرد.

$$D(\vec{q}) \bar{u}(\vec{q}) = 0 \quad (2-63)$$

$D(\vec{q})$ یک ماتریس $3\eta \times 3\eta$ با ویژه مقدار $M_i \omega^2(\vec{q})$ است. $D(\vec{q})$ را ماتریس دینامیک سیستم می نامند. به منظور یافتن ویژه مقدارهای $D(\vec{q})$ باید معادله ی زیر را حل کرد.

$$\det(D(\vec{q})) = 0 \quad (2-64)$$

$D(\vec{q})$ یک ماتریس $3\eta \times 3\eta$ یا یک تانسور $\eta \times \eta$ با المان هایی که هر کدام یک ماتریس 3×3 است، می باشد. هر المان از این تانسور با توجه به رابطه ی (۲-۶۰) به صورت زیر بدست می آید.

$$D_{ij}(\vec{q}) = \left(\sum_{j'} K^{ij'} - \omega^2 M_i I \right) \delta_{ij} - \sum_{j'} K^{ij'} e^{i\vec{q}(\Delta\vec{R}_{ij'})} \quad (2-65)$$

جمع زنی روی j' تا چهارمین همسایه اول نسبت به اتم i ادامه می یابد. جمع زنی روی j' تنها بر روی اتم های همسایه ای زده می شود که معادل با اتم j' اتم در چهارمین همسایه اول نسبت به اتم i باشد. ماتریس ثابت نیروی K^{ij} نیروی بین دو اتم i و j را در سه بعد مشخص می کند. شکل (۲-۹) عناصر ثابت نیرو بین دو اتم را نشان می دهد. با انتخابی که برای راستای محور مختصات در

این شکل انجام شده ارتعاش در راستای محور X ها را ارتعاش شعاعی درون صفحه ای می گویند. ارتعاش در راستای محور Y ها را ارتعاش مماسی درون صفحه ای و ارتعاش در راستای محور Z ها را ارتعاش مماسی خارج از صفحه می نامند. این سه نوع نوسان را با ثابت های مربوط به خود نشان می دهند. ϕ_r ثابت نیرویی که معرف نوسانات شعاعی است، ϕ_{ti} معرف ثابت نیروی مماسی درون صفحه و ϕ_{to} معرف ثابت نیروی مماسی خارج از صفحه می باشد.

با توجه به هندسه ی نشان داده شده در شکل (۲-۹) ماتریس ثابت نیرو برای دو اتمی که خط واصل آن ها در راستای محور X ها است به صورت زیر معرفی می شود.

$$K_{ij}^{\circ} = \begin{bmatrix} \phi_r & \cdot & \cdot \\ \cdot & \phi_{ti} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \phi_{to} \end{bmatrix} \quad (2-66)$$

به منظور بدست آوردن رابطه ی پاشندگی فونونی برای گرافیت باید رابطه ای که برای ماتریس دینامیکی در عبارت (۲-۶۴) و (۲-۶۵) بدست آوردیم را حل کنیم. همان طور که گفته شد صفحه-ی گرافیت شامل دو نوع اتم 'a' و 'b' است شکل (۲-۴) چهار همسایه اول را برای اتم 'a' نشان می دهد. اگر به دقت این شکل را بررسی کنیم خواهیم دید که تعداد اتم هایی که تا چهار همسایه اول مد نظر قرار گرفته اند برابر ۱۸ تا است. چون دو نوع اتم در هر سلول واحد وجود دارد لذا دو جابجایی $\bar{u}_a(\bar{q})$ و $\bar{u}_b(\bar{q})$ که شامل سه مختصه است تعریف می شود. لذا ماتریس دینامیک به صورت زیر تعریف می شود.

$$D(\bar{q}) = \begin{bmatrix} D_{aa} & D_{ab} \\ D_{ba} & D_{bb} \end{bmatrix} \quad (2-67)$$

D_{ij} ها ماتریس های 3×3 هستند که در رابطه ی (۶۵-۲) توضیح داده شده اند. با توجه به رابطه ی (۶۵-۲) و شکل (۴-۲) D_{aa} به صورت زیر داده می شود.

$$D_{aa} = K^{ab_1} + \dots + K^{ab_{12}} + K^{aa_1} + \dots + K^{aa_6} - K^{aa_1} e^{i\vec{q} \cdot \Delta \vec{R}_{aa_1}} - \dots - K^{aa_6} e^{i\vec{q} \cdot \Delta \vec{R}_{aa_6}} - \omega^2 M_1 \hat{I} \quad (۲-۶۸)$$

و D_{ab} به صورت زیر تعریف می شود.

$$D_{ab} = -K^{ab} e^{i\vec{q} \cdot \Delta \vec{R}_{ab_1}} - \dots - K^{ab_{12}} e^{i\vec{q} \cdot \Delta \vec{R}_{ab_{12}}} \quad (۲-۶۹)$$

اگر دو اتمی که باید ماتریس ثابت نیرو بین آنها اعمال شود در صفحه XY و در راستای خطی باشند که با محور Xها زاویه θ بسازد آنگاه ماتریس ثابت نیرو را در این دستگاه جدید به سادگی با اطلاع از مبانی دوران و اعمال ماتریس دوران بر عملگرهایی که دو دستگاه را به هم مربوط می کند به صورت زیر بدست می آید.

$$K^{ij} = U^{-1}(\theta) K^{\circ ij} U(\theta) \quad (۷۰-۲)$$

در این رابطه $K^{\circ ij}$ ماتریس ثابت نیرویی است که در رابطه ی (۶۶-۲) عنوان شد و U ماتریس دوران حول محور Zها است.

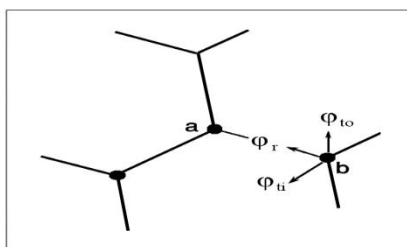
$$U(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) & 0 \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (۷۱-۲)$$

رابطه ی (۷۱-۲) با این فرض نوشته شده است که اتم های گرافیت در صفحه XY قرار دارند. ماتریس ثابت نیرو به وسیله ی روابط (۶۶-۲) و (۷۰-۲) داده خواهند شد.

جدول ۱-۲. در این جدول عناصر ماتریس ثابت نیرو را تا چهار همسایه اول آورده ایم (بعد اعداد

$\frac{N}{m}$ است).

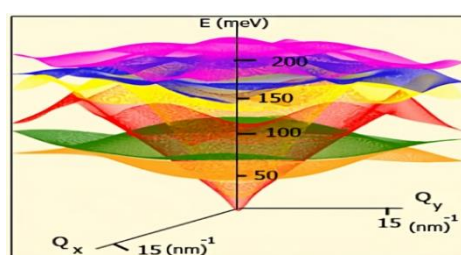
مماسی خارج از صفحه	مماسی درون صفحه	شعاعی
$\phi_{to}^{\downarrow} = 98 / 2$	$\phi_{ti}^{\downarrow} = 245$	$\phi_r^{\downarrow} = 365$
$\phi_{to}^{\uparrow} = -4$	$\phi_{ti}^{\uparrow} = -32 / 3$	$\phi_r^{\uparrow} = 88$
$\phi_{to}^{\circ} = 1 / 5$	$\phi_{ti}^{\circ} = -52 / 5$	$\phi_r^{\circ} = 30$
$\phi_{to}^{\circ} = -5 / 8$	$\phi_{ti}^{\circ} = 22 / 9$	$\phi_r^{\circ} = -19 / 2$



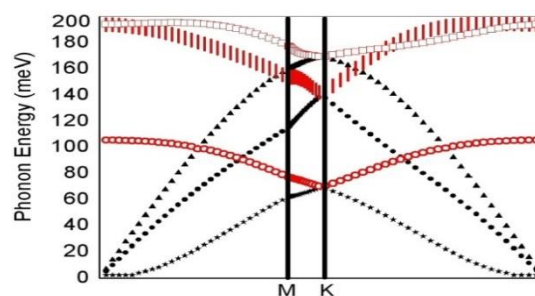
شکل ۲-۱۲ در این شکل مؤلفه های ماتریس ثابت نیرو را برای دو اتم مجاور نشان داده شده است

ϕ_r و ϕ_{ti} و ϕ_{to} اعدادی هستند که به صورت تجربی برای چهار همسایه اول در آزمایشگاه بدست آمده اند و در جدول (۲-۱) آورده شده اند. زاویه θ که بین محور x ها و خط واصل دو اتم $\hat{r}$ و $\hat{r}_0$ است به راحتی از هندسه ای که در شکل (۲-۴) آمده بدست می آید. با توجه به فاصله ی بین اتم ها و زوایای مربوطه و ماتریس ثابت نیرو، عناصر ماتریس دینامیک به راحتی از رابطه ی (۲-۶۵) بدست می آیند. هنگامی که این عناصر بدست آمد می توان رابطه ی (۲-۶۴) را حل نمود و ویژه مقادیر $M_i \omega^2(\vec{q})$ را بدست آورد. با بدست آمدن ویژه مقادیر، انرژی فونون از رابطه ی $E_{phonon} = \hbar \omega(\vec{q})$ بدست می آید. در نمودار (۲-۴) مقدار E_{phonon} در اولین منطقه ی بریلوئن به تصویر کشیده شده است. نمودار (۲-۵) این مقدار را در راستای خطوط متقارن در اولین منطقه ی بریلوئن نشان می دهد با توجه به این شکل متوجه می شویم که ۶ شاخه ی فونونی وجود دارد. این موضوع از قبل نیز برای خواننده آشنا با مبانی بلور شناسی و فیزیک حالت جامد قابل حدس بود چون هر یاخته ی واحد گرافیت معادل با دو اتم است و هر اتم دارای سه درجه ی آزادی است در

نهایت شش شاخه ی فونونی وجود خواهد داشت. چون فضای حقیقی سه بعدی است لذا در مورد تمام شبکه ها سه عدد از شاخه های فونونی شاخه های آکوستیکی نامیده می شوند و مابقی آنها را شاخه های اپتیکی می گویند. شیب منحنی پاشندگی فونونی در نقطه Γ سرعت صوت در ماده را به ما می دهد.



نمودار ۲-۱۳ پاشندگی فونونی برای صفحه گرافیت. بردار موج $\vec{q}$ در اولین منطقه ی بریلوئن صفحه گرافیت واقع است.



نمودار ۲-۱۴ پاشندگی فونونی برای صفحه گرافیت که در راستای خطوط متقارن در اولین منطقه بریلوئن رسم شده است. نقاط متقارن در اولین منطقه ی بریلوئن با توجه به شکل (۲-۵ ب) به صورت

$$\Gamma(0,0), \quad M\left(\frac{\sqrt{3}\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{\pi}{a}\right) \quad \text{و} \quad K\left(\frac{\sqrt{3}\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{\pi}{a}\right) \quad \text{مشخص می شوند.}$$

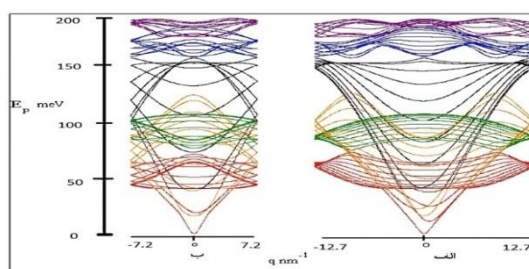
۲-۶-۲ رابطه ی پاشندگی فونونی برای نانولوله های کربنی

رابطه ی پاشندگی برای نانولوله های کربنی با تقریبی که در بخش قبل با آن آشنا شدیم شروع می شود نمودار (۲-۴) شکل سه بعدی است که رابطه ی پاشندگی فونونی را برای صفحه ی گرافیت

نشان داده است. هنگامی که صفحه ی گرافیت به روی استوانه نگاشته می شود طول موج حول محیط نانولوله گسسته می شود در حالی که طول موج در راستای محور نانولوله پیوسته می ماند. این بدان معنا است که تنها خطوط موازی که درون منطقه ی اول بریلوئن قرار می گیرند مجازند. تعداد خطوط مجاز به وسیله ی تعداد طول موج های کوانتیده پیرامون محیط نانولوله مشخص می شود که برابر نصف تعداد اتم هایی است که درون یاخته ی واحد قرار می گیرد. مطابق روشی که در بخش قبل، پیش گرفتیم می توانیم رابطه ی پاشندگی فونونی را برای نانولوله های کربنی با توجه به رابطه ی پاشندگی که برای صفحه گرافیتی بدست آوردیم محاسبه کنیم.

$$\hbar\omega_{NT}^{\mu}(q) = \hbar\omega_G \left(q \frac{\vec{q}_{\parallel}}{|\vec{q}_{\parallel}|} + \mu \vec{q}_{\perp} \right), \quad \mu = 0, 1, \dots, N-1 \quad (2-72)$$

در این رابطه $\vec{q}_{\parallel, \perp}$ ها همانند $\vec{K}_{\parallel, \perp}$ هایی هستند که در روابط (۲-۴۸ الف و ب) آمدند. ما در اینجا طول موج مربوط به پاشندگی فونونی را با علامت q نشان دادیم تا در برهمکنش فونون با الکترون بتوان آن را در روابط به صورت مجزا نشان داد. در نمودار (۲-۶) E_{phonon} برای نانولوله های $(10,0)$ و $(10,10)$ نشان داده شده است.



نمودار ۲-۱۵ (الف) نمودار پاشندگی فونونی برای نانولوله ی $(10,10)$ (ب) نمودار پاشندگی فونونی برای نانولوله ی $(10,0)$

فصل سوم:

پراکندگی الکترون فونون

مقدمه

در خلال وجود هرگونه نقایص شبکه همواره در دماهای بالاتر از صفر ارتعاشات گرمایی شبکه وجود دارند که باعث پراکنده شدن الکترون ها در جامدات می شوند. بنا بر این جهت بررسی حرکت الکترون ها در نانولوله ی کربنی همواره باید این پراکندگی را مد نظر قرار داد. در این پروژه بنا نداریم نظریه ی پراکندگی الکترون - فونون را بررسی کنیم بلکه تنها اشاره ای به نظریه ی پراکندگی کوانتومی و نرخ پراکندگی می کنیم و از نتایج و داده های بدست آمده در منابع جهت بررسی حرکت الکترون در نانولوله ی کربنی با استفاده از فرایندهای تصادفی می کنیم.

۳-۱ تابع توزیع الکترون

الکترون ها فرمیون هستند و از آمار فرمی - دیراک پیروی می کنند. تابع توزیع فرمی دیراک به صورت زیر بیان می شود.

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}}} \quad (3-1)$$

در این رابطه ε انرژی الکترون و μ پتانسیل شیمیایی سیستم است. در دمای صفر پتانسیل شیمیایی همان انرژی فرمی ذرات است. از آنجایی که $k_B T$ در دمای اتاق از مرتبه $0.01 eV$ است بنابراین تابع توزیع (۳-۱) تنها در حوالی $\varepsilon = \mu$ دارای تغییرات می باشد. پتانسیل شیمیایی تا تصحیح مرتبه دوم دما برای فلزات به صورت زیر بیان می شود.

$$\mu = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{DOS'(\varepsilon_F)}{DOS(\varepsilon_F)} \quad (3-2)$$

در این رابطه DOS چگالی حالت^۱ می باشد. از این رابطه به سرعت می توان فهمید جایی که مشتق چگالی حالات نسبت به انرژی صفر است پتانسیل شیمیایی با انرژی فرمی برابر است. اما تابع

^۱ Density of states

توزیع در پراکندگی ها دچار تغییر می شود به عبارتی میدان الکتریکی و یا برخوردها ماهیت تابع توزیع را دچار تغییر می کنند. در این گونه موارد به جای تابع توزیع (۳-۱) تابع ناترازمندی به نام g معرفی می کنند که ماهیت تابع توزیع را در پراکندگی های گوناگون بیان می کند. تابع توزیع ناترازمند g را در حالت کلی به صورت معادله بولتزمن بیان می کنیم.

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{k}} = \sum_{\vec{k}'} \frac{d\vec{k}}{8\pi^3} \{ W_{\vec{k},\vec{k}'} g(\vec{k}) [1 - g(\vec{k}')] - W_{\vec{k}',\vec{k}} g(\vec{k}') [1 - g(\vec{k})] \} \quad (3-3)$$

در این رابطه $W_{\vec{k},\vec{k}'}$ نرخ پراکندگی^۱ از حالتی با بردار موج $\vec{k}$ به حالتی با بردار موج $\vec{k}'$ است. زمان واهلش که معیاری از احتمال برخورد الکترون در مدت زمانی معلوم را می دهد، برابر معکوس آهنگ پراکندگی کل^۲ از یک حالت $\vec{k}$ به تمامی حالات ممکن $\vec{k}'$ است.

$$\tau(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}'} W_{\vec{k},\vec{k}'} \quad (3-4)$$

از مکانیک کوانتومی می دانیم آهنگ پراکندگی از یک حالت به حالت دیگر به وسیله ی قانده تلای فرمی به صورت زیر بیان می شود.

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{\gamma \pi}{\hbar} |\langle f | H | i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f \pm \hbar \omega) \quad (3-5)$$

در این رابطه H هامیلتونی برهمکنشی است که عامل پراکندگی می باشد. همان گونه که قبلاً اشاره کردیم در غیاب ناخالصی ها و نقایص بلوری، فونون ها عوامل پراکننده در جامدات می باشند. نرخ پراکندگی الکترون - فونون در نانولوله های کربنی به وسیله ی رابطه ی زیر داده می شود.

$$W_{\vec{k},\vec{k}'} = \sum_{\text{all } \vec{q}, \mu} \frac{\hbar D^* \text{DOS}(\vec{k} + \vec{q})}{\rho d E_p(\vec{q}, \mu)} \left[N_p + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \quad (3-6)$$

^۱ Scattering rate

^۲ Total scattering rate

در این رابطه ρ چگالی جرمی صفحه ی گرافیت بوده و برابر $\frac{kg}{m^2}$ است. N_p و E_p به ترتیب انرژی فونون و عدد اشغال^۱ بوزونی است. D عددی است که با بردار موج فونون رابطه ی مستقیم و خطی دارد $D = D_0 \left(\frac{E_{ph}^{\mu}(q=0)}{E_{RMB}} + q \right)$. ضرایب $D_0 = 14eV$ و $E_{RMB} = 30meV$ می باشند. انرژی فونون در نانولوله ی کربنی به وسیله ی رابطه ی (۷۲-۲) داده می شود. عدد اشغال بوزونی اینشتن به صورت زیر بیان می شود.

$$N_p = \frac{1}{e^{\frac{E_p}{k_B T}} - 1} \quad (3-7)$$

هنگامی که (۳-۶) بدست آمد می توان آن را در معادله (۳-۳) قرار داد تا تابع توزیع ناترازمند g را بدست آورد. معادله (۳-۳) یک معادله دیفرانسیل غیر خطی است ولی می توان با تقریب زمان واهلش آن را به یک معادله ی خطی تبدیل کرد. تقریب زمان واهلش به صورت زیر بیان می شود.

$$\frac{\partial}{\partial t} g(\vec{r}, \vec{k}, t) + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} g(\vec{r}, \vec{k}, t) + \vec{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} g(\vec{r}, \vec{k}, t) = - \frac{g(\vec{r}, \vec{k}, t) - g^e(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\tau(\vec{k})} \quad (3-8)$$

هنگامی که تابع توزیع بدست آمد مقدار انتظاری هر کمیت فیزیکی به صورت زیر بدست می آید.

$$\bar{A}(t) = \sum_{n, \vec{k}} A(\vec{k}, t) g_n(\vec{k}, t) \quad (3-9)$$

تقریب زمان واهلش آشکارا به این معنا است که زمان واهلش مستقل از پراکندگی ها است. تابع g^0 تابع توزیع ترازمند موضعی می باشد که مستقل از میدان های اعمالی و پراکندگی ها است. در واقع این تابع همان تابع توزیع فرمی - دیراک در مورد فرمیون ها می باشد. با حل معادله (۳-۸) تابع

^۱ Occupation number

توزیع در یک محیط همگن فضایی که در آن مشتقات مکانی صفر هستند به صورت زیر داده می شود.

$$g_n(\vec{k}, t) = g_n^\circ(\vec{k}) + e \int_{-\infty}^t dt' P(t, t') \frac{\partial}{\partial \varepsilon_n(\vec{k}(t'))} g_n^\circ(\vec{k}(t')) \vec{v} \cdot \vec{E} \quad (3-10)$$

$$g_n^\circ(\vec{k}) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_n(\vec{k}) - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (3-11)$$

در رابطه ی فوق $\vec{E}$ میدان الکتریکی است و نیز باید توجه داشت جهت بدست آوردن رابطه ی (۳-۱۰) از معادلات نیمه کلاسیکی حرکت استفاده شده است. این معادلات به صورت زیر بیان می شوند.

$$\hbar \frac{d}{dt} \vec{k} = -e\vec{E} \quad (3-12)$$

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \varepsilon_n(\vec{k}) \quad (3-13)$$

در معادله (۳-۱۰) $P(t, t')$ معرف کسری از الکترون ها است که در بازه زمانی $(t - t')$ در نقطه ی $\vec{k}$ هیچ گونه برخوردی را نداشته اند. با استفاده از رابطه ی (۳-۶) و معادلات حرکت نیمه کلاسیکی (۳-۱۲) و (۳-۱۳) تابع توزیع ناترازمند g به راحتی بدست می آید. باید توجه کرد که در رابطه ی (۳-۱۰) مشتق انرژی برای جمله تصحیحی به تابع توزیع ترازمند تنها در محدوده ی انرژی های $\varepsilon \approx \mu$ دارای مقدار است. چون در دماهای پایین و در حد دمای اتاق تابع توزیع فرمی - دیراک (رابطه ی ۳-۱) برای انرژی هایی که تفاضل آن ها از پتانسیل شیمیایی از مرتبه $k_B T$ نباشد عدد ثابتی است بنابر این عملاً تابع توزیع برای نانولوله های زیگزاک نیمرسانا که اندازه تفاوت انرژی کمینه یا بیشینه ی آنها تا سطح فرمی چندین بار بزرگتر از $k_B T \approx 0.01 eV$ است مقداری صفر ($\varepsilon - \mu > 0$) یا یک ($\varepsilon - \mu < 0$) دارد. چون نوار انرژی الکترونی حول نقطه ی $k = 0$ دارای تقارن

است بنا بر این میانگین سرعت الکترون ها در نوار انرژی صفر می شود و هیچ جریان خالصی به وجود نمی آید. این حالت، رسانش در نانولوله های زیگزاگ را ناممکن می سازد. برای آنکه بتوان از این گونه نانولوله ها جهت ترابرد حامل ها استفاده کرد باید به نوعی سطح فرمی را که در حالت معمول برابر صفر است (نمودار ۲-۲) تا نوار رسانش بالا برد. در ترانزیستورهای اثر میدانی این کار به راحتی امکان پذیر است به صورتی که نانولوله را به عنوان یک مجرای بین دررو^۱ و چشمه^۲ قرار می دهند (شکل ۱-۳) در این وضعیت نانولوله و درگاه تشکیل یک خازن می دهند. با اعمال یک ولتاژ به درگاه مقداری بار درون نانولوله تزریق می شود که باعث جابه جایی سطح فرمی می شود. اگر پتانسیل مثبت به درگاه اعمال شود سطح فرمی به درون نوار رسانش کشیده خواهد شد. بردار موج فرمی به وسیله ی رابطه ی زیر داده می شود.

$$k_F = \frac{\pi Q}{4eL} \quad (۱۴-۳)$$

$$Q = C(V_G - V_{Th}) \quad (۱۵-۳)$$

در این رابطه V_{Th} ^۳ پتانسیل آستانه ی کار ترانزیستور می باشد و C ظرفیت خازن درگاه و نانولوله ی استوانه شکل است. ظرفیت خازن درگاه - نانولوله به صورت زیر معرفی می شود.

$$C = \frac{2\pi \kappa \epsilon_0 L}{\ln\left(\frac{2(t+r)}{r}\right)} \quad (۱۶-۳)$$

در این رابطه K ثابت دی الکتریک اکسید درگاه، r شعاع نانولوله و t ضخامت اکسید درگاه است. انرژی فرمی با بدست آوردن تعداد بارهای تزریق شده به درون نانولوله بدست می آید. در

^۱ drian

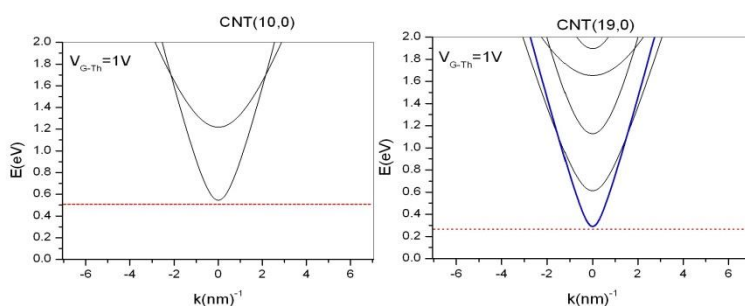
^۲ Source

^۳ Threshold voltage

نمودار (۱-۳) سطح فرمی را برای ترانزیستوری با ضخامت اکسید درگاه ۱۰ نانومتر و ثابت دی الکتریک ۴ (اکسید سیلیکون) برای دو نانولوله ی زیگزاگ نشان داده ایم.

۳-۲ محاسبه نرخ پراکندگی کل

برای محاسبه نرخ پراکندگی کل از یک نقطه با بردار موج $\vec{k}$ از شاخه V ساختار نوار انرژی نانولوله باید نرخ پراکندگی تمام پراکندگی های الکترون - فونون را که از شاخه V و بردار موج $\vec{k}$ بدست می آید را بدست آورد و با هم جمع نمود. اما باید توجه کرد که در هر پراکندگی پایستگی انرژی و تکانه برای حالات اولیه و نهایی باید برقرار باشد.



نمودار ۱-۳. در این شکل محل انرژی فرمی دو نانولوله ی زیگزاگ مختلف را نشان داده ایم یک الکترون می تواند در مسیر حرکت خود یک فونون جذب کند این موضوع باعث افزایش انرژی الکترون می شود و یا می تواند در طول مسیر خود یک فونون گسیل کند که در این صورت انرژی الکترون کم خواهد شد. قوانین پایستگی برای این دو رویداد به صورت زیر بیان می شوند.

$$E_f = E_i \pm E_{\text{phonon}} \quad (3-17)$$

$$\vec{k}_f = \vec{k}_i \pm \vec{q} \quad (3-18)$$

علامت مثبت مربوط به جذب فونون و علامت منفی مربوط به گسیل فونون است. رابطه ی برداری (۳-۱۸) با توجه به رابطه ی (۲-۴۹) خود تبدیل به دو شرط پایستگی برای اندازه بردارهای موج و شاخه ی نهایی از نوار انرژی که الکترون باید برود می شود.

$$\left(k_f \frac{\vec{K}_{\parallel}}{|\vec{K}_{\parallel}|} + v_f \vec{K}_{\perp} \right) = \left(k_i \frac{\vec{K}_{\parallel}}{|\vec{K}_{\parallel}|} + v_i \vec{K}_{\perp} \right) \pm \left(q \frac{\vec{K}_{\parallel}}{|\vec{K}_{\parallel}|} + \mu \vec{K}_{\perp} \right) \quad (3-19)$$

از برابر قرار دادن ضرایب دو بردار $\vec{K}_{\parallel}$ و $\vec{K}_{\perp}$ در رابطه ی (۱۹-۳) و در نظر گرفتن رابطه ی (۳-۱۷) برای پایستگی انرژی در نهایت قوانین پایستگی زیر هر پراکندگی مجاز را تعریف می کند.

$$E_f = E_i \pm E_{\text{phonon}}$$

$$k_f = k_i \pm q$$

$$v_f = v_i \pm \mu$$

(۳-۲۰)

منطقه ی اول بریلوئن در هر شبکه ی تک بعدی در محدوده ی $-\frac{\pi}{T} \leq k \leq \frac{\pi}{T}$ قرار دارد که در آن T اندازه ی بردار انتقال شبکه است و در مورد نانولوله های کربنی در فصل دوم کاملاً تعریف شده است. در هر پراکندگی ممکن است بردار موج الکترون از منطقه ی اول بریلوئن خارج شود و یا عدد مربوط به شاخه ی نواری منفی شود و یا از حد بیشینه ی خود که در فصل دوم تعریف شد بزرگتر شود. البته هیچکدام از این ها نقض قوانین پایستگی نیست چون ساختار شبکه دوره ای است ما می توانیم مسئله را در یک منطقه ی دوره ای دنبال کنیم و یا در منطقه ی کاهش یافته مسائل را دنبال کنیم و هر دوی این ها جواب های یکسانی خواهند داشت ولی بنا به دلایلی که بعداً خواهیم دید کار کردن در محدوده ی منطقه ی کاهش یافته بسیار مناسب تر است. در یک شبکه ی دوره ای همواره می توان نقاط خارج از منطقه اول بریلوئن را با اضافه کردن برداری در شبکه ی وارون به نقطه ای معادل در منطقه ی اول بریلوئن آورد. تنها کاری که باید انجام داد آن است که این بردار را پیدا کنیم. به روندی که با استفاده از تقارن های موجود در شبکه به پیدا کردن نقطه ی معادل در منطقه ی اول بریلوئن می شود اصطلاحاً فرایند واگرد^۱ گفته می شود و به عنوان قلب تپنده ای در محاسبات کامپیوتری به میزان بسیار زیادی از محاسبات می کاهد.

^۱ Umklapp Process

اکنون در موقعیتی هستیم که می توانیم عامل نرخ پراکندگی کل را بدست آوریم. برای این کار ساختار نوار انرژی الکترونی و فونونی را به تکه-های کوچکی تقسیم می کنیم هرچه تعداد این تکه ها بیشتر باشد محاسبات ما دقیق تر خواهد شد. بعد از اینکه این کار را کردیم شرایط پایستگی (۳-۲۰) را در مورد هر پراکندگی بررسی می کنیم اگر این شرایط برقرار بود آنگاه یک پراکندگی مجاز خواهد بود و نرخ پراکندگی را به وسیله ی رابطه ی (۳-۶) بدست می آوریم. برای روشن شدن مطلب این موضوع را کمی بیشتر توضیح می دهیم. یک الکترون وقتی پراکنده می شود بردار موجش و همچنین ترازى که در آن قرار می گیرد تغییر می کند در واقع بعد از هر برخورد مطابق با رابطه ی (۳-۱۸) و (۳-۲۰) الکترون دارای بردار موجی برابر $\vec{k}_f = \vec{k}_i \pm \vec{q}$ می شود و به تراز $V_f = V_i \pm \mu$ می رود حال باید بررسی کرد انرژی الکترون در این تراز جدید و بردار موج جدید، انرژی معادل $E_i \pm E_{phonon}$ دارد یا نه. اگر این دو انرژی برابر بودند قوانین پایستگی (۳-۲۰) برقرار بوده و پراکندگی مجاز می باشد. هنگامی که نرخ های پراکندگی برای یک نقطه بدست آمد با جمع زنی رو تمام آن ها نرخ پراکندگی کل بدست خواهد آمد. با به دست آمدن نرخ پراکندگی کل در هر نقطه، زمان واهلش از رابطه ی (۳-۴) بدست می آید و تابع توزیع را می توان از رابطه ی (۳-۱۰) بدست آورد.

۳-۳ شبیه سازی پراکندگی الکترون - فونون

به منظور بررسی نحوه ی پراکندگی الکترون ها در نانولوله ی کربنی از فرایندهای تصادفی استفاده می کنیم. هنگامی که نرخ های پراکندگی در تمامی نقاط در منطقه ی اول بریلوئن بدست آمد آن ها را در یک آرایه به صورت مرتب و به صورت زیر قرار می دهیم.

فرض کنید در نقطه P تعداد پراکندگی های مجازی که بدست آمده برابر n باشد بنابر این آرایه ای از اعداد به نام *Scatteringdata* و با طول n تعریف می کنیم و عناصر آن را به صورت زیر مقدار دهی می کنیم.

$$\text{Scattering data } (P, 1) = W_{k, k'_1}$$

$$\text{Scattering data } (P, 2) = W_{k, k'_1} + W_{k, k'_2}$$

.

.

.

$$\text{Scattering data } (P, n) = W_{k, k'_1} + \dots + W_{k, k'_n} \quad (3-21)$$

همان گونه که از رابطه ی (۳-۲۴) پیدا است $\text{Scattering data}(P, n)$ آهنگ پراکندگی کل است. دسته ای از الکترون ها را با شرایط اولیه ای که دما مشخص می کند در نانولوله قرار می دهیم (در کمینه ی نوار رسانش) دو سر نانولوله را به اختلاف پتانسیل مشخصی وصل می کنیم با این کار میدانی در راستای محور نانولوله ایجاد می شود (فرض می کنیم این میدان یکنواخت است). حرکت الکترون ها مطابق روابط نیمه کلاسیکی (۳-۱۲) و (۳-۱۳) توصیف می شوند. به الکترون ها اجازه داده می شود زمانی را که تا 0.1 معکوس بیشینه آهنگ پراکندگی کل در تمام پراکندگی های مجاز در تمامی نوارها است طی کند.

$$t_d = 0.1 \times \frac{1}{\text{Max}(W_{k, k'})} \quad \text{for all } k, k' \quad (3-22)$$

بعد از آنکه این زمان سپری شد برای هر الکترون یک عدد تصادفی انتخاب می کنیم و آن را t_{ran} می نامیم اگر این عدد از نسبت زمان کل پیمایشی که الکترون داشته (t_t) به زمان واهلش در نقطه ای که الکترون به آن رسیده کوچکتر بود یک پراکندگی برای الکترون در نظر می گیریم وگرنه به الکترون اجازه می دهیم به مسیر خود که به وسیله ی روابط (۳-۱۲) و (۳-۱۳) تعریف می شوند ادامه دهد. شرط پراکنده شدن به وسیله ی رابطه ی زیر تعریف می شود.

$$t_{ran} < \frac{t_t}{\tau_v(k)} \quad , \quad t_t = \sum t_d \quad (3-23)$$

بعد از هر پراکندگی t_i را برابر صفر قرار می دهیم. اکنون باید مشخص کنیم اگر شرط (۳-۲۳) برقرار شد کدام پراکندگی را باید در نقطه ی مذکور انتخاب کنیم. برای این منظور دوباره یک عدد تصادفی تولید کرده و در نرخ پراکندگی کل در آن نقطه ضرب می کنیم و آن را $Scatter_{ran}$ می نامیم این عدد را با عناصر آرایه (۳-۲۱) در نقطه ی مذکور مقایسه می کنیم تا شرط زیر برقرار شود. (آرایه $Scatteringdata$ یک آرایه مرتب است).

$$Scattering\ data(P,i) < Scatter_{ran} < Scattering\ data(P,i+1) \quad (3-24)$$

هنگامی که این شرط برقرار شد پراکندگی i ام را انتخاب می کنیم با این پراکندگی بردار موج و شاخه ی جدیدی از نوار انرژی برای الکترون ایجاد می شود و الکترون از این پس با این وضعیت جدید به حرکت در میدان الکتریکی ادامه می دهد. زمان کل شبیه سازی را ۱۰۰۰۰ بار بزرگتر از t_d در نظر می گیریم. اگر زمان t_d برابر 10^{-16} ثانیه باشد زمان شبیه سازی را 10^{-12} ثانیه در نظر می گیریم.

با اتمام زمان شبیه سازی هنگردی^۱ از الکترون ها داریم که باید روی تک تک کمیات فیزیکی بدست آمده برای آن از جمله (سرعت و بردار موج در هر لحظه) مطابق رابطه ی (۳-۹) میانگین گیری کرد.

۳-۴ محاسبه جریان و مقاومت نانولوله ی کربنی

در یک میدان الکتریکی یکنواخت و مستقل از زمان (رسانش DC) جریان الکتریکی برای رسانش یک بعدی با توجه به تبهگنی انرژی برای خطوط مجاز به صورت زیر تعریف می شود .

$$I = \frac{ze}{\pi} \int dk g(\vec{k}, t) v(\vec{k}, t) \quad (3-25)$$

^۱ Ensemble

مقاومت نانولوله به صورت زیر تعریف می شود. محاسبات نشان می دهد بعد از گذشت زمان به اندازه کافی بزرگ تابع توزیع شکل ثابتی به خود می گیرد یعنی حالت سیستم از یک وضعیت غیر تعادلی به یک حالت تعادلی خواهد رسید.

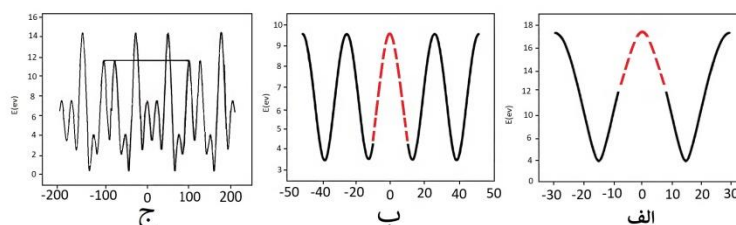
$$R = \frac{V}{I} \quad (۲۶-۳)$$

در رابطه ی (۲۶-۳) V پتانسیل اعمال شده به دو سر نانولوله است.

۵-۳ ضرورت تعریف روال واگرد

همان گونه که قبلاً اشاره کردیم روابط پایستگی (۲۰-۳) ممکن است گذاری را مجاز بداند که در آن بردار موج از اولین منطقه ی بریلوئن خارج شود و یا عدد کوانتومی که معرف تراز الکترونی است را از حد بیشینه ی خود بیشتر کند. در اینجا ما یا باید دامنه ی محاسبات خود را به منطقه ی دوم بریلوئن گسترش دهیم و یا با پیدا کردن نقطه ی معادلی در اولین منطقه ی بریلوئن دامنه ی کاری خود را به منطقه ی کاهش یافته محدود کنیم. از آنجایی که برای نانولوله های زیگزاگ $(n,0)$ و یا آرمیچر (n,n) تعداد ترازهای غیر تبهگن نوار انرژی فونونی برابر $6 \times n$ و تعداد نوارهای غیر تبهگن انرژی الکترونی برابر n است بنا بر این در نهایت برای بررسی شرایط پایستگی (۲۰-۳) باید $6 \times n^2$ مقایسه را در طول منطقه ای که هم برای بردار موج الکترونی و هم برای بردار موج فونونی به تکه های کوچکی تقسیم شده انجام دهیم. حال فرض کنید بخواهیم در فضای تکرارشونده کار کنیم. این فضا را با تعقیب نمودار تک شاخه ای از نوار الکترونی یا فونونی می توان پیدا کرد (نمودار ۲-۳). این فضا برای نانولوله های زیگزاگ دقیقاً دو برابر منطقه ی اول بریلوئن است بنا بر این اگر با دقتی مشابه با فضای کاهش یافته بخواهیم کار کنیم تعداد تکه هایی که باید این فضا به آن تقسیم شود دو برابر آنچه در مورد منطقه ی کاهش یافته است افزایش می یابد. این موضوع در مورد نانولوله های کایرال به مراتب پیچیده تر است چون دامنه ی منطقه ی تکرار شونده برای این نوع نانولوله ها بسیار بزرگ است (نمودار ۲-۳). در نهایت اگر تعداد تکه هایی که فضای بردار موج

فونونی و الکترونی را مساوی و برابر η در نظر بگیریم کار کردن در منطقه ی اول بریلوئن به $\eta^2 \times n^2 \times 6$ محاسبه نیاز دارد و کار کردن در منطقه ی تکرار شونده برای نانولوله های زیگزاگ ۴ برابر این مقدار محاسبه لازم دارد و این بدان معنا است که در هر بار اجرای برنامه مدت زمانی ۴ برابر را باید انتظار کشید. اما این موضوع در مورد نانولوله های آرمیچر بهتر است به گونه ای که تعریف بردار انتقال بسیار ساده است و نیازی به بررسی تغییرات نواری نداریم. بنا بر این بسیار منطقی به نظر می رسد که دامنه ی کاری خود را به منطقه ی اول بریلوئن معطوف کنیم.



نمودار ۲-۳. شاخه ی پنجم از نوار رسانش نانولوله زیگزاگ (الف) $(13,0)$ ، (ب) نانولوله ی آرمیچر

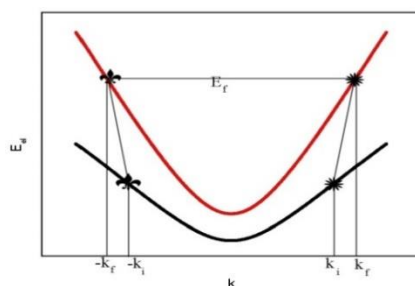
$(10,10)$ و (ج) نانولوله ی کایرال $(10,6)$. خطوط نقطه چین منطقه ی اول بریلوئن را نشان می دهند.

برای این منظور باید دید به وسیله ی چه برداری می توان حالتی را که از دامنه ی منطقه ی اول بریلوئن خارج شده به منطقه ی اول بریلوئن آورد و تراز را که الکترون باید در این انتقال اشغال کند کدام است. برای بدست آوردن روالی که الکترون را از منطقه ی دوم بریلوئن به اولین منطقه ی بریلوئن انتقال دهد و یا عدد کوانتومی معادلی را برای تراز الکترونی بدست آورد به ساختار هندسی نوار الکتریکی نگاهی می اندازیم. مطابق رابطه ی (۲۰-۳) عدد کوانتومی که الکترون بعد از پراکندگی برای تراز انرژی خود در نانولوله ی زیگزاگ اختیار می کند در محدوده ی زیر جای خواهد گرفت.

$$-n \leq \nu_f \leq 2n \quad (27-3)$$

این تراز های انرژی را برای نانولوله ی زیگزاگ $(1,0)$ در شکل (۲-۸) نشان داده ایم. با توجه به این شکل و موقعیت بردار موج الکترون که درون منطقه ی اول بریلوئن باشد و یا خارج از آن، فرایند واگرد براحتی تعریف می شود. این روال را در پیوست آورده ایم.

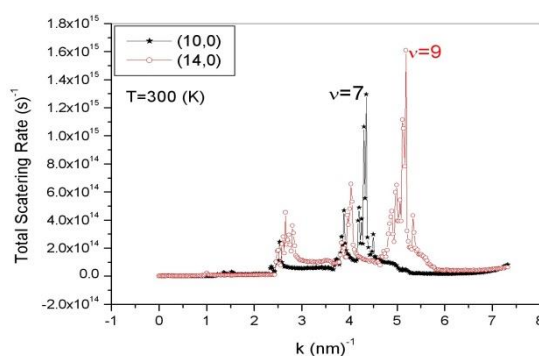
نکته دیگری که باید به آن توجه کرد این است که نوار انرژی الکترونی حول نقطه $k=0$ متقارن است به همین خاطر لازم نیست پراکندگی های کوچک تر از صفر را بررسی کرد. همانطور که در نمودار (۳-۳) نشان داده ایم هر پراکندگی با بردار موج بزرگتر از صفر معادلی با بردار موج منفی دارد. اگر در ناحیه ای با بردار موج بزرگتر از صفر الکترون یک فونون با بردار موج مثبت را جذب کند بردار موجش زیاد شده و انرژی کسب می کند این معادل آن است که بگوییم در ناحیه ی منفی الکترون با بردار موج قرینه، فونونی با بردار موج منفی را جذب کند هر دوی این فرایندها انرژی یکسانی و نوار مشخصی را برای الکترون در نظر می گیرند و نرخ پراکندگی هر دوی آنها یکی است چون ساختار فونونی هم حول نقطه ی صفر متقارن است بنابر این فقط کافی است در مسئله پراکندگی جهت بدست آوردن نرخ پراکندگی با بردارهای موج مثبت کار کنیم و هرگاه در پراکندگی ها بردار موج الکترون منفی شد نرخ پراکندگی معادل بردار موج مثبت را برای آن منظور کنیم.



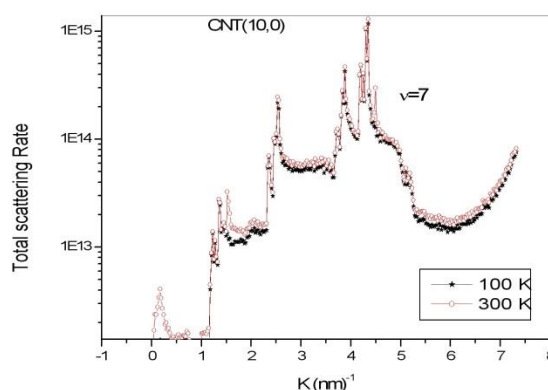
نمودار ۳-۳. در این شکل هم ارزی دو گذار یکی با بردار موج مثبت و دیگری با بردار موج منفی را نشان داده ایم. با انجام این کار زمان محاسبات را به نصف کاهش خواهیم داد.

۳-۶ نرخ پراکندگی

قبل از آنکه هر کاری انجام دهیم باید ابتدا نرخ پراکندگی را در هر نقطه بدست آوریم. این کار را همانگونه که در فصل قبل گفتیم با تقسیم فضای منطقه ی اول بریلونن برای ساختار انرژی الکترونی و فونونی به تکه های بسیار کوچک و بررسی شرایط پایستگی (۳-۲۰) انجام می دهیم. نتایج بدست آمده را در مورد کمینه ی نوار رسانش در مورد دو نانولوله ی (۱۰,۰) و (۱۴,۰) در نمودار (۴-۱) مشاهده می کنید. وابستگی دمایی نرخ پراکندگی کل را برای کمینه ی نوار رسانش نانولوله ی (۱۰,۰) در نمودار (۴-۳) نشان داده ایم.



نمودار ۴-۳ در این نمودار نرخ پراکندگی کل دو نانولوله ی زیگراگ (۱۴,۰) و (۱۰,۰) را برای کمینه نوار رسانش هر کدام رسم کرده ایم.



نمودار ۳-۵ در این نمودار نرخ پراکندگی کل را برای کمینه نوار رسانش نانولوله ی زیگزاگ (۱۰,۰) نشان داده ایم. همان گونه که مشاهده می کنید در دمای بالاتر نرخ پراکندگی کل بیشتر خواهد شد که به منزله ی کوچک تر شدن زمان واهلش است.

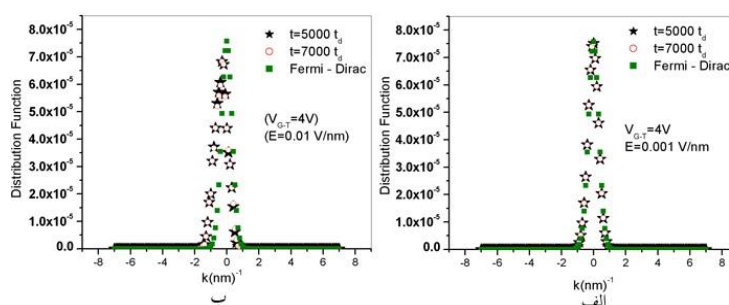
۷-۳ تابع توزیع در شرایط مختلف فیزیکی

هنگامی که نرخ پراکندگی کل بدست آمد می توان تابع توزیع را برای نانولوله ای که در شرایط مشخصی قرار داده شده از رابطه ی (۳-۱۳) بدست آورد. جهت بدست آوردن تابع توزیع ناترازمند ابتدا فرض می کنیم که نانولوله را در یک ترانزیستور کار گذاشته ایم و پتانسیل مشخصی به درگاه اعمال می کنیم. به دوسر نانولوله که یکی چشمه^۱ (با پتانسیل صفر) و دیگری دررو^۲ (با پتانسیل مثبت) یک اختلاف پتانسیل مشخصی وارد می کنیم با فرض آنکه با این کار میدانی یکنواخت در طول نانولوله ایجاد شود تابع توزیع ناترازمند از رابطه ی (۳-۱۳) بدست می آید. البته در طول روند محاسبات این پروژه از اثری که میدان الکتریکی بر ترازهای الکترونی نانولوله می گذارد صرف نظر شده است و نیز ضخامت لایه اکسید درگاه را در تمامی محاسبات برابر ۱۰ نانومتر اختیار کرده ایم. وابستگی تابع توزیع به زمان را در میدان های ضعیف و قوی در دو نمودار (۴-۳) و (۴-۴)

^۱ Source

^۲ Drain

برای دو نوار رسانش نانولوله ی (۱۰,۰) که کمترین انرژی را دارند در حالتی که اختلاف پتانسیل در گاه با ولتاژ آستانه ۴ ولت باشد نشان داده ایم.

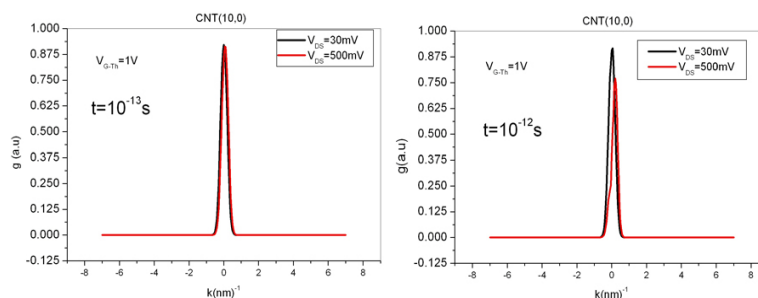


نمودار ۳-۶ در این نمودار وابستگی زمانی تابع توزیع برای شاخه ششم از نوار رسانش نانولوله ی (۱۰,۰) در میدان (الف) ضعیف و (ب) قوی رسم شده است.

همان گونه که در نمودار (۳-۶) مشاهده می کنید در حد میدان های ضعیف (پتانسیل ۰/۱ ولت به دوسر نانولوله ای به طول یک میکرومتر اعمال شود) در زمان هایی کوچکتر از ۱۰۰۰۰ برابر زمان پیمایش که در فصل قبل تعریف کردیم به حالت پایدار می رسیم در این حالت تابع توزیع برای همه زمان ها مقداری ثابت دارد. از طرف دیگر جابه جایی تابع توزیع از تابع ترازمند فرمی - دیراک بسیار ناچیز است. نکته دیگری که باید به آن توجه کرد این است که برای این شاخه مقدار تابع توزیع بسیار کوچک است. دلیل این موضوع این است که اختلاف انرژی فرمی از این شاخه زیاد است. همانگونه که در نمودار (۳-۶) مشاهده میکنید میزان انحراف از تابع توزیع فرمی - دیراک وقتی میدان قوی می شود محسوس است .

همان گونه که در نمودار (۳-۷) نشان داده ایم تابع توزیع ناترازمند شاخه ی هفتم از نوار رسانش در میدان های قوی اعمال شده به نانولوله ی بشدت از حالت ترازمند خود خارج می شود. همان گونه

که مشاهده می کنید تابع توزیع برای بردارهای موجی با اندازه ی بیشتر از $|\vec{k}| > \frac{2}{nm}$ تابع توزیع را بسیار ناچیز می کند.



نمودار ۷-۳ در این نمودار انحراف تابع توزیع را در حد میدان قوی و ضعیف را برای شاخه ی هفتم از نوار رسانش نانولوله ی نشان داده ایم

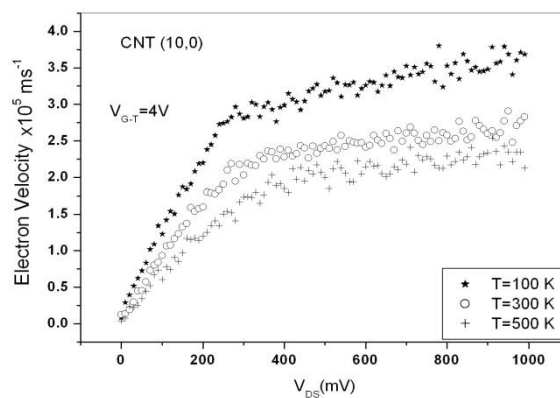
۳-۸ بررسی سرعت میانگین الکترون ها، جریان، مقاومت و تحرک پذیری الکترون

در این بخش با استفاده از فرایندهای تصادفی که در فصل قبل گفته شد اقدام به محاسبه ی سرعت میانگین الکترون ها و همچنین جریان الکتریکی در نانولوله های زیگزاگ در شرایط فیزیکی گوناگون کرده و در نهایت تحرک پذیری الکترون را در نانولوله های گوناگون بدست خواهیم آورد.

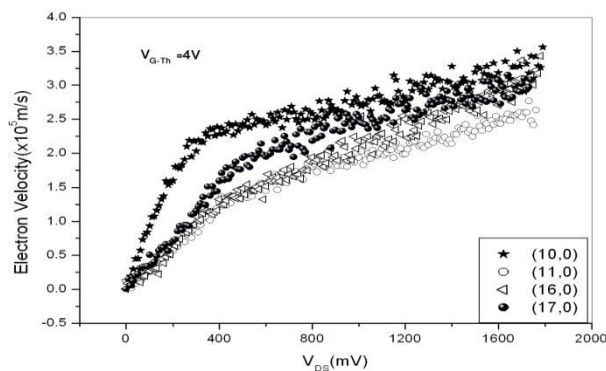
۳-۸-۱ بررسی توزیع سرعت در نانولوله های زیگزاگ نیمرسانا

در محاسبات خود هنگردی متشکل از ۱۰۰ الکترون در نظر گرفتیم و بر روی این هنگرد میانگین گیری سرعت الکترون را انجام دادیم. در این شبیه سازی ترانزیستوری با ضخامت اکسید درگاهی برابر ۱۰ نانومتر با ثابت دی الکتریک برابر ۴ (اکسید سیلیکون) و نانولوله ای به طول ۱ میکرومتر را مورد بررسی قرار داده ایم. وابستگی دمایی سرعت میانگین با اعمال ولتاژهای گوناگون به دو سر نانولوله ی (۱۰،۰) در نمودار (۸-۳) آمده است. همانگونه که در نمودار (۸-۳) نشان داده شده سرعت میانگینی که الکترون در نانولوله بدست می آورد با زیاد شدن دما کم می شود. این موضوع از قبل

نیز قابل حدس بود. اما نکته قابل توجه در نمودار (۸-۳) آن است که منحنی توزیع سرعت الکترون شامل دو قسمت است. برای ولتاژهای کوچک خیز سرعت الکترون زیاد است اما به ازای ولتاژ خاصی این خیز ناگهان کم می شود. در نمودار (۹-۳) توزیع سرعت الکترون ها را در چند نانولوله ی کربنی به عنوان نمونه آورده ایم.



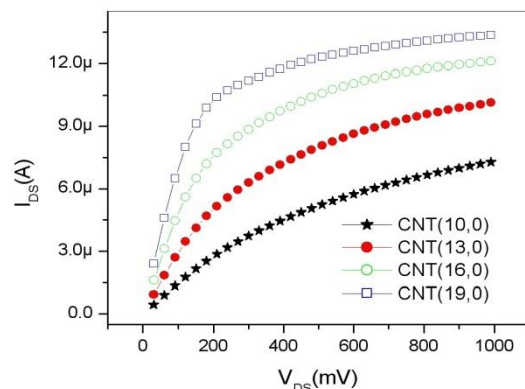
نمودار ۸-۳ در این نمودار وابستگی سرعت میانگین الکترون ها به دما در نانولوله ی (۱۰,۰) نشان داده شده است.



نمودار ۹-۳ نمودار توزیع سرعت الکترون در نانولوله های زیگزاگ گوناگون در دمای ۳۰۰ درجه کلوین

۳-۸-۲ بررسی جریان الکتریکی در نانولوله های زیگزاگ نیمرسانا

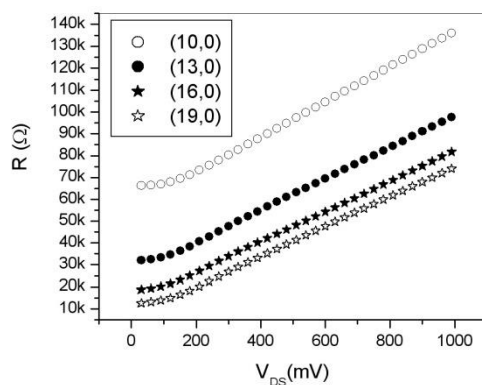
سرعت حامل ها و جریان الکتریکی در یک ماده رابطه ی بسیار نزدیکی با هم دارند در واقع جریان همان شارش حامل ها از مقطعی قائم است و هرچه سرعت بیشتر باشد جریان هم بیشتر است و بالعکس. بنا بر این نمودار تغییرات جریان بسیار شبیه آنچه در مورد سرعت متوسط حامل ها گفتیم است. این دو کمیت به وسیله ی رابطه ی (۳-۲۸) به همدیگر مربوط می شوند. نمودار (۴-۷) تغییرات جریان با ولتاژ اعمال شده به دوسر چند نانولوله را نشان می دهد.



نمودار ۳-۱۰ جریان - ولتاژ در نانولوله های زیگزاگ نیمرسانا در دمای ۳۰۰ درجه ی کلونین.

۳-۸-۳ بررسی مقاومت نانولوله های زیگزاگ نیمرسانا

هنگامی که توزیع جریان در نانولوله بدست آمد محاسبه مقاومت الکتریکی آن به وسیله ی رابطه ی (۳-۲۶) امری راحت است. نمودار (۳-۱۱) مقاومت الکتریکی نانولوله های زیگزاگ نیمرسانا را نشان داده است. همانگونه که در این نمودار نشان داده شده مقاومت نانولوله ی کربنی با افزایش ولتاژ دوسر آن به صورت خطی تغییر می کند.



نمودار ۳-۱۱ مقاومت نانولوله های زیگزاگ نیمرسانا

۳-۸-۴ بررسی تحرک پذیری الکترون در نانولوله های زیگزاگ نیمرسانا

تحرک پذیری الکترون توسط رابطه ی زیر تعریف می شود:

$$\vec{V} = -\mu \vec{E}$$

(۳-۲۸)

در رابطه بالا μ تحرک پذیری الکترون و $\vec{V}$ سرعت الکترونی است که در میدان الکتریکی $\vec{E}$ حرکت می کند. تحرک پذیری الکترون در یک ماده معیاری از پاسخ الکترون به میدان اعمال شده به آن را به ما می دهد. در واقع هرچه تحرک پذیری الکترون در یک ماده بزرگتر باشد الکترون سریعتر به میدان اعمال شده پاسخ می دهد. این فاکتور در ترانزیستور هایی که باید در آن ها جریان الکتریکی به سرعت تغییر کند بسیار مهم می باشد.

فصل چهارم:

ترانزیستور های اثر میدان مبتنی بر نانو لوله های کربنی

مقدمه

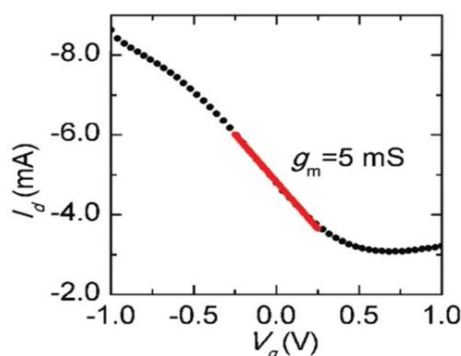
نانولوله های کربنی از زمان کشف آن ها در سال ۱۹۹۰ توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده اند. سودمندی آن ها برای کاربردهای مختلف از خواص فیزیکی آن ها ناشی می شود. حامل ها در نانولوله ها قابلیت تحرک بالایی در 10^6 A/cm^2 دارند. ظرفیت حمل جریان نانولوله ها نزدیک به 10^9 A/cm^2 دارند. نسبت جریان حالت روشن به خاموش به بزرگی 10^5 دارند. نانولوله های کربنی نسبت به پدیده مهاجرت الکترونیکی مقاومتر از مس هستند. نانولوله ها

رسانندگی نزدیکی به مرزهای بالیستیک ($R \approx 6.5k$ یا $G = \frac{4e^2}{h} \approx 155 \mu S$) دارند.

۱-۴ ترانزیستور های اثر میدان مبتنی بر نانو لوله های کربنی

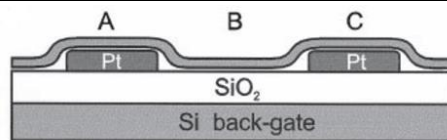
ترانزیستور اثر میدانی نانولوله کربنی به ترانزیستور اثر میدانی که از نانولوله کربنی منفرد یا از آرایه ای از نانولوله های کربنی به عنوان کانال استفاده می کند اشاره می کند. اولین بار در سال ۱۹۹۸ ساندر^۱ و آلون^۲ در ساخت نمونه هایی از ترانزیستور نانولوله کربنی را گزارش کردند. گاف انرژی نانولوله های کربنی به طور مستقیم تحت تأثیر قطر و کاپریتی آن هاست اگر این ویژگی ها قاب کنترل باشند ترانزیستور های نانولوله کربنی نامزد محتمل برای آیند^۳ ترانزیستورهای با مقیاس نانو خواهند بود. علاوه بر این به علت نبود مرز در ساختار کامل و توخالی استوانه نانولوله های کربنی پراکندگی مرزی وجود ندارد. نانولوله های کربن مواد شبه یک بعدی هستند که فقط اجاز^۳ پراکندگی رو به جلو و عقب را می دهند و مسافت آزاد میانگین پراکندگی کشسان^۳ نانولوله های کربنی در معمولا حد میکرومتر هستند. در نتیجه می توان حرکت شبه بالیستیک در نانولوله های کربنی مشاهده کرد. در ترانزیستورهای مبتنی بر نانولوله های کربنی جریان درین به صورت طی به ولتاژ گیت وابسته است.

^۱ Sander j.Tans^۲ Alwin R.M,Verschueren^۳ Elastic scattering



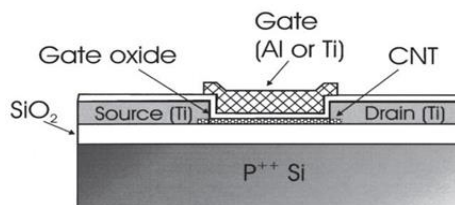
شکل ۴-۱ مشخصه جریان درین بر حسب ولتاژ گیت (جریان درین با ولتاژ گیت رابطه خطی دارد) مشخصات اندازه گیری شده ترانزیستور های اثر میدانی مبتنی بر نانولوله های کربنی عموماً با ترانزیستور های اثر میدانی نوع P شباهت دارد. به عنوان عایق گیت HfO_2 با توجه به ضریب دی الکتریک بالای آن مورد توجه است. برای اتصال سورس و درین از Al و Pd استفاده می کنند. با توجه به طبیعت یک بعدی کانال نانولوله کربنی، الکترواستاتیک آن کاملاً متفاوت از افزاره های سیلیکون توده^۱ است. و انتقال بار قابل ملاحظه ای از اتصالات فلزی (یا اتصالات نیمه هادی شدیداً آلاینده شده) به کانال نانولوله ای وجود خواهد داشت. اگر نانولوله ذاتی به اتصالات فلزی توده ای وصل شود اگر سد شاتکی کم باشد و ثابت عایق^۲ بالا باشد انتقال بار بزرگی حاصل می شود. هرچند اگر نانولوله ذاتی به اتصالات یک بعدی فلزی وصل شود چگالی بار روی نانولوله به طور شاخصی به الکترواستاتیک محیط وابسته است تا به خواص اتصالات فلزی کاهش ضخامت اکسید گیت و اندازه اتصال فاصله ای را که میدان سورس/درین در نانولوله نفوذ می کند را کم می کند در نتیجه به فروکش اثر کانال کوتاه^۳ کمک می کند و کارایی ترانزیستور را بهبود می دهد.

^۱ bulk^۲ dielectric^۳ Short channel effect



شکل ۲-۴ طرح یک ترانزیستور نانولوله کربنی با گیت در پایین

این تکنیک از اشکالات متعددی رنج می برد که آن را برای ساخت ترانزیستور غیر بهینه می کرد. اولین مشکل اتصال فلز بود که در واقع اتصال خیلی کوچکی به نانولوله کربنی داشت از آنجایی که نانولوله فقط روی نوارها قرار داشت ناحیه اتصال خیلی کوچک بود. همچنین با توجه طبیعت نیمه هادی نانولوله یک سد شاتکی در فصل مشترک فلز-نیمه هادی تشکیل می شد که مقاومت اتصال را افزایش می داد. مشکل دیگر از هندسه گیت ناشی می شد که اتصال کمی بین عایق گیت و نانولوله وجود داشت علاوه بر آن عایق گیت ضخیم بود و نیاز به ولتاژهای بالا برای کنترل جریان کانال وجود داشت.



شکل ۳-۴ طرح یک ترانزیستور نانولوله کربنی با گیت در بالا

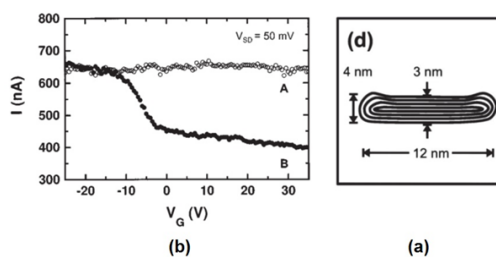
محققان برای حل مشکلات ترانزیستورهای back-gate به سمت روش های پیچیده تر برای تولید ترانزیستورهای top-gate حرکت کردند. در ابتدا محلولی از نانولوله های کربنی بر روی زیرلایه اکسید سیلیکون ته نشین می شوند. سپس نانولوله های منفرد توسط atomic force microscope یا scanning electron microscope مکان یابی می شوند. زمانی که یک نانولوله منفرد مجزا شد، اتصالات سورس و درین توسط high resolution electron beam

ترانزیستور نانولوله کربنی gate-all-around حالت بهبود یافته ترانزیستور top-gate است. در این افزاره به جای اینکه قسمتی از نانولوله که به گیت نزدیکتر است عایق شود تمام محیط نانولوله عایق شده است. انتظار می رود با این عمل کارایی الکتریکی و on/off ration افزاره بهبود و جریان نشتی کاهش یابد. در هندسه کواکسیال کنترل الکترواستاتیک گیت روی کانال بیشتر از حالت تخت است. ساخت قطعه با پیچاندن نانولوله در عایق گیت و اتصال گیت با atomic layer disposition گاز می شود. سپس محلولی از نانولوله های پیچیده شده در حالی که پیچیده ها از دو انتهای آن ها تراشیده شده بر روی زیرلایه عایق ته نشین می شوند. سپس اتصالات سورس درین و گیت روی دو انتهای نانولوله و پیچیده فلزی بیرونی نشست داده می شوند.

۲-۴ ترانزیستورهای اثر میدانی نانولوله کربنی چند جداره ای

پیش بینی می شود با افزایش قطر نانولوله شکاف انرژی کاهش یابد. از این رو انتظار می رود نانولوله های چند جداره با قطری بیش از ۱۰ نانومتر بیش تر رفتار فلزی از خود نشان دهند. با تغییر قطر نانولوله ها می توان خواص الکتریکی آن ها را عوض کرد. نانولوله های کربنی چند جداره با قطر بزرگ عموماً تاثیر گیت را نشان نمی دهند؛ اما تغییر شکل سا ختار آن ها می تواند سا ختار الکتریکی آن ها را به طریقی که رفتار ترانزیستوری نشان دهند تغییر دهد .

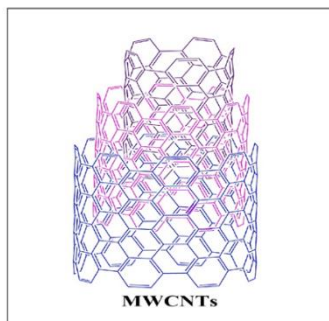
* (نانولوله های چند جداره ای با روش arc-discharge evaporation تولید شده اند).



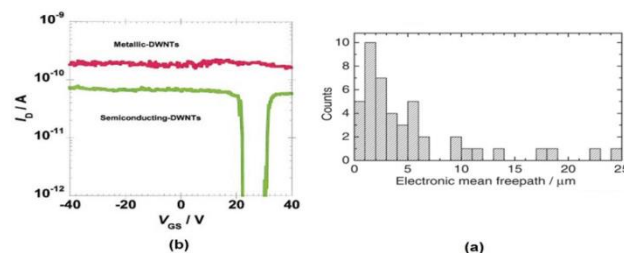
شکل ۴-۵ (a) طرح سطح مقطع MWNT فرو ریخته (b) منحنی I-VG نمونه بارز MWNT

(منحنی A) در مقایسه با MWNT فرو ریخته مشابه (منحنی B)

نتایج عملی به دست آمده نشان می دهد که الکترون ها در نانولوله های دوجداره می توانند بدون پراکندگی در فاصله های در حد میکرون حرکت کنند. و حرکت حامل ها در نانولوله ها دو جداره شبه بالیستیک هست و میانگین مسافت آزاد الکترون در حد چند میکرون می باشد.



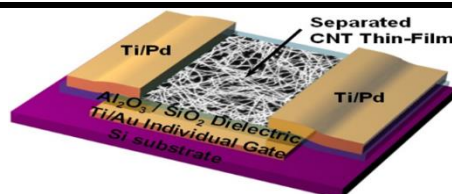
شکل ۴-۶ یک نانولوله چند جداره ای



شکل ۴-۶(a) هیستوگرام مسافت آزاد میانگین برای نمونه های نانولوله های دو جداره ای (b) مشخصه انتقال ترانزیستور اثر میدانی نوعی نانولوله های دو جداره ای فلزی (قرمز) و نیمه هادی (سبز) نانولوله های دو جداره ای نیمه هادی هم ویژگی های نوع P و هم ویژگی های نوع N نشان می دهند که به آن رفتار دوقطبی یکسان گفته می شود. به نظر می رسد اندازه ولتاژ قسمت خاموش منحنی دوقطبی یکسان به گاف انرژی نانولوله ها بستگی دارد همچنین گاف انرژی با قطر نانولوله رابطه عکس دارد. استنباط می شود که می توان اندازه قسمت خاموش را با قطر نانولوله تعیین کرد. نانولوله های دو جداره را می توان با روش arc discharge یا متلاشی کردن Fullerenece و ایجاد یک نانولوله درونی به دست آورد.

۳-۴ ترانزیستورهای فیلم نازک شبکه نانولوله کربنی و آرایه های ردیف شده مسطح نانولوله های کربنی

برای کاربردها برآوردهای نظری روی ترانزیستورهای اثر میدانی مبتنی بر نانولوله های کربنی نانولوله های منفرد بیان کنند احتمال دستیابی به فرکانس قطع در حد تراهرتز برای بهره جریان مدار اتصال کوتاه است. ولی از سوی دیگر آزمایش ها بیان کننده رنج بردن ترانزیستورهای نانولوله کربن منفرد از اثرات مفرط پارازیتی و مشکلات تطبیق امپدانس هستند. در تلاش برای تسکین محدودیت های نانولوله های منفرد می توان از ترانزیستور های فیلم نازک مبتنی بر شبکه نانولوله های کربنی استفاده کرد.



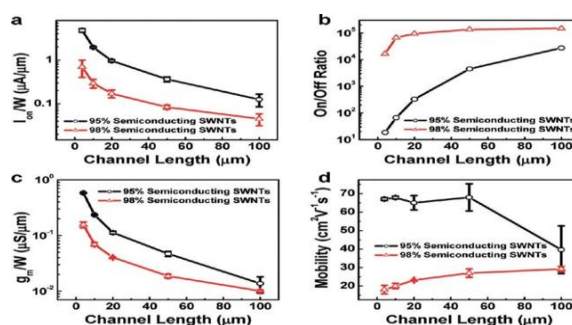
شکل ۴-۸ طرح یک back_gated SN-TFT

با اینکه بسیاری از کاربردها ادوات نانولوله های منفرد را به کار می برند ولی از مشکل غیر قابل بازتولید بودن رنج می برند. بازتولید نانولوله منفرد به علت تغییر کایرالیته و هندسه از یک نانولوله به نانولوله دیگر مشکل است. به هر حال در یک شبکه از نانولوله ها اثرات ناشی از تغییرات منفرد با میانگین کلی روی تعداد زیادی از نانولوله ها فرونشانده شده است. پس شبکه نانولوله ها قابل بازتولید انبوه هستند و ساخت آن ها کم هزینه و پربازده است که آن ها را برای استفاده های مختلف مطلوب می سازد. شبکه نانولوله ها به صورت وسیع برای کاربردهای متعددی همچون ترانزیستورهای فیلم نازک دیودها مدولاتورهای نوری سنسورهای شیمیایی و فشار پوشش های شفاف رسانا نمایشگرهای تخت الکترونیک شفاف و منعطف در حال مطالعه هستند. شبکه نانولوله ها حاوی تعداد قابل ملاحظه ای از نانولوله های فلزی و نیمه هادی می تواند به عنوان کانال در ترانزیستورهای اثر میدانی استفاده شود. فیلم های نازک نانولوله های کربنی تک جداره ای که دارای رسانندگی فوق العاده شفافیت و انعطاف پذیری هستند را می توان با روش هایی مثل solution based filtration یا CVD^۱ به دست آورد.

در مقایسه با سایر مواد رایج برای ترانزیستورهای فیلم نازک مانند سیلیکون آمورف یا مواد آلی فیلم نازک نانولوله ها دارای مزیت هایی همچون سازگاری فرآیندها با دمای اطاق شفافیت و انعطاف پذیری در کنار بازده بالا هستند. همه دست آورد های nanotube TFT که اشاره شد یک مشکل مشترک دارند و آن حضور هردوی نانولوله های فلزی و نیمه هادی با فلزی بودن

^۱ Chemical vapor deposition

درصد نانولوله هاست. برای کاربردهای الکترونیک می توان این مشکل را با پیش جدا سازی نانولوله ها با خلوص بالای نانولوله های نیمه هادی حل کرد. گروه تحقیقاتی IBM روش evaporation self_assemble و گروه تحقیقاتی دانشگاه کالیفرنیا روش wafer scale separated nanotube deposition را برای این کار استفاده کردند. مشاهدات نشان می دهد که شبکه های با ۹۵ درصد نانولوله های نیمه هادی برای کاربردهایی که نیاز به قابلیت تحرک بالایی (۶۷cm/Vs) دارند مانند کاربردهای آنالوگ مناسب هستند. شبکه های با ۹۸ درصد نانولوله های نیمه هادی برای کاربردهایی که نسبت جریان حالت روشن به خاموش بالایی می خواهند مناسب اند.



شکل ۴-۹ مطالعه آماری ۱۷۵ نمونه SN-TFT با استفاده از نانولوله های تفکیک شده با ۹۵٪ و

۹۸٪ نانولوله نیمه هادی، (a) چگالی جریان (b, I_{on}/w) میانگین نسبت (c, $on/off(I_{on}/I_{off})$)

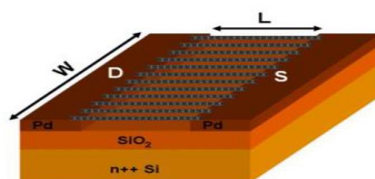
رسانندگی متقابل نرمالیزه (gm/W) و (d) قابلیت تحرک قطعه، (μ_{Divace}) بر حسب طول کانال برای TFT های تولید شده روی نانولوله های با (۹۵٪ منحنی سیاه) و (۹۸٪ منحنی قرمز) نانولوله های نیمه هادی برای ناحیه ترایود می توان قابلیت تحرک را به صورت:

$$\mu_{device} = \frac{LdI_d}{V_D C_{ox} W dV_g} = \frac{Lg_m}{V_D C_{ox} W} \quad (1-4)$$

محاسبه کرد که L و W طول و عرض کانال هستند. C_{ox} خازن گیت بر واحد ناحیه است.

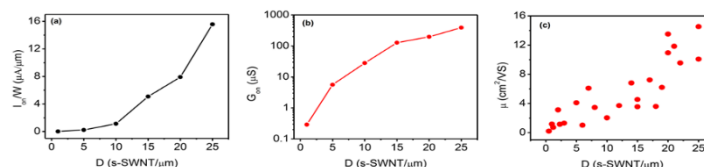
$$C_{\alpha} = \left\{ C_Q^{-1} + \frac{1}{2\pi\epsilon_0\epsilon_{\alpha}} \ln \left[\frac{\Lambda_0 \sinh \left(\frac{2\pi t_{\alpha}}{\Lambda_0} \right)}{R\pi} \right] \right\}^{-1} \Lambda_0^{-1} \quad (۲-۴)$$

$\frac{1}{\Lambda_0}$ چگالی نانولوله ها و CQ خازن کوانتومی نانولوله ها است. رسانندگی کل شبکه نانولوله ها توسط ها توسط مقاومت بین نانولوله ها ($100 \text{ M}\Omega$) محدود می شود که حدود برابر اندازه مقاومت خود نانولوله ها ($10 \text{ K}\Omega$) است. برای ادواتی که نانولوله های تک جداره ای منفرد به کار می گیرند حضور خازن های پارازیتی و عدم تطبیق امپدانس با سایر ادوات و غیر قابل باز تولید بودن را می توان از مشکلات مطرح شمرد. شاید بتوان با جاسازی مناسب و بهینه سازی اثرات پارازیتی را کمینه کرد ولی نتیجه کار نا معلوم خواهد بود. چون اساسا خازن نانوله به مراتب کوچکتر از خازن های پارازیتی است. با استفاده از شبکه نانولوله ها تاحدی می توان بعضی از مشکلات را حل کرد ولی مقاومت خروجی کم محدودیت توانایی سویچینگ به علت حضور نانولوله های فلزی کاهش رسانندگی توسط اتصالات بین نانولوله ها و جریان مبتنی بر نفوذ از مسائل مربوط به شبکه نانولوله ها است.



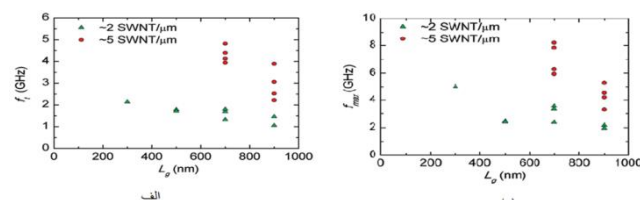
شکل ۴-۱۰ طرح ترانزیستور نانولوله های ردیف شده

کاهش یا حذف اتصال بین نانولوله ها به بهبود کارایی کمک می کند. پس هدف داشتن قطعه ای است که در آن نانولوله ها به قدری بلند باشند که سورس و درین را به هم وصل کنند و طوری تنظیم شده باشند که روی هم افتادگی نداشته باشند.



شکل (۴-۱۱) (a) تغییرات جریان حالت روشن نرمالیزه با چگالی نانولوله ها (b) منحنی رسانندگی حالت روشن قطعه بر حسب چگالی نانولوله ها در آرایه و (c) قابلیت تحرک بر حسب چگالی نانولوله ها در آرایه

آرایه های ردیف شد^۱ نانولوله ها مورد علاقه کاربردهای رادیوفرکانسی (Rf) نیز هستند زیرا امکان دستیابی فرکانس قطع بالایی در حد تراهرتز و مقاومت ورودی کوچک در حد اهم وجود دارد. ولی با توجه به طول گیت ($LG < 100 \text{ nm}$) و چگالی کم نانولوله ها ($> 25 \text{ CNTs}/\mu\text{m}$) ضخامت زیاد عایق گیت در نمونه های شناخته شده کارایی آن ها ب $f_T > 10 \text{ GHz}$ محدود شده است.

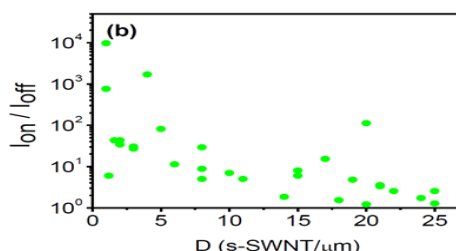


شکل ۴-۱۲ الف (f_T) بر حسب طول کانال در $V_d = -2.5 \text{ V}$ و $V_g = 0 \text{ V}$ ب (f_{max}) بر حسب طول کانال

در $V_d = -2.5 \text{ V}$ و $V_g = 0 \text{ V}$

اندازه گیری ها نشان داده که با افزایش چگالی نانولوله ها قابلیت تحرک افزایش می یابد ولی نسبت جریان حالت روشن به خاموش کاهش می یابد. کاهش نسبت جریان حالت روشن به خاموش با افزایش چگالی نانولوله ها ممکن است به علت حضور نانولوله های فلزی و اثر screening ولتاژ گیت باشد. در آرایه هایی که از مخلوط نانولوله های فلزی و نیمه هادی تشکیل شده اند نانولوله

های فلزی اثر غالب را در تعیین خواص الکتریکی دارند. برای به دست آوردن خواص مناسب تر برای ترانزیستور بهتر است نانولوله های فلزی به صورت انتخابی با شکست الکتریکی رفع شوند.



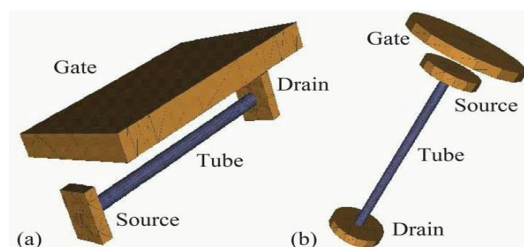
نقاط نسبت جریان on/off بر حسب تعداد SWNTs/μm شکل ۴-۱۳

۴-۴ اثر سد شاتکی در پیوند نانولوله کربنی با فلز اتصال

در حقیقت ترانزیستورهای اثر میدانی رایج برای سویچینگ^۱ موثر نیاز به اتصالات اهمی دارند در حالی که تخمین های تابع کار سدهای شاتکی قابل توجهی را در اتصال نانولوله-فلز اشاره می کند. هر جا که یک سد شاتکی ذاتی در اتصال باشد CNT_FET مانند یک ترانزیستور سد شاتکی غیر مرسوم عمل می کند. در ترانزیستورهای سد شاتکی رفتار ترانزیستوری بیشتر با تغییر مقاومت اتصال حاصل می شود تا با رسانندگی کانال با توجه به بالیستیک بودن انتقال در نانولوله کربنی جریان عمدتاً به سدهای انرژی بین اتصالات سورس و درین وابسته است. SB_FET ها با توجه به پتانسیل آن ها برای عمل در ابعاد خیلی کوچک به عنوان آینده محتمل تکنولوژی سیلیکون مطرح می شوند. شکل سد انرژی و همچنین عملکرد ترانزیستور شدیداً به هندسه افزاره وابسته است. شبیه سازی ها نشان می دهند که شکل اتصال الکترودها تأثیر زیادی روی سد شاتکی^۲ دارد و می تواند برای بهینه سازی افزاره استفاده شود.

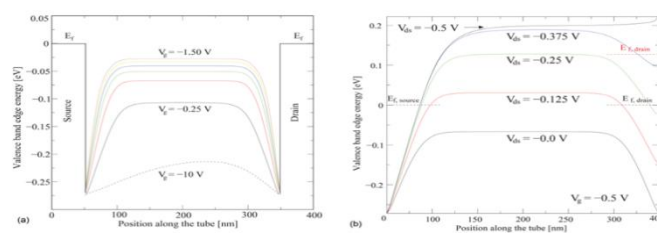
^۱ Switching

^۲ Schottky barrier



۴-۱۴ (a) شکل ساختارهای افقی^۱ و (b) محوری^۲ برای ترانزیستورهای نانولوله کربنی

دو هندسه رایج برای CNT_FET در شکل بالا نمایش داده شده است. درحالی که ساختار افقی ترانزیستور اثر میدانی نانولوله کربنی عملکرد خوبی به همراه نسبت I_{off}/I_{on} بالا نشان می دهد ولی با چالش های مهمی برای تولید پذیر بودن مواجه است. ترانزیستورهای نانولوله کربنی تراز محوری شده مشخصات و خیم تری نشان می دهند در حالی که برای مجتمع سازی مقیاس بالا مناسب هستند. در ترانزیستور اثر میدانی نانولوله کربنی محوری اتصال گیت در بالای اتصال درین قرار می گیرد که با اکسید نازکی از آن جدا شده است. در حالی که ساختار محوری جای پای بسیار کوچکتری در مقایسه با نانولوله های تراز افقی شده دارند ولی خازن تزویج ضعیف بین گیت و نانولوله از کاستی های آن حساب می شود.



۴-۱۵ (a) لبه نوار ظرفیت در CNT_FET افقی در ولتاژهای گیت متفاوت. خط چین نمودار نوار CNT_FET محوری را در $V_g = -1.0$ V نشان می دهد. (b) لبه نوار ظرفیت برای CNT-FET افقی با ولتاژهای درین مختلف فرونشانی سد شاتکی در اتصال درین قابل مشاهده است.

^۱ lateral

^۲ axial

در شکل بالا لبه نوار ظرفیت را در امتداد نانولوله برای افزاره افقی و محوری در $V_{ds}=0$ نمایش می دهد. با توجه به این که مشخصات اندازه گیری شده برای اکثر CNT_FET ها شبیه ترانزیستورهای اثر میدانی نوع P مرسوم است. در شکل (۱۵-۴) بر روی انتقال حفره ها و لبه نوار ظرفیت در نانولوله متمرکز می شود. یک گاف انرژی 0.6 eV و نانولوله های بدون ناخالصی فرض شده است. نانولوله با HfO_2 پوشانده شده و به سورس و درین وصل Al شده است. در مورد CNT_FET افقی میدان گیت به شدت نوار ظرفیت را تحت تاثیر قرار می دهد. با میزان کردن ولتاژ گیت از 0.25 V تا 1.5 V ، نوار ظرفیت به سمت بالا تا سطح فرمی الکترودهای سورس و درین انتقال یافته است که به صورت موثری سد انرژی را برای حفره ها کاهش می دهد. در ولتاژهای گیت نسبتاً کم حامل ها باید بر سد انرژی بزرگی غالب بیایند. جریان تونل زنی کوچک است و انتشار ترمیونیک غالب است. افزایش ولتاژ گیت سبب کاهش انرژی سد تا غلبه تونل زنی بر انتشار ترمیونیک^۱ می شود. ولتاژ آستانه^۲ V_{th} می تواند به صورت ولتاژ لازم برای انتقال نوار ظرفیت به بالا تا فراتر رفتن جریان تونل زنی از انتشار ترمیونیک تعریف شود. جریان به محض اینکه سد دون کاملاً فرونشانده شود اشباع می شود. پس از این تمام الکترون هایی که می توانند از سد سورس تونل بزنند در جریان شرکت خواهند کرد. از سوی دیگر افزاره محوری حتی برای ولتاژ گیت این رفتار را نشان نمی دهد.

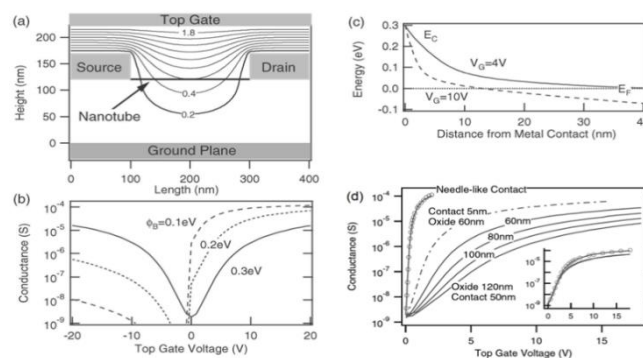
در شکل فوق (b) وابستگی لبه نوار های انرژی به ولتاژ درین در ولتاژ گیت ثابت $V_g = -0.5\text{ V}$ بررسی شده است. در ولتاژ درین صفر سد تونل زنی نیرومند است و انتشار ترمیونیک بر تونل زنی غلبه می کند. زمانی که V_{ds} کاهش یابد لبه نوار در سمت درین به بالا حرکت می کند و سد موثر دیده شده توسط حفره ها یی که از سمت سورس می آیند کم می شود. این سبب افزایش جریان

^۱ Thermionic emission

^۲ Threshold voltage

تونل زنی می شود. در ولتاژهای درین زیر سد تونل زنی درین کاملاً ناپدید می شود. سد انرژی سورس توسط پتانسیل اتصال سورس ثابت شده و به افزایش نسبتاً غیر حساس است. این سبب مشخصه خروجی می شود که توسط سه ناحیه قابل تمایز توصیف می گردد: یک ناحیه نمایی که انتشار ترمیونیک بر تونل زنی غلبه می کند یک ناحیه طی که تونل زنی غالب است و سد درین کاهش می یابد و یک ناحیه اشباع با جریان ثابت.

برای افزاره محوری میدان گیت توسط اتصال سورس زیرین به مقدار زیادی مسدود می شود. حتی با اعمال ولتاژهای گیت نسبتاً بالا اثر در سد بین سورس و درین ضعیف است. حامل های بار مجبورند بر سد پتانسیلی با دو قله در اتصالات غلبه کنند که تقریباً در سرتاسر نانولوله کربنی ثابت است. در این حالت V_{th} هیچ موقع قابل دستیابی نیست و انتشار ترمیونیک در تمام ولتاژها بر تونل زنی غلبه می کند. نتیجه یک مشخصه خروجی است که یادآور مشخصه ترانزیستورهای سد شاتکی مرسوم است.



شکل ۴-۱۶

(a) هندسه یک SB_FET با اتصالات فلزی در چپ و راست، یک صفحه زمین، یک گیت فوقانی خطوط مرزی پتانسیل الکترواستاتیک را برای ولتاژ گیت فوقانی ۲V نشان می دهند. (b) رسانندگی بر حسب ولتاژ گیت در دمای اطاق برای سدهای شاتکی متفاوت. ارتفاع سد شاتکی برای الکترون ها در هر منحنی بیان شده است. (c) نوار انرژی نانولوله در نزدیکی اتصال برای

ولتاژهای ۱۰ و ۴ ولت. (d) تاثیر هندسه بر مشخصه افزاره. چهار منحنی دست راستی مربوط به ضخامت های متفاوت اکسید بالای نانولوله هستند، بقیه پارامترها مانند شکل (a) هستند (منحنی مربوط به ۱۰۰ nm همانند شکل برای ارتفاع سد شاتکی ۰.۳ eV است). منحنی نقطه-تیره رسانندگی را زمانی که ضخامت اتصال به ۵ nm کاهش می یابد نشان می دهد. منحنی سمت چپ مربوط به اتصال سوزن مانند و گیت استوانه ای است. وصله الحاقی همان منحنی ها را نشان می دهد ولی برای هر منحنی ولتاژ گیت تا جایی که رسانندگی $V(8-10)$ است مقیاس شده است. (منحنی های دست راستی در این مقیاس قابل تمایز نیستند).

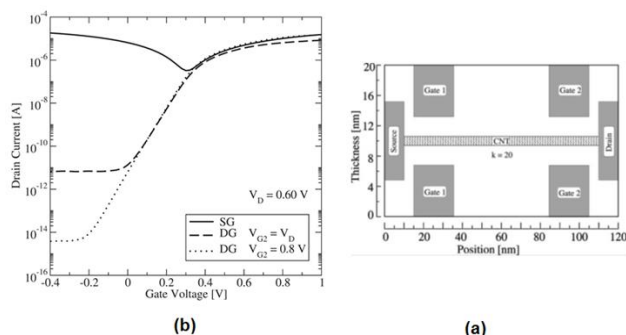
شکل (b) رسانندگی را برای ارتفاع های متفاوت سد شاتکی نشان می دهد. زمانی که سطح فرمی فلز به وسط گاف انرژی نانولوله می افتد (که توسط تابع کار مربوط تعیین می شود)، رسانندگی در ولتاژ صفر درین یک وابستگی متقارن به ولتاژ گیت نمایش می دهد. رسانندگی قاب توجه در ولتاژهای گیت $V(10-5)$ وجود دارد ولی روشن شدن از ایده آل خیلی فاصله دارد با رسانندگی کاملاً زیر مقدار بیشینه حتی در ۲۰۷ مکانیزم اساسی برای عملکرد ترانزیستور در شکل فوق بیان شده است. در ۴ ولت یک چگالی ذاتی حامل ها در کانال وجود دارد ولی جریان توسط سد شاتکی مسدود شده است. افزایش اختلاف ولتاژ بین الکترودهای سورس و درین موجب میدان الکتریکی بزرگی در اتصال کاهش عرض سد شاتکی می شود و اجازه تونل زنی به کمک حرارت را می دهد. اگر سطح فرمی فلز در وسط گاف انرژی نانولوله نیافتد ارتفاع سد شاتکی برای الکترون ها و حفره ها متفاوت است، و در نتیجه منحنی رسانندگی نامتقارن می شود. منحنی خط تیره و نقطه در شکل فوق (b) هر موقع سد شاتکی به اندازه کافی بزرگ باشد تا به صورت موثر جریان را مسدود کند افزاره به عنوان SB_FET عمل می کند. برای سدهای شاتکی خیلی کوچک مانند افزاره معمولی (محدود شده با کانال) عمل می کند. مساله دیگر نقش بحرانی هندسه افزاره است. شکل فوق (d) رسانندگی را به عنوان تابعی از ولتاژ گیت برای هندسه های گوناگون افزاره نشان می دهد.

همانطور که انتظار می رود روشن شدن برای اکسیدهای نازک بهتر است. با این وجود حتی برای نازک ترین اکسید (60 nm) افزاره ولتاژ گیت بزرگتری برای روشن شدن کامل نیاز دارد. در FET های استاندارد رسانندگی باپتانسیل الکترواستاتیک (و چگالی حامل ها ناشی از آن) در کانال کنترل می شود؛ پس کلید بهبود کارایی افزایش خازن بین کانال و گیت با کاهش ضخامت اکسید است. در تضاد با این، برای SB_FET کارایی اساسا با میدان الکتریکی در اتصال کنترل می شود. یک اتصال تیزتر سبب تمرکز میدان و در نتیجه میدان بزرگتر در محل اتصال می شود. پس کارکرد افزاره با تغییر هندسه اتصالات به شدت بهبود می یابد علاوه بر وابستگی مشابه به فاصله گیت. برای مثال اگر ضخامت الکتروود فلزی از 5 nm تا 50 nm کاهش یابد بهبود برجسته ای در عملکرد افزاره وجود خواهد داشت. ولتاژ آستانه کمتر و رسانندگی به مقدار بیشینه در ولتاژهای پایین تر گیت می رسد. این بهبود برای رسانندگی محدود شده با کانال اتفاق نخواهد افتاد. مکان نسبی اتصال و گیت هم اهمیت دارد اکثر آزمایشات گزارش شده در حقیقت از یک گیت تحتانی زیر اکسید ضخیم استفاده کرده اند ($100\text{ nm} - 1000$) از شکل فوق (a) پیداست که میدان الکتریکی در سمت اتصال فلز- نانولوله وقتی بزرگتر است که گیت در طرفی از الکتروود باشد که نانولوله هست. این توجیح می کند که چرا با گیت تحتانی حتی با اکسید ضخیم تنظیم ذاتی رسانندگی حاصل شده است. برای سویچینگ خوب در ولتاژ کم گیت نیاز به بیشینه کردن میدان الکتریکی در اتصال برای ولتاژ داده شده است. پس هندسه ایده آل باید اتصال سوزن مانند تیز با گیت کمربندی باشد. الکتروود می تواند سیم فلزی یا نانولوله فلزی باشد.

۴-۵ ساختارهای بهبود یافته

۴-۵-۱ الف) ترانزیستور نانولوله کربنی با دو گیت

گاهها به علت رفتار امبی پولار^۱ جریان حالت خاموش به اندازه غیر قابل تحملی زیاد می شود. علت کنترل تزریق حامل ها در اتصالات سورس و درین با یک گیت است، از این لحاظ افزایش تزویج گیت و نانولوله جریان حالت خاموش را نیز زیاد می کند. برای کاهش اثر امبی پولار ساختار دو گیتی برای ترانزیستور نانولوله کربنی پیشنهاد می شود. با استفاده از این ساختار تزریق جریان در اتصالات سورس و درین به صورت جداگانه قابل کنترل است.

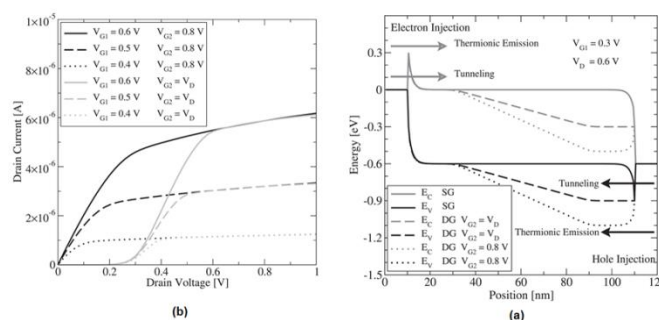


شکل ۴-۱۷ (a) یک ساختار دوگیتی را که در بالا پیشنهاد شده نشان می دهد. گیت اول تزریق حامل ها از سورس را کنترل می کند که جریان حالت روشن را تعیین می کند و گیت دوم تزریق حامل ها از درین را کنترل می کند که جریان حالت خاموش را تعیین می کند. در نتیجه در ساختار دوگیتی با افزایش تزویج بین گیت ها و نانولوله جریان حالت روشن زیاد خواهد شد در حالی که جریان حالت خاموش کم می شود گیتی با افزایش تزویج بین گیت ها و نانولوله جریان حالت روشن زیاد خواهد شد در حالی که جریان حالت خاموش کم می شود (b). مشخصه I-V برای ساختارهای با یک گیت SG و دوگیت DG

اگر ولتاژ درین به گیت دوم اعمال شود به ازای هر ولتاژ درین لبه نوار انرژی در نزدیکی اتصال تخت خواهد بود. در نتیجه جریان تونلینگ حفره ها در اتصال درین کاهش می یابد و فقط مقدار

^۱ Ambipolar

کمی جریان انتشار ترمیونیک^۱ حفره ها باقی می ماند. در حالی که تزریق الکترون ها از سورس توسط گیت اول کنترل می شود گیت دوم جریان پارازیتی حفره ها را اتصال درین فرو می نشاند. برای ادوات نوع P باید ولتاژ منفی به گیت اول اعمال شود در نتیجه تزریق حفره در اتصال سورس قابل کنترل می گردد و گیت دوم جریان پارازیتی الکترون ها را در اتصال درین فروکش می کند.



شکل ۴-۱۸ (a) پروفایل لبه نوار سا ختارهای با یک گیت SG و دو گیت DG) مشخصه برای سا ختار

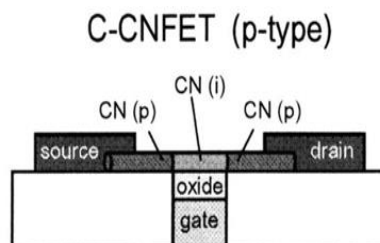
با دو گیت DG

اگر ولتاژ اعمالی به گیت دوم بیشتر از ولتاژ درین باشد انتشار ترمیونیک حفره ها در اتصال درین به صورت نمایی کاهش می یابد و در نتیجه جریان حالت خاموش کمتری قابل دستیابی می شود. اگر گیت دوم در ولتاژ درین بایاس شده باشد تا زمانی که ولتاژ درین به ولتاژ گیت اول نرسیده جریان درین افزایش چشمگیری نخواهد داشت. علت این رفتار مواجه شدن حامل های تزریقی در اتصال سورس با سد ضخیمی در نزدیکی اتصال درین در زمانی که ولتاژ درین کمتر ولتاژ گیت اول است می باشد. اگر گیت دوم در ولتاژی بالاتر از ولتاژ ماکزیمم درین بایاس شده باشد حامل های تزریق شده در اتصال سورس سد نازکی را حتی در ولتاژ های پایین درین می بینند در حالی که حفره ها در اتصال درین با سد ضخیمی مواجه می شوند. در ساختار دو گیتی با کاهش فاصله گیت ها خازن پارازیتی بین گیت ها افزایش می یابد که عامل موثری در پاسخ فرکانسی قطعه است.

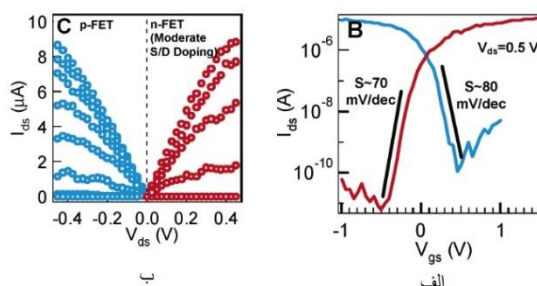
^۱ Thermionic emission

۵-۴-۲ ب C-CNFET^۱

یک طرح پیشنهادی برای ادوات مبتنی بر نانولوله کربنی معرفی پروفایل ناخالصی P/i/n یا n/i/n طول کانال نانولوله است که مناطق ناخالصی نزدیک اتصالات هستند و فقط قسمت بدون ناخالصی گیت دار شده است که به آن C-CNFET گفته می شود. این ساختار یک مرسوم MOSFET نوع p یا نوع n را با این تفاوت که ناحیه گیت شده بدون ناخالصی است تشکیل می دهد.



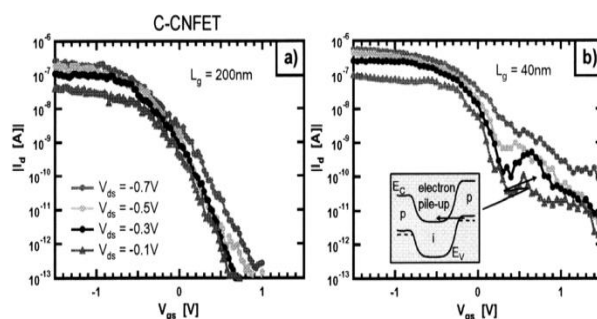
شکل ۴-۱۹ ساختار p/i/p برای (nano tube mosfet cntfet)



شکل الف) منحنی $I_{gs_V_{gs}}$ برای Mosfet نانولوله قبل از افزودن ناخالصی (آبی) و بعد از افزودن ناخالصی (قرمز). قبل از ناخالصی برای P-FET ولتاژ V_{15} به گیت پایین اعمال شده است تا به صورت الکترواستاتیکی نوع P برای اتصالات حاصل شود. برای N-FET گیت پایین در طول اندازه گیری زمین شده است (اتصالات با ناخالصی تغلیظ شده اند). الف) مشخصه $I_{ds}-V_{ds}$ افزاره قبل (آبی)، pFET و بعد (قرمز) nFET از افزودن ناخالصی. از منحنی جریان کم تا بالا ولتاژ گیت بالا از ۰.۲ تا ۱ ولت با قدن های برای و از تا با قدم ۰.۲ های برای nFET.

^۱ Conventional CNFET

در ادامه به مزیت های استفاده از C_CNFET اشاره می شود: با توجه به پروفایل ناخالصی تزریق حامل های اقلیت (برای مثال حفره ها در نوع n) از سمت درین فروکش می کند و خواص افزاره یک قطبی با جریان حالت خاموش کم می تواند حاصل شود. از آنجایی که سویچینگ شامل ناحیه نزدیک به الکتروود فلزی نیست I_{off} مانند Mosfet معمولی توسط انتشار حرارتی^۱ به جای تونلینگ مستقیم موجود در SB_CNFET محدود شده و مقادیر در حد 60 mV/dec برای subthreshold slop قابل دستیابی است. در حقیقت در شرایط خاصی توده شدن (pile_up) الکترون (حفره) در ناحیه گیت شده نوع p (نوع n) اتفاق می افتد. در مورد C_CNFET نوع p الکترون ها از سمت درین تزریق می شوند و نمی توانند قطعه را از سمت سورس ترک کنند. این بارها باعث می شوند گیت نتواند به صورت موثر نوارهای انرژی را به منظور خاموش کردن قطعه حرکت دهند. هرچه ولتاژ گیت بیشتر شود این اثر افزایش می یابد. این پدیده ممکن است ترانزیستور هایی که طول آن ها شدیداً کاهش یافته زیان آور باشد.

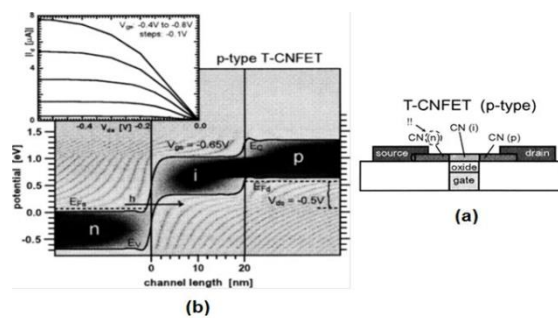


شکل ۴-۲۰ نتایج تجربی برای دو C_CNFET با طول گیت های ۲۰۰ و ۴۰ نانومتر با ضخامت اکسید یکسان. در ترانزیستور با طول گیت کمتر اثر انبار شدن بار مشاهده می شود.

۵-۴-۳) TUNNELING CNTFET

^۱ Thermionic emission

به منظور حل مشکل توده شدن (pile_up) در ترانزیستورهای C_CNFET پیشنهاد می شود از پروفایل نا خالصی در n/i/p طول نانولوله استفاده شود. با توجه به نبود دره در نوار انرژی T_CNFET توده شدن بار در ناحیه گیت شده اتفاق نمی افتد.



شکل ۴-۲۱ (a) ترانزیستور T_CNFET با پروفایل ناخالصی n/i/p در طول نانولوله (b) نوارهای

هدایت و رسانش برای T_CNFET

فصل پنجم:

**نانوربن های گرافنی و مقدمه ی بر ساخت ترانزیستور اثر میدانی با
نانوربن های گرافنی**

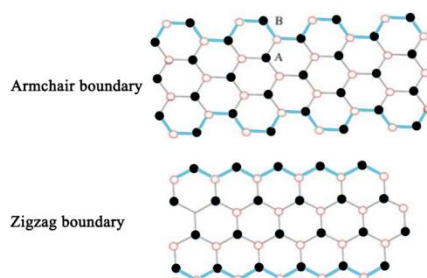
مقدمه

گرافن ساختار دو بعدی از یک لایه منفرد شبکه لانه زنبوری کربنی می باشد. گرافن به علت داشتن خواص فوق العاده در رسانندگی الکتريکی و رسانندگی گرمایی، چگالی بالا و تحرک پذیری حامل های بار، رسانندگی اپتیکی و خواص مکانیکی به ماده ای منحصر به فرد تبدیل شده است. این سامانه جدید حالت جامد به واسطه این خواص فوق العاده به عنوان کاندید بسیار مناسب برای جایگزینی سیلیکان در نسل بعدی قطعه های فوتونیک و الکترونیک در نظر گرفته شده است و از این رو توجه کم سابقه ای را در تحقیقات بنیادی و کاربردی به خود جلب کرده است. طول پیوند کربن - کربن در گرافن در حدود 0.142 نانومتر است. ساختار زیر بنایی برای ساخت نانو ساختارهای کربنی، تک لایه گرافن است که اگر بر روی هم قرار بگیرند توده سه بعدی گرافیت را تشکیل می دهند که برهم کنش بین این صفحات از نوع واندروالسی با فاصله بین صفحه ای 0.335 نانومتر می باشد.

۱-۵ نانوربن های گرافنی^۱

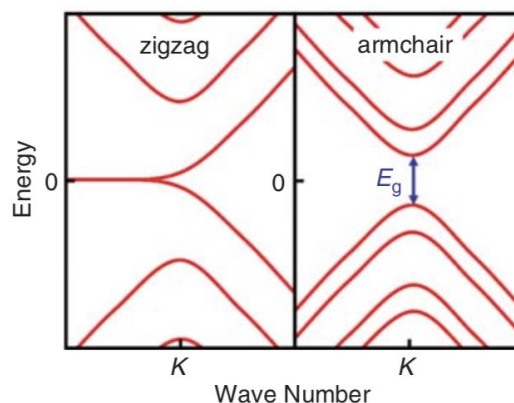
گرافن ماده ای است که در آن تنها یکی از این لایه های گرافیت وجود دارد و به عبارتی چهارمین الکترون پیوندی کربن، به عنوان الکترون آزاد باقی مانده است. یک نانوربن گرافن (GNR) یک ورقه گرافن تک لایه با عرض عرضی کوچک به ترتیب 50 نانومتر یا کم تر است که بسیار کوچک تر از طول طولی آن است. به طور خاص، شرایط مرزی معادله دیراک می تواند منجر به رفتار رسانا یا نیمه رسانا شود. دو نوع GNR وجود دارد Armchair و zigzag نامیده می شوند.

^۱ Graphene Nanoribbons



تصویر ۱-۵ (بالا) یک GNR آرمچیر و (پایین) یک GNR زیگزاگ

به طور خاص، GNR های زیگزاگ مانند رساناهایی بدون شکاف باند رفتار می کنند، در حالی که GNR های آرمچیر به دلیل محصور شدن الکترون ها در ساختار، دارای شکاف باند هستند و می توانند بسته به تعداد اتم های کربن در عرض GNR، مانند رساناها رفتار کنند.

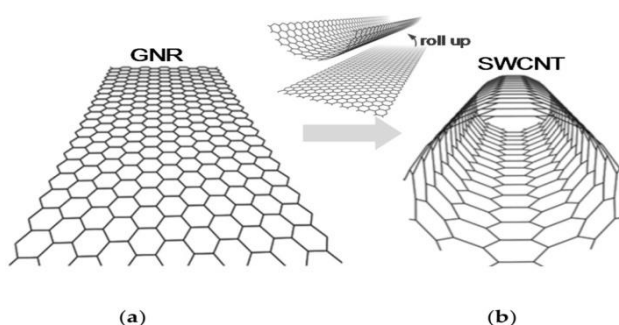


تصویر ۲-۵ نموداری از رابطه پراکندگی انرژی در مجاورت یک نقطه دیراک برای زیگزاگ GNR (چپ) و یک آرمچیر GNR (راست). در این نمودار، نوار انرژی با E_g نشان داده می شود. زیگزاگ GNR دارای شکست صفر است و رفتار رسانایی را نشان می دهد. از سوی دیگر، صندلی راحتی GNR دارای نوازی است که به عرض آن بستگی دارد.

از لحاظ نظری پهنای باند یک GNR به طور معکوس با عرض آن متناسب است. $\Delta \propto \frac{1}{W}$ که در آن W عرض GNR است. ساختارهای GNR به دلیل پراکندگی فونون در لبه ها، توانایی های

کمتری نسبت به گرافین تک لایه از خود نشان می دهند. ساختار یک GNR ارتباط نزدیکی با ساختار نانولوله کربنی (CNT) دارد که آلوتروپ دیگری از کربن است.

همانطور که در شکل زیر نشان داده شده است، یک CNT ساختار استوانه ای با شعاع کوچک دارد، که ممکن است از نظر توپولوژیکی به عنوان یک GNR نورد شده در نظر گرفته شود. در واقع، یکی از روش هایی که می توان GNR ها را با آن ساخت، استفاده از نانولوله های کربنی با قابلیت تجزیه شیمیایی است. روش های دیگر ساخت GNR ها شامل لیتوگرافی پرتو الکترونی و لایه نشانی شیمیایی گرافیت است.



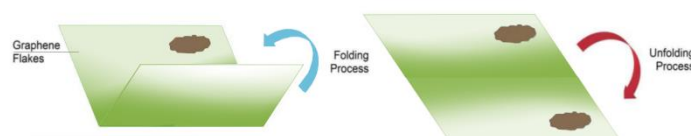
تصویر ۳-۵ (a) تصویری از یک (GNR) تصویری از یک نانولوله کربنی تک دیواره (SWCNT).
ظاهرا CNT را می توان به عنوان یک GNR رول شده در نظر گرفت.

۲-۵ سنتز گرافن^۱

شناخته شده ترین و قدیمی ترین تکنیک برای سنتز گرافن، لایه نشانی مکانیکی است (که در اصطلاح به آن تقسیم مکانیکی یا، کم تر به طور رسمی، روش نوار اسکاچ گفته می شود). در واقع، این تکنیکی بود که توسط Geim و همکارانش در سال ۲۰۰۴ هنگامی که آن ها لایه های گرافن را بر روی SiO_2/Si نازک جدا کردند، مورد استفاده قرار گرفت. مراحل اصلی این فرآیند به صورت زیر است. یک قطعه کوچک گرافیت از یک نمونه گرافیت بزرگ تر به دست می آید.

^۱ Synthesis Techniques

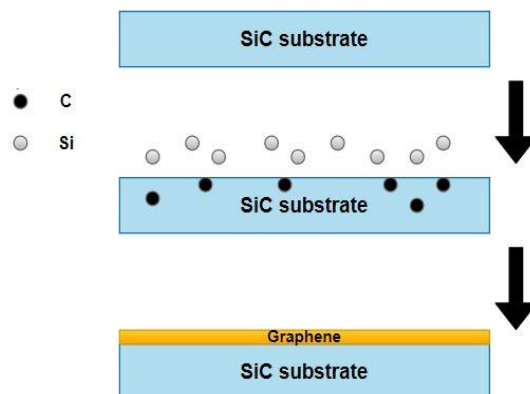
به طور معمول، نمونه گرافیت مورد استفاده در این فرآیند، گرافیت پیرولیتیک بسیار منظم (HOPG) است. سپس قطعه کوچک گرافیت به سطح یک نوار چسب چسبانده می شود که برای جدا کردن دانه های گرافیت از نمونه گرافیت با تا کردن و باز کردن مکرر نوار چسب استفاده می شود. سپس لایه های گرافن به سطح یک بستر صاف مانند SiO_2/Si منتقل می شوند. و می توان با مشاهده الگوهای تداخل نور با استفاده از میکروسکوپ نوری، آن ها را تایید و مکان یابی کرد. این فرآیند در شکل زیر نشان داده شده است.



تصویر ۴-۵ طرحی از فرآیند لایه نشانی مکانیکی. نوار چسب تا شده و باز می شود و به تدریج دانه های گرافن را جدا می کند.

مزیت لایه نشانی^۱ مکانیکی این است که گرافین با کیفیت بالا با تحرک بالا و عیوب کم تولید می کند، بیش ترین تحرک ثبت شده بیش از $2 \times 10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ سانتی متر مربع در دمای اتاق را دارند. اشکال اصلی این روش این است که مقیاس پذیر نیست و مقادیر نسبتاً کمی گرافن تولید می کند بنابراین برای کاربردهای صنعتی مناسب نیست. روش دیگر برای سنتز گرافن، رشد اپیتاکسیال خلاء روی SiC است. در این فرآیند، یک ویفر سیلیکونی با SiC پوشش داده می شود. که در دمای ۱۱۰۰ درجه انجام می شود.

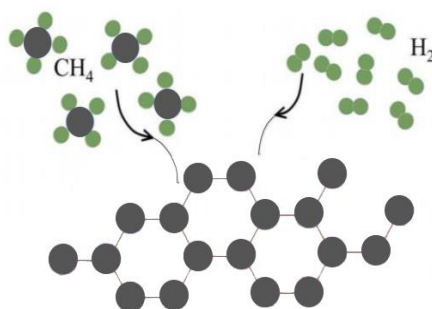
^۱ Epitaxy



تصویر ۵-۵ مراحل اصلی لایه نشانی گرافن بر روی بستر SiC را نشان می دهد.

این تکنیک می تواند نمونه های گرافینی با قابلیت تحرک تا $2 \times 10^3 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ سانتی متر مربع را در دمای اتاق تولید کند. همچنین نشان داده شده است که تحرک بیش از $1.1 \times 10^4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ می تواند پس از حذف پیوندهای سیلیکونی آویزان از نمونه به دست آید. آپتاکسی به طور اجتناب ناپذیری منجر به تحرک کم تر و نقص های ساختاری بالاتر نسبت به شکاف مکانیکی ناشی از سوختن کربن در دماهای بالا می شود که منجر به آلوده شدن نمونه توسط اتم های هیدروژن و اکسیژن می شود. با این حال، این تکنیک لایه نشانی مکانیکی مقیاس پذیری بیشتری را ارائه می دهد.

رایج ترین تکنیک مورد استفاده در صنعت برای سنتز گرافن، رسوب دهی تبخیر شیمیایی (CVD) است. این تکنیک شامل مخلوط کردن هیدروژن و یک منبع گازی کربن مانند CH_4 یا C_2H_2 بر روی یک بستر از مس یا نیکل در یک محفظه است. در دماهای بالا (بیش از ۱۰۰۰ درجه سانتی گراد)، کاتالیزور پیوندهای موجود در منابع گازی را می شکند و هیدروژن سوزانده می شود و رسوبات گرافینی بر روی سطح بس تر کاتالیتیک باقی می ماند. این فرآیند در شکل زیر نشان داده شده است.



تصویری ۵-۶ از نحوه رشد گرافین با استفاده از روش CVD

با استفاده از بستر بزرگتر می توان گرافن بیشتری تولید کرد. این باعث می شود که CVD مقیاس پذیرتر از سایر تکنیک های سنتز گرافن باشد. علاوه بر این، هزینه CVD کمتر از لایه نشانی خلاء و لایه برداری مکانیکی است. این امر باعث می شود که CVD نسبت به سایر تکنیک ها در صنعت مناسب تر باشد. نقطه ضعف استفاده از CVD برای سنتز گرافن وجود عیوب نقطه ای، مرز دانه ها و آلاینده های سطحی در عملکرد است که همه اینها معمولاً منجر به تحرک کمتری نسبت به نمونه گرافن تولید شده از طریق اپیتاکسی یا لایه برداری می شوند.

۳-۵ مهندسی شکاف باند^۱

مدل گرافن ارائه شده تاکنون یک لایه دو بعدی از اتم های کربن در یک شبکه لانه زنبوری با وسعت فضایی بی نهایت است. قبل از بحث در مورد FET های گرافن، مهم است که ساختارهای دیگری را که با مدل گرافن مرتبط هستند بررسی کنیم.

شکاف باند صفر گرافن در زمینه الکترونیک دیجیتال نامطلوب است. بنابراین با افزودن مواد ناخالص به گرافن می تواند منجر به شکاف باند غیر صفر شود. با این حال، شکاف های باند تولید شده از طریق دوپینگ عموماً به راحتی قابل تنظیم نیستند. ظاهراً مهندسی شکاف باند در گرافن بسیار مهم است و حوزه ای فعال و در حال پیشرفت محسوب می شود. با این حال، یک توازن وجود

^۱ Bandgap Engineering

دارد زیرا این ساختارها توانایی های تحرک کمتری نسبت به گرافین تک لایه از خود نشان می دهند.

۴-۵ ترانزیستور های اثر میدان گرافین

در دهه گذشته شاهد رشد سریعی در حوزه تحقیقات گرافین و کاربرد آن در وسایل الکترونیکی جدید بوده ایم. با فراگیر شدن قانون مور، نیاز به فن آوری پسا سیلیکون در صنعت بیش از پیش آشکار می شود. علاوه بر این، تکنولوژی های موجود برای پیاده سازی آشکارسازها و گیرنده های ترانزیستور که برای کاربردهای متعددی از جمله تصویربرداری پزشکی و اسکن امنیتی مورد نیاز هستند، کافی نیستند. گرافین به عنوان یک کاندید بالقوه کلیدی برای جایگزینی سیلیکون در فن آوری CMOS موجود و همچنین تحقق ترانزیستورهای اثر می دانی تشخیص ترانزیستور، به دلیل ویژگی های الکترونیکی قابل توجه آن، با توانایی های الکترونیکی مشاهده شده تا $2 \times 10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ در نمونه های گرافین معلق در نظر گرفته می شود. این گزارش به بررسی فیزیک و خواص الکترونیکی گرافین در زمینه پیاده سازی ترانزیستور گرافین می پردازد. تکنیک های رایج مورد استفاده برای سنتز گرافین، مانند لایه نشانی مکانیکی، رسوب بخار شیمیایی، و رشد آنروپی محوری بررسی و مقایسه می شوند. یکی از چالش های مرتبط با واقعی کردن ترانزیستورهای گرافین این است که گرافین نیمه فلزی است و شکاف باند صفر دارد که در زمینه کاربردهای الکترونیک دیجیتال مشکل ساز است.

۵-۵ ترانزیستورهای گرافینی پیشرفته^۱

با توجه به اشباع قانون مور، نیاز مبرمی به فن آوری پس از سیلیکون در صنعت وجود دارد و ترکیب مواد مبتنی بر گرافین در فن آوری های CMOS موجود یک راه حل بالقوه محسوب می شود. علاوه بر این، یکی از چالش های مدرن مهندسی RF طراحی مدولاتورها و آشکارسازهایی است

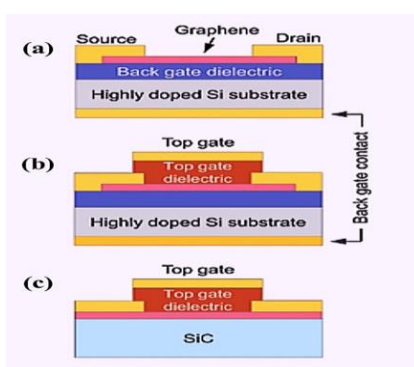
^۱ State-of-the-Art Graphene FETs

که در شکاف تراهرتز دست نخورده کار می کنند (فرکانس هایی از ۱ THz تا ۱۰ THz). اگرچه توانایی های دیگر دستگاه های جدید به ترتیب $1 \times 10^4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ است، که بالاتر از دستگاه های CMOS معمولی ساخته شده از سیلیکون است، در حال حاضر به دلیل هزینه بالای آن ها برای کاربردهای تراهرتز دست نخورده مناسب نیستند. همانطور که در بخش ۲ بحث شد، گرافین توانایی های بسیار بالایی را از خود نشان می دهد که می تواند به نمونه های ایده آل $2 \times 10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$ برسد، که آن را به یک کاندید مناسب برای استفاده در FET هایی که برای الکترونیک با فرکانس بالا مورد نیاز هستند، تبدیل می کند.

یکی از ارقام شایستگی نسبت جریان روشن به خاموش λ است. اپلیکیشن های مدرن الکترونیک دیجیتال نیاز به مقدار λ به ترتیب 10^3 تا 10^4 دارند. تاکید زیادی بر روی باندهای انرژی گرافن و ساختارهای مرتبط در بخش ۲ قرار گرفت. این به این دلیل است که یک نوار انرژی غیر صفر برای کاربردهای الکترونیک دیجیتال ضروری است، و یک نوار انرژی بزرگ مربوط به مقدار زیادی γ است. این امر استفاده از گرافین تک لایه برای کاربردهای دیجیتال را رد می کند. با این حال، در حوزه الکترونیک فرکانس بالا که مقدار زیادی λ برای آن لازم نیست، مناسب است.

به طور کلی، FET های گرافین را می توان به دو خانواده تقسیم کرد. اولین دسته از پیاده سازی های FET گرافن شامل استفاده از گرافن به عنوان یک جریان حامل کانال FET است. این دسته از FET های گرافن معمولاً در یکی از پیکربندی های سه گانه پیاده سازی می شوند؛ یعنی پیکربندی های دروازه پستی، دروازه بالا، و دروازه دوگانه همانطور که در شکل زیر نشان داده شده است. در هر یک از این پیکربندی ها، از گرافن برای تشکیل کانال حامل جریان بین منبع و درین استفاده می شود. در پیکربندی های FET گرافین گیت پستی و دوتایی، از یک زیرلایه Si بسیار دوپ شده استفاده می شود. در FET های گرافین با دروازه پستی، سابلسترت به عنوان دروازه پستی FET عمل می کند، در حالی که در FET های گرافین با دروازه دوگانه، یک لایه دی

الکتريک در بالای کانال گرافن رسوب می کند و علاوه بر دروازه پشتی، دروازه بالایی را تشکیل می دهد. در FET های گرافن با گیت بالا، گرافن به صورت افقی روی یک بس تر SiC رشد می کند و یک دی الکتريک در بالای کانال گرافن رسوب می کند تا گیت بالایی دستگاه را تشکیل دهد.



تصویر ۷-۵ بخش های متقاطع (الف) یک FET گرافن گیت پین، (ب) FET گرافین دروازه ای و

(ج) یک FET گرافن گیت بالا

دسته دیگری از FET های گرافینی که در این گزارش مورد بحث قرار نگرفته اند، به فن آوری تونل زنی کوانتومی مربوط می شوند. این بخش تنها بر FET ها با کانال های تک لایه گرافن، گرافن دو لایه و GNR تمرکز دارد.

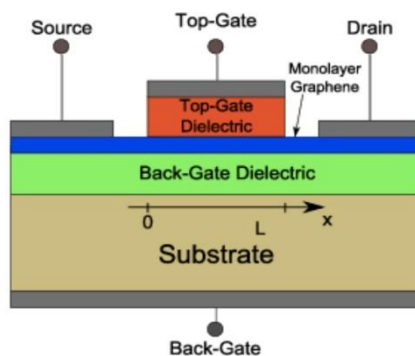
۵-۶ FET های گرافن تک لایه^۱

گرافین تک لایه FET اولین بار توسط لم و همکارانش در سال ۲۰۰۷ نشان داده و مورد مطالعه قرار گرفت. سه سال پس از کشف گرافین و رفتار دو قطبی آن. یکی از کاربردهای کلیدی FET های گرافین تک لایه، الکترونیک فرکانس بالا، به ویژه در شکاف تراهرتز است. شکل های شایستگی f_c و F_{sc} که سرعت یک FET را در کاربردهای فرکانس بالا تعیین می کنند، در واقع متناسب با تحرک حامل در کانال FET هستند.

^۱ Monolayer Graphene FETs

اگر چه گرافین تک لایه تحرک بالایی از خود نشان می دهد، تحرک آن توسط دی الکتریک و سوبستراهای مورد استفاده، علاوه بر تخریب که ناشی از تکنیک های سنتز مطرح شده در بخش ۲_۳ است، تجزیه می شود. بنابراین طول کانال کوتاه برای به حداکثر رساندن مقادیر f_c^1 و f_{osc}^2 مطلوب است. شماتیک مقطعی از یک FET گرافن تک لایه در شکل زیر نشان داده شده است. به این ترتیب، پارامترهای f_c و FSC (و μ تحرک، و L طول کانال)، معرفی شده اند، در این زمینه مورد توجه قرار گرفته اند.

یکی از چالش ها این است که اگرچه گرافین تک لایه تحرک بالایی از خود نشان می دهد، اما تحرک آن توسط دی الکتریک وبستر مورد استفاده، علاوه بر تخریب که ناشی از تکنیک های سنتز مطرح شده در بخش ۲.۳ است، کاهش می یابد. بنابراین طول کانال کوتاه مطلوب است. برای به حداکثر رساندن مقادیر F_c و FSC طرحی مقطعی از گرافین تک لایه FET در شکل زیر نشان داده شده است.



تصویر ۵-۸ شماتیک مقطعی یک ترانزیستور گرافن تک لایه

$$f_c^1 = \frac{gm}{2\pi(C_{GS} + C_{GD})}, \text{ فرکانس قطع،}$$

$$f_{osc}^2 = \frac{gm}{4\pi C_{GS} \sqrt{gD_s R}}, \text{ حداکثر فرکانس نوسان}$$

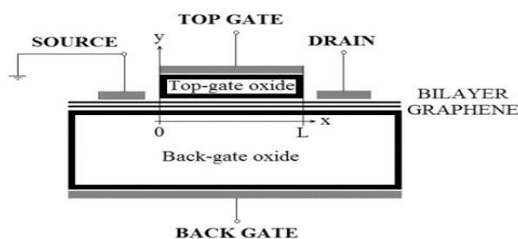
مريک و همکارانش اولين نمونه از اندازه گيري فرکانس بالای یک گرافن FET تک لایه را در سال ۲۰۰۸ با $f_c = 14.7 \text{ GHz}$ و گزارش کردند. دو سال بعد، FET های گرافین تک لایه با $f_c = 100 \text{ GHz}$ و

$L = 240 \text{ nm}$ و همچنین $f_c = 300 \text{ GHz}$ و $L = 144 \text{ nm}$ محقق شدند، که دومی از یک گیت نانوسیم برای حفظ مقدار زیادی تحرک استفاده می کرد. در سال ۲۰۱۲، یک گرافن FET تک لایه با گیت آنویر توسط چنگ و همکارانش با $f_c = 427 \text{ GHz}$ نشان داده شد، که بالاترین مقدار به دست آمده f_c تا به امروز، و $L = 67 \text{ nm}$ است. این مقدار f_c ، که در حال حاضر برای FET های گرافن پیشرفته است، با ترانزیستورهای تحرک بالای (InP و GaAs، HEMT ها) قابل مقایسه است. در چند سال گذشته، پیشرفت هایی در استفاده از FET های گرافن تک لایه برای تحقق الکترونیک فرکانس بالا حاصل شده است. در سال ۲۰۱۷، یک آشکارساز FET گرافین تک لایه ۴۰۰ گیگاهرتزی با حساسیت بالا کشف شد. در همان سال، یانگ و همکارانش یک FET detector گرافن تک لایه با قابلیت تشخیص ترانزیت در دمای اتاق از ۳۳۰ تا ۵۰۰ گیگاهرتز را به نمایش گذاشتند. در سال ۲۰۱۸، از FET های گرافن و پلاسمون ها برای تابش ترانزیت تشدید استفاده شد. پیشرفت FET های گرافن تک لایه در افزایش FET های گرافن تک لایه کندتر بوده است؛ مقادیر f_{sc} برای FET های گرافن تک لایه معمولاً بین ۳۰ گیگاهرتز تا ۲۰۰ گیگاهرتز است که عملکرد ضعیف تری را نسبت به FET های معمولی مبتنی بر Si نشان می دهد. این نتیجه این واقعیت است که، همانطور که از معادله (۲۲) دیده می شود، یک مقدار بزرگ از f_{sc} نیاز به مقدار کوچکی از g_{DS} ، رسانایی کانال دارد. مدل یک MOSFET معمولی مانند آنچه در بخش ۲.۱ ارایه شد، یک $I_{DS} - V_{DS}$ نشان داده شده در شکل ۲۱ را نمایش می دهد، که در آن جریان وارد یک ناحیه اشباع در زمان $V_{OV} > V_{DS}$ می شود. با این حال، FET های گرافنی ویژگی خاص تری را به نمایش می گذارند که در آن افزایش V_{DS} فراتر از یک مقدار مشخص

باعث $V_{DS} >$ می شود که I_{DS} به صورت خطی از ناحیه اشباع خارج شود و مقدار G_{DS} را افزایش می دهد که منجر به مقدار کوچک تر F_{SC} می شود. این نتیجه تونل زنی بین بانندی و ماهیت شبه بالستیک حمل و نقل حامل در گرافین است. چندین گروه تحقیقاتی مهندسی وجود دارند که اثرات ویژگی های $I_{DS} - V_{DS}$ غیر ایده آل و پدیده های دیگر مانند مقاومت تفاضلی منفی در FET های گرافین تک لایه را مطالعه و مدل سازی کرده اند.

۵-۷ FET های گرافین دولایه^۱

راه دیگر برای پیاده سازی یک FET گرافین استفاده از یک کانال گرافین دولایه است. یک شماتیک مقطعی یک FET گرافین دولایه در شکل زیر نشان داده شده است.



تصویر ۵-۹ یک نمودار مقطعی از یک FET گرافین دولایه در پیکربندی دولایه

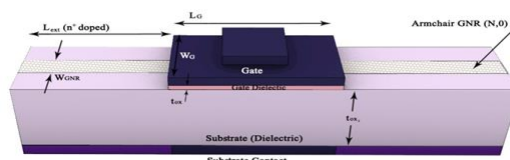
اگرچه گرافین دولایه معمولاً تحرک کمتری نسبت به گرافین تک لایه از خود نشان می دهد، اما استفاده از یک کانال گرافین دولایه در FET ها مزایایی نسبت به گرافین تک لایه دارد. به طور خاص، نشان داده شده است که FET های گرافین دولایه دارای افزایش ولتاژ بیشتر از FET های گرافین تک لایه هستند. علاوه بر این، شکاف باند القا شده در گرافین دولایه با اعمال یک میدان الکتریکی عمود، اشباع جریان و حداکثر فرکانس نوسان، نشان داده شده است. این به این دلیل است که وجود یک شکاف باند غیر صفر در گرافین دولایه (با استفاده از یک میدان الکتریکی عمود) تونل زنی بین بانندی را سرکوب می کند. علاوه بر این، FET های دولایه جریان نشتی را نشان می دهند

^۱ Bilayer Graphene FETs

که درجه شدت آن کم تر از FET های تک لایه غیر عادی در دماهای پایین است. اگرچه شکاف در جریان نشی بین دو دستگاه FET در دماهای بالاتر کاهش می یابد، جریان نشی کم تر در هر دو کاربرد آنالوگ و دیجیتال مطلوب است. شکاف باند صفر گرافین تک لایه، مقدار کوچکی از $(\lambda \approx 5)$ FET های با گیت بالا را نشان می دهد که برای کاربردهای دیجیتال نامناسب است. پهنای باندی به بزرگی 130 meV در گرافین دولایه نشان داده شده است. برای گرافین های دولایه این مقدار برابر با $\lambda \approx 10^2$ است. در حالی که این یک بهبود نسبت به مقادیر λ مشاهده شده در FET های گرافین تک لایه است، برای کاربردهای مدرن در الکترونیک دیجیتال کافی نیست، که نیاز به حداقل مقدار λ به ترتیب 10^3 تا 10^4 دارد.

۵-۸ FET های نانوربین گرافنی^۱

یک جایگزین برای استفاده از گرافین دولایه به عنوان وسیله ای برای دستیابی به مقدار بیشتر λ استفاده از GNR FETs است. یک GNR FET ساختار مشابهی با گرافین تک لایه و FET های دولایه دارد؛ یک GNR به عنوان کانال حامل جریان در دستگاه FET استفاده می شود، همانطور که در شکل زیر نشان داده شده است.



تصویر ۵-۱۰ شماتیک GNR FET با یک کانال

پهنای باندی به بزرگی 3.2 eV در نانوالیاف گرافنی آرمیچر مشاهده شده است، که تقریباً سه مرتبه بزرگ تر از بزرگ ترین پهنای باندی است که در گرافین دولایه تحت استفاده از میدان الکتریکی عمود بر هم مشاهده شده است. در واقع، مقادیر λ تا 10^7 در عرض کمتر 10 نانومتر

^۱ Graphene Nanoribbon FETs

GNR FETs نوع p نشان داده شده است که نسبت به FET های گرافن دولایه با پنج مرتبه بزرگی عملکرد بهتری دارد. مزیت دیگر GNR ها این است که عرض کوچک آن ها اجازه می دهد تا چندین GNR به عنوان کانال در یک دستگاه استفاده شوند. این امر به افزایش ویژگی های سوئیچینگ جریان محرک برای کاربردهای با عملکرد بالا کمک می کند. از آنجا که فن آوری ساخت GNR هنوز در مراحل ابتدایی خود قرار دارد، بسیاری از عملکردهای مشاهده شده در FET های GNR توسط غیر ایده آل ها در نمونه های GNR محدود می شوند. به طور خاص، ساخت GNR های به خوبی تعریف شده با دقت بالا کار آسانی نیست، و وجود لبه های زیگزاگ در نمونه های GNR صندلی، می تواند عملکرد یک GNR FET را کاهش و علاوه بر این، اگرچه FET های GNR از نوع -p با مقادیر زیاد λ نشان داده شده اند، کاربردهای دیجیتال نیز به عملکرد بالا از نوع GNR FETs نیاز دارند. علاوه بر این، تجزیه تحرک یکی از بزرگ ترین معایب GNR FETs برای مقادیر بزرگ λ در محدوده 10^4 تا 10^7 است، GNR ها باید دارای عرض زیر ۱۰ نانومتر باشند، که منجر به توانایی های حامل کم تر از به دلیل پراکندگی فونون در نزدیکی لبه های GNR می شود.

اگرچه گرافن خواص الکترونیکی قابل توجهی از خود نشان می دهد که آن را به کاندیدای مناسبی برای جایگزینی سیلیکون و افزایش طول عمر قانون مور تبدیل می کند، اما هنوز تحقیقات زیادی در مورد غلبه بر چالش های مرتبط با تحقق FET های گرافن در صنعت انجام می شود. یکی از جنبه های چالش برانگیز پیاده سازی فن آوری FET گرافن در مقیاس بزرگ، توازن بین مقیاس پذیری و کیفیت نمونه های گرافن مرتبط با تکنیک های سنتز مختلف است. همان طور که گفته شد، CVD مقیاس پذیرترین و کم هزینه ترین روش برای سنتز گرافن لایه ها در صنعت است، اما منجر به نمونه هایی با قابلیت های نسبتاً پایین می شود؛ که مهار پتانسیل گرافن به عنوان یک جایگزین با قابلیت تحرک بالا برای سیلیکون را دشوار می کند. یک مبادله کلیدی دیگر که خود را در این

حوزه تحقیقاتی نشان می دهد، مهندسی شکاف باند است و اینکه چگونه باز کردن شکاف باند در گرافن با استفاده از گرافن دولایه یا GNRS، که در بخش های ۲ و ۴ نشان داده شده است، به طور اجتناب ناپذیری منجر به FET هایی با توانایی های بسیار پایین تر از FET های گرافن دولایه می شود. شکاف باند صفر گرافن برای کاربردهای الکترونیکی مشکل ساز است. ظاهراً، مهندسی شکاف باند برای الکترونیک دیجیتال بسیار مهم است، و از پیاده سازی های ارائه شده در این گزارش، GNR FETs بیشترین نوید را نسبت به آن نشان می دهد، با مشاهده نسبت های جریان خاموش به روشن که به 10^7 می رسد، اگرچه هنوز کاره ای زیادی برای افزایش فرایندهای ساخت که توسط آن ها GNR ها ساخته می شوند، و کاهش تحرک در نمونه های GNR وجود دارد. بیشترین مقدار مشاهده شده f_c تا به امروز در FET های گرافن تک لایه 427 GHz است، که با تکنولوژی های پس سیلیکون جایگزین مانند InP و GaAs، HEMT ها قابل مقایسه است، و از تکنولوژی های CMOS متداول موجود برتر است. علاوه بر این، آشکارسازهای گرافن تراهرتز که در فرکانس های بین 300 تا 400 گیگاهرتز کار می کنند، غیرفعال شده اند که بسیار امیدوارکننده است و نشان دهنده چشم انداز استفاده از گرافن ها برای آشکارسازهای تراهرتز در آینده نزدیک است.

پیشنهادهای

در بدست آوردن تابع توزیع از تقریب زمان واهلش استفاده کردیم و معادله غیر خطی بولتزمن را به یک معادله خطی تبدیل کردیم. هیچ دلیلی ندارد که زمان واهلش مستقل از فرایندهای پراکندگی باشد بنا براین حل دقیق مسئله پراکندگی بوسیله حل معادله غیر خطی بولتزمن جهت بدست آوردن تابع توزیع میسر می شود. از طرف دیگر هنگامی که یک میدان الکتریکی در طول نانولوله اعمال می شود تراز های انرژی الکترونی را دچار اختلال می کند. توصیف دقیق تر نظریه ی رسانش در نانولوله های کربنی با در نظر گرفتن این اعوجاج حاصل خواهد شد. در بدست آوردن انرژی فونونی

از تقریب نگاشت صفحه ی گرافیت به استوانه استفاده کردیم. در این حالت مدهای نوسان شعاعی درونی - بیرونی^۱ در نانولوله های کربنی ظاهر نمی شوند و باید به صورت جداگانه این مدهای فونونی را به مسئله اضافه کرد.

^۱ Radial Breathing Mode (RBM)

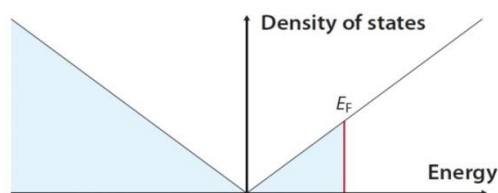
ضمائم

ضمیمہ (الف) تعریف چگالی حالت

در فیزیک حالت جامد و فیزیک ماده چگال، چگالی حالت ها (DOS) یک سیستم تعداد حالت ها در محدوده فرکانس واحد را توصیف می کند. این تابع از نظر ریاضی به صورت یک توزیع توسط تابع چگالی احتمال نشان داده می شود و به طور کلی یک میانگین در حوزه های فضا و زمان حالت های مختلف اشغال شده توسط سیستم است. چگالی حالت ها رابطه مستقیمی با روابط پراکندگی خواص سیستم دارد. به طور کلی چگالی حالت های ماده پیوسته است. اما در سیستم های ایزوله مانند اتم ها یا مولکول ها در فاز گازی، توزیع چگالی گسسته است، مانند چگالی طیفی. تغییرات محلی، اغلب به دلیل اعوجاج های سیستم اصلی، اغلب به عنوان تراکم های محلی حالت ها (LDOSs) نامیده می شوند. در سیستم های مکانیک کوانتومی، امواج یا ذرات موج مانند می توانند حالت ها یا حالت هایی با طول موج و جهت انتشار تعیین شده توسط سیستم را اشغال کنند. برای مثال، در برخی سیستم ها، فاصله بین اتمی و بار اتمی یک ماده ممکن است تنها به الکترون هایی با طول موج های خاص اجازه وجود بدهد. در سیستم های دیگر، ساختار کریستالی یک ماده ممکن است اجازه انتشار امواج در یک جهت را بدهد، در حالی که انتشار موج در جهت دیگر را سرکوب می کند. اغلب، تنها حالت های خاص مجاز هستند. بنابراین می توان گفت که بسیاری از حالت ها برای اشغال در سطح انرژی خاصی در دسترس هستند، در حالی که هیچ حالت در سطوح انرژی دیگر در دسترس نیست. با توجه به چگالی حالت های الکترون ها در لبه باند بین باندهای ظرفیت و رسانش در یک نیمه هادی، برای یک الکترون در باند رسانش، افزایش انرژی الکترون حالت های بیشتری را برای اشغال در دسترس قرار می دهد. به همین ترتیب، چگالی حالت ها برای یک بازه انرژی ناپیوسته است، که به این معنی است که هیچ حالتی برای اشغال الکترون ها در شکاف باندی ماده در دسترس نیست. این شرایط همچنین به این معنی است که یک الکترون در لبه باند رسانش باید حداقل انرژی شکاف باند ماده را از دست بدهد تا به حالت دیگری در باند ظرفیت منتقل شود.

این امر تعیین می کند که آیا ماده در بعد انتشار یک عایق است یا یک فلز. نتیجه تعداد حالت ها در یک باند نیز برای پیش بینی خواص رسانش مفید است. به عنوان مثال، در یک ساختار کریستالی یک بعدی تعداد عجیب الکترون در هر اتم منجر به یک نوار بالایی نیمه پر می شود؛ الکترون های آزاد در سطح فرمی وجود دارند که منجر به یک متا می شوند. از طرف دیگر تعداد زوج الکترون ها دقیقا تعداد کل باندها را پر می کند و بقیه را خالی می گذارد. اگر سطح فرمی در یک شکاف باند اشغال شده بین بالاترین حالت اشغال شده و پایین ترین حالت خالی قرار گیرد، ماده یک عایق یا نیمه هادی خواهد بود. بسته به سیستم مکانیک کوانتومی، چگالی حالت ها می تواند برای الکترون ها، فوتون ها یا فونون ها محاسبه شود و می تواند به عنوان تابعی از انرژی یا بردار موج k داده شود. برای تبدیل بین DOS به عنوان تابعی از انرژی و DOS به عنوان تابعی از بردار موج، رابطه پراکندگی انرژی خاص سیستم بین E و k باید شناخته شود. چگالی حالت های مربوط به حجم V و سطح انرژی قابل شمارش N به صورت زیر تعریف می شود:

$$D(E) = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \delta(E - E(k_i))$$



چگالی حالت های نزدیک به سطح فرمی با انرژی فرمی E_F .

ضمیمہ (ب) تعریف عملگر هميلتونى

در مکانیک کوانتومی، هامیلتونی یک سیستم یک عملگر متناظر با کل انرژی آن سیستم است که شامل انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل است. طیف آن، طیف انرژی سیستم یا مجموعه مقادیر ویژه انرژی آن، مجموعه ای از نتایج احتمالی است که از اندازه گیری کل انرژی سیستم به دست می آید. به دلیل ارتباط نزدیک آن با طیف انرژی و تکامل زمانی یک سیستم، در بیشتر فرمول بندی های نظریه کوانتوم از اهمیت اساسی برخوردار است. هامیلتونی یک سیستم نشان دهنده انرژی کل سیستم است؛ یعنی مجموع انرژی های جنبشی و پتانسیل تمام ذرات مرتبط با سیستم است. هامیلتونی شکل های مختلفی دارد و می تواند در برخی موارد با در نظر گرفتن ویژگی های عینی سیستم تحت تحلیل، مانند تک یا چند ذره در سیستم، تعامل بین ذرات، نوع انرژی پتانسیل، پتانسیل متغیر با زمان یا پتانسیل مستقل از زمان ساده شود

با قیاس با مکانیک کلاسیک، هامیلتونی معمولاً به صورت مجموع عملگرهای متناظر با انرژی های

جنبشی و پتانسیل یک سیستم به صورت: $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ جایی که:

$$\hat{T} = \frac{\hat{P} \cdot \hat{P}}{2m} = \frac{\hat{P}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

$\hat{T}$ عملگر انرژی جنبشی است که در آن m جرم ذره، نقطه نشان دهنده محصول نقطه ای بردارها

و K, K' برابر است با: $\hat{P} = -i\hbar \nabla$

$\hat{P}$ اوپراتور تکانه (ممتوم) است که در آن ∇ عملگر دل یا نابلا گفته می شود و ∇^2 عملگر لاپلاس می باشد.

ضمیمه (ج) تعریف هادی بالستیک

در فیزیک مزوسکوپی، رسانش بالستیک (انتقال بالستیک) جریان بدون مانع حامل های بار (معمولا الکترون ها) یا ذرات حامل انرژی در فواصل نسبتا طولانی در یک ماده است. به طور کلی، مقاومت یک ماده به این دلیل است که یک الکترون، در حین حرکت درون یک محیط، توسط ناخالصی ها، عیوب، نوسانات حرارتی یون ها در یک جامد کریستالی، یا به طور کلی توسط هر اتم / مولکول آزاد در حال حرکت که یک گاز یا مایع را تشکیل می دهد، پراکنده می شود. بدون پراکندگی، الکترون ها به سادگی از قانون دوم حرکت نیوتن در سرعت های غیر نسبیتی پیروی می کنند.

میانگین مسیر آزاد یک ذره را می توان به صورت میانگین طولی که ذره می تواند آزادانه حرکت کند، یعنی قبل از برخورد توصیف کرد که می تواند تکانه خود را تغییر دهد. میانگین مسیر آزاد را می توان با کاهش تعداد ناخالصی ها در یک کریستال یا با کاهش دمای آن افزایش داد. انتقال بالستیک زمانی مشاهده می شود که میانگین مسیر آزاد ذره (بسیار) طولانی تر از ابعاد محیطی باشد که ذره از طریق آن حرکت می کند. این ذره تنها پس از برخورد با دیواره ها حرکت خود را تغییر می دهد. در مورد یک سیم معلق در هوا / خلا، سطح سیم نقش جعبه ای را ایفا می کند که الکترون ها را منعکس می کند و از خروج آن ها به سمت فضای خالی / هوای آزاد جلوگیری می کند. به این دلیل که انرژی لازم برای استخراج الکترون از محیط (تابع کار) وجود دارد.

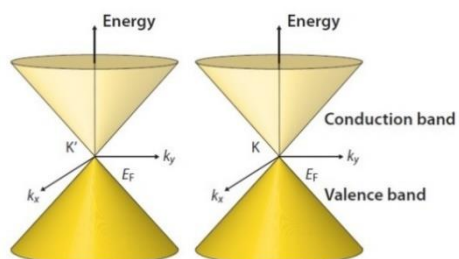
رسانش بالستیک معمولا در ساختارهای شبه یک بعدی، مانند نانولوله های کربنی یا نانوسیم های سیلیکونی، به دلیل اثرات کوانتیزه شدن با اندازه زیاد در این مواد مشاهده می شود. رسانش بالستیک محدود به الکترون ها (یا حفره ها) نیست بلکه می تواند در فونون ها نیز به کار رود. از لحاظ نظری می توان رسانش بالستیک را به دیگر شبه ذرات تعمیم داد، اما این موضوع به صورت تجربی تایید نشده است. برای یک مثال خاص، انتقال بالستیک را می توان در یک نانوسیم فلزی مشاهده کرد: به دلیل اندازه کوچک سیم (در مقیاس ۱۰ - ۹ نانومتر) میانگین مسیر آزاد که می تواند طولانی تر از یک فلز باشد

رسانش بالستیک با ابرسانایی به دلیل نبود اثر مایسنر در ماده متفاوت است. یک رسانای بالستیک اگر نیروی محرک خاموش شود، هدایت را متوقف می کند، در حالی که در یک ابررسانا جریان پس از قطع منبع محرک به جریان خود ادامه می دهد.

ضمیمہ (د) تعریف مخروط دیراک

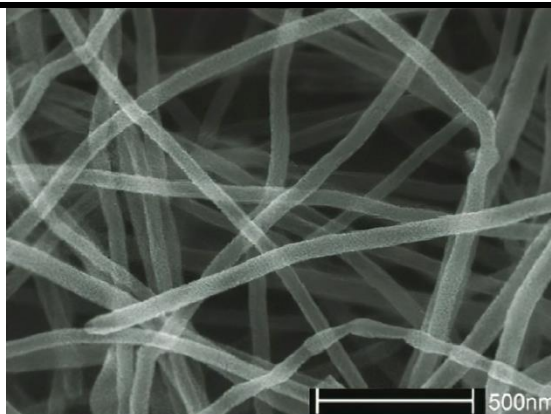
مخروط دیراک یک ساختار الکترونیکی برای توصیف الکترون ها با اثر نسبیتی فوتون مانند در سیستم های مواد دو بعدی است. دانشمندان بر این باورند که مخروط های دیراک می توانند مسیری را برای نسل بعدی تراشه های کامپیوتری، رایانش کوانتومی، ابررساناها و مکانیک نسبیتی دسکتاپ و فن آوری فراهم کنند. مثال های معمول شامل گرافن، عایق های توپولوژیکی، لایه های نازک آنتیموان بیسموت و برخی دیگر از نانومواد جدید است، که در آن انرژی الکترونیکی و تکانه دارای رابطه پراکندگی خطی هستند به طوری که ساختار نوار الکترونیکی در نزدیکی سطح فرمی به شکل یک سطح مخروطی بالایی برای الکترون ها و یک سطح مخروطی پایینی برای حفره ها است. دو سطح مخروطی یکدیگر را لمس می کنند و یک نیم فلزی شکاف نوار صفر را تشکیل می دهند. در مکانیک کوانتومی، مخروط دیراک نوعی نقطه تلاقی است که الکترون ها از آن اجتناب می کنند، جایی که انرژی باندهای ظرفیت و رسانش در هیچ جایی در فضای شبکه دو بعدی K برابر نیست، به جز در نقاط دیراک با ابعاد صفر. در نتیجه مخروط ها، رسانش الکتریکی را می توان با حرکت حامل های بار توصیف کرد که فرمیون های بدون جرم هستند، وضعیتی که به صورت نظری توسط معادله دیراک نسبیتی کنترل می شود.

به عنوان یک شی با سه بعد، مخروط های دیراک یک ویژگی از مواد دو بعدی یا حالت های سطحی هستند، براساس یک رابطه پراکندگی خطی بین انرژی و دو جز تکانه کریستال k_x و k_y . با این حال، این مفهوم را می توان به سه بعد تعمیم داد، که در آن نیمه فلزی دیراک توسط یک رابطه پراکندگی خطی بین انرژی و k_x ، k_y و k_z تعریف می شود. در k - space، این به صورت یک هایپرکان نشان داده می شود، که دارای باندهای منحنی مضاعفی است که در نقاط دیراک نیز به هم می رسند. نیمه فلزی دیراک دارای تقارن معکوس زمانی و وارون فضایی است؛ هنگامی که یکی از این نقاط شکسته می شود، نقاط دیراک به دو نقطه تشکیل دهنده ویل تقسیم می شوند و ماده به یک نیمه فلزی ویلی تبدیل می شود.



باندهای انرژی مخروطی در مجاورت K, K'

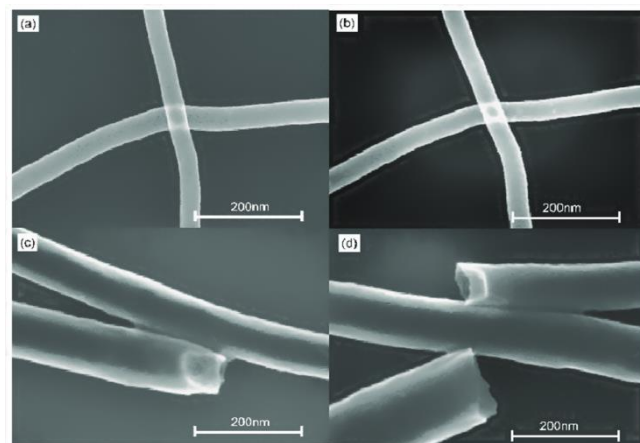
نگاره‌های برگزیده



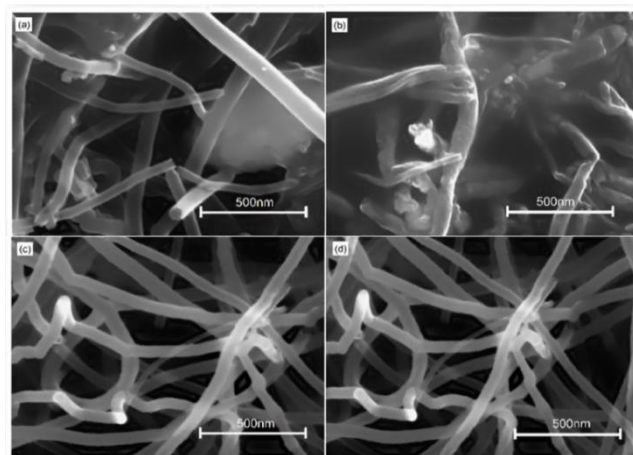
شکل (۱) تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) از نمونه های نانولوله کربنی چند دیواره خام (MWCNT)



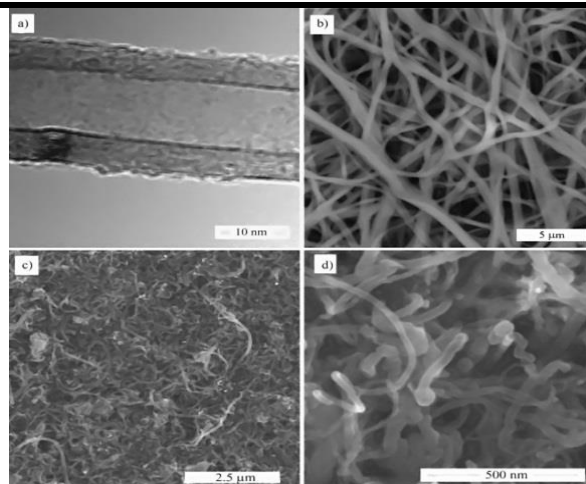
شکل (۲) تصویر TEM نانولوله کربنی پر شده با نانو ذرات نقره



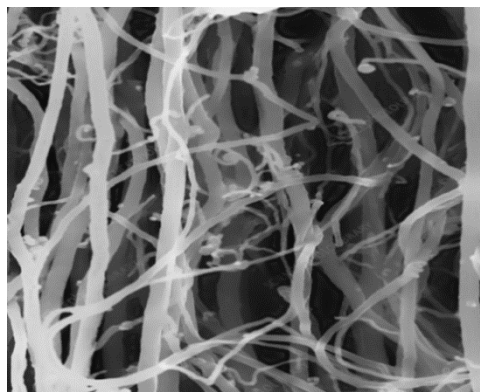
شکل ۳ (a) تصاویر SEM نمونه‌های خام MWCNT و (b) پس از تابش لیزر ۱۰s از MWCNT ها عبور کردند، (c) MWCNT (d) ها موازی پس از تابش لیزر ۱۰s



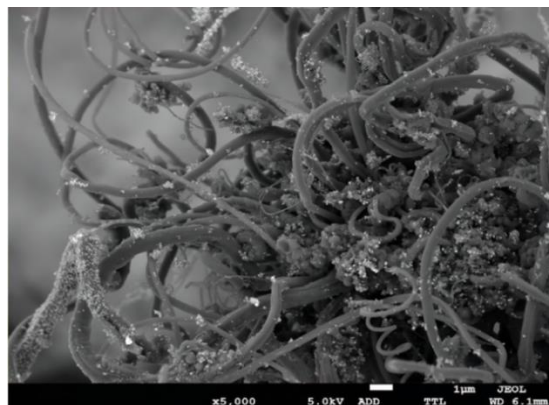
شکل ۴ (a) تصاویر SEM از MWCNT های متقاطع پس از تابش لیزر ۱۰۶۴ نانومتر بر روی زیرلایه های مختلف (a) سیلیکا ۳s (b) سیلیکا ۶s ، (c) سیلیکون ۶s ؛ و (d) سیلیکون ۸s



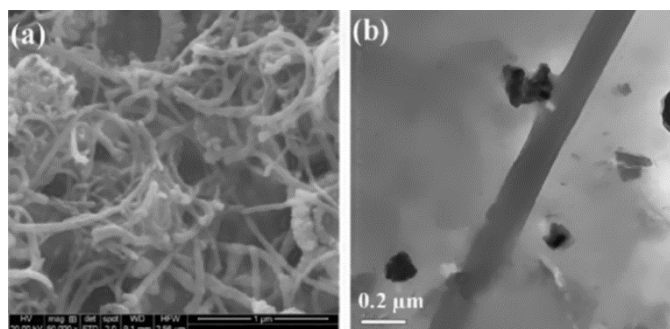
شکل ۵ (a) میکروگراف TEM از نانولوله کربنی چند دیواره، (b) میکروگراف SEM از غشای فیلترینگ غیر بافته شده پلی یورتان، (c) تصویر SEM از سطح شبکه MWCNT درهم تنیده، (d) جزئیات شبکه MWCNT درهم تنیده شده



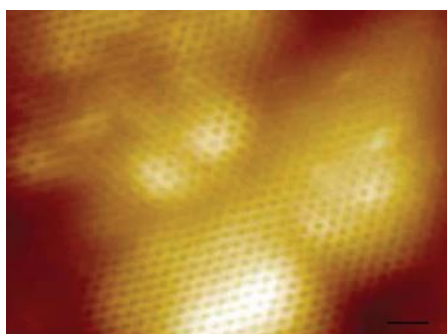
شکل ۶ اسکن میکروگراف الکترونی (SEM) نانولوله های کربنی (تک جداره و چند جداره). نانولوله های کربنی ورقه هایی از اتم های کربن هستند که استوانه ها را تشکیل می دهند.



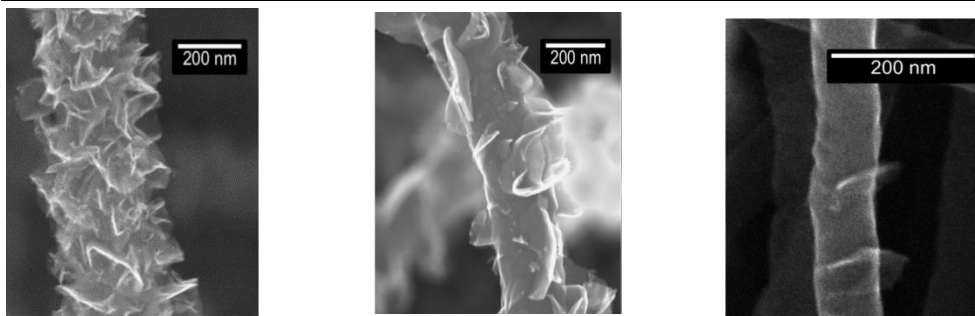
شکل ۷) نانولوله های کربنی تصویر شده توسط SEM



شکل ۸) (a) تصویر SEM و (b) تصاویر TEM از CNT پیچیده شده



شکل ۹ تصویر توپوگرافی STM گرافن تک لایه‌ای که شبکه هگزاگونالی و همچنین شیارهای سطح زیرین را نشان می‌دهد. نوار مقیاس ۲ نانومتر است



شکل ۱۰) سری SEM های CNT گرافنی شده با چگالی لایه ای متفاوت

فهرست منابع

- [۱] G. Moore, Electronics, ۳۸, (۱۹۶۵), ۱۱۴.
- [۲] A. Bahari, P. Morgen, Surface Science, ۶۰۲, (۲۰۰۸), ۲۳۱۵.
- [۳] Y.X. Liang, T.H. Wang, Physica E, ۲۳, (۲۰۰۴), ۲۳۲.
- [۴] Christian Klinke, Ali Afzali, Chemical Physics Letters, ۴۳۰, (۲۰۰۶), ۷۵.
- [۵] Jing Guo, Mark Lundstrom, and Supriyo Datta, Applied Physics Letters, ۸۰, (۲۰۰۲), ۳۱۹۲.
- [۶] Ph. Avouris, R. Martel, V. Derycke, J. Appenzeller, Physica B, ۳۲۳, (۲۰۰۲), ۶.
- [۷] H. Raffi-Tabar, Physics Reports, ۳۹۰, (۲۰۰۴), ۲۳۵.
- [۸] Jianwei Che, Tahir, Cagin and William A Goddard, Nanotechnology, ۱۰, (۱۹۹۹), ۲۶۳.
- [۹] Qingzhong Zhao, Marco Buongiorno Nardelli and J. Bernholc, Physical Review B, ۱۴۴۱۰۵ (۲۰۰۲), ۶۵,
- [۱۰] Paul L. McEuen, Michael S. Fuhrer and Hongkun Park, IEEE Transactions on Nanotechnology, ۱, (۲۰۰۲), ۷۸.
- [۱۱] S. Iijima and T. Ichihashi, Nature, ۳۶۳, (۱۹۹۳), ۶۰۳.
- [۱۲] K.B.K. Teo., IEE Proc.-Circuits Devices Syst. ۱۵۱, (۲۰۰۴), ۴۴۳.
- [۱۳] Rodney S. Ruoff, Dong Qian, Wing Kam Liu, C.R. Physique, ۴, (۲۰۰۳), ۹۹۳.
- [۱۴] Cheung, C. L., Kurtz, A., Park, H. and Lieber, CMJ Phys. Chem B, ۱۰۶, (۲۰۰۲), ۲۴۲۹.
- [۱۵] Y. Kobayashi, H. Nakashima, D. Takagi and Y. Homma, Thin Solid Films, ۴۶۴, (۲۰۰۴), ۲۸۶.
- [۱۶] Anazawa, Kazunori, Shimotani, Kei, Manabe, Chikara, Watanabe, Hiroyuki and Shimizu, Masaaki, Applied Physics Letters, ۸۱, (۲۰۰۲), ۷۳۹.
- [۱۷] Lee Seung Jong, Baik Hong Koo, Yoo Jae eun and Han Jong hoon, Diamond and Related Materials, ۱۱, (۲۰۰۲), ۹۱۴.

- [۱۸] T. Guo, P. Nikolaev, A. Thess, D. T. Colbert, and R. E. Smalley, Chemical Physics Letters, ۲۴۳, (۱۹۹۵), ۴۹.
- [۱۹] E. Yoo, L. Gao, T. Komatsu, N. Yagai, K. Arai, T. Yamazaki, K. Matsuishi, T. Matsumoto, and J. Nakamura, J. Phys. Chem. B, ۱۰۸, (۲۰۰۴), ۱۸۹۰۳.
- [۲۰] Bae-Horng Chen, Jeng-Hua Wei, Po-Yuan Lo, Hung-Hsiang Wang, Ming-Jinn Lai, Ming-Jinn Tsai, Tien Sheng Chao, Horng-Chih Lin and Tiao-Yuan Huang, Solid-State Electronics, ۵۰, (۲۰۰۶), ۱۳۴۱.
- [۲۱] Ji-Yong Park, Nanotechnology, ۱۸, (۲۰۰۷), ۰۹۵۲۰۲.
- [۲۲] Madhu Menon, Physical Review Letters, ۷۹, (۱۹۹۷), ۴۴۵۳.
- [۲۳] R. Satio, M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, Physical Properties Of Carbon Nanotubes, Imperial College Press, ISBN ۱-۸۶۰۹۴-۰۹۳-۵, (۱۹۹۸).
- [۲۴] Jens Peder Dahl, Introduction to the Quantum World of Atoms and Molecules, World Scientific Publishing Company, ISBN: ۹۸۱۰۲۴۵۶۵۳, (۲۰۰۱).
- [۲۵] Leonard L. Schiff, Quantum Mechanics ۱st Edition, McGraw – Hill Book Company, ISBN: ۰۰۷۰۵۵۲۸۷۸, (۱۹۴۸).
- [۲۶] Charles Kittel, Introduction to solid state physics ۷th edition, John Wiley and Sons, ISBN: ۰-۴۷۱-۱۱۱۸۱-۳, (۱۹۹۶).
- [۲۷] Neil W. Ashcroft, N. David Mermin, Solid State Physics, Saunders College Publishing, ISBN: ۰-۰۳-۰۸۳۹۹۳-۹, (۱۹۷۶).
- [۲۸] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Addison – Wesley Publishing, ISBN: ۰-۲۰۱-۵۳۹۲۹-۲, (۱۹۹۴).
- [۲۹] R. A. Jishi, L. Venkataraman, M. S. Dresselhaus, and G. Dresselhaus, Chemical Physics Letters, ۲۰۹, (۱۹۹۳), ۷۷.
- [۳۰] YXiao, XHYan, JXCao and JWDing, J. Phys. Condense Matter, ۱۵, (۲۰۰۳), ۳۴۱.
- [۳۱] A. S. Davydov, Quantum Mechanics, Pergamon Pr, ISBN: ۰۰۸۰۲۰۴۳۷۶, (۱۹۷۶).

- [۳۲]G. Pennington and N. Goldsman, Physical Review B, ۶۸, (۲۰۰۳), ۴۵۴۲۶ .
- [۳۳]G. Pennington and N. Goldsman, IEICE Transactions on Electronics, ۸۶, ۳۷۲ (۲۰۰۳). (
- [۳۴]S. Saito and A. Zettle, Carbon Nanotubes Quantum Cylinders of Graphene, Elsevier, ISBN: ۹۷۸-۰-۴۴۴-۵۳۲۷۶-۳, (۲۰۰۸). (
- [۳۵]Xinjian Zhou, Carbon Nanotube Transistors, Sensors, and Beyond, In Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Doctor of Philosophy, Cornell University, (۲۰۰۸). (
- [۳۶]Ali Javey, Hydounsub Kim, Markus Brink, Qian Wang, Ant Ural, Jing Guo, Paul McIntyre, Paul Mceuen, Mark Lundstrom and Hongjie Dai, Nature materials, ۱, (۲۰۰۲), ۲۴۱ .
- [۳۷] J. M. Zeeman, Electrons and Phonons, The International Series Of Monographs On Physics, ISBN: ۰-۱۹-۵۸۰۷۷۹-۸, (۱۹۶۰). (
- [۳۸]JingGuo, MarkLundstrom, Applied Physics Letters, ۸۶, (۲۰۰۵), ۱۹۳۱۰۳.
- [۳۹]Anisur Rahman, Jing Guo, Supriyo Datta and Mark S. Lundstrom, IEEE Transactions on Electron Devices, ۵۰, (۲۰۰۳), ۱۸۵۳.
- [۴۰]D.V. Pozdnyakov, V.O. Galenchik, F.F. Komarov, V.M. Borzdov, Physica E, ۳۳ (۲۰۰۶) ۳۳۶ .
- [۴۱] R. Mickevicius, V. Mitin and U. K. Harithsa, J. Applied Physics, ۷۵, (۱۹۹۴), ۹۷۳.
- [۴۲] Yung-Fu Chen and M. S. Fuhrer, Physical Review Letters, ۹۰, (۲۰۰۵), ۲۳۶۸۰۳
- [۴۳]A. Heung and H. T. Mouftah, “Depletion/enhancement CMOS for a lowerpower family of three-valued logic circuits,” IEEE J. Solid-State Circuits, vol. ۲۰, no. ۲, pp. ۶۰۹–۶۱۶, Apr. ۱۹۸۵.
- [۴۴]M. Mukaidono, “Regular ternary logic functions—Ternary logic functionssuitable for treating ambiguity,” IEEE Trans. Comput., vol. C-۳۵, no. ۲, pp. ۱۷۹–۱۸۳, Feb. ۱۹۸۶.
- [۴۵]T. Araki, H. Tatsumi, M. Mukaidono, and F. Yamamoto, “Minimization ofincompletely specified regular ternary logic functions

and its application to fuzzy switching functions,” in Proc. IEEE Int. Symp. Multiple-Valued Logic, May, ۱۹۹۸, pp. ۲۸۹–۲۹۶

[۴۶] Christian Klinke,* Ali Afzali, and Phaedon Avouris IBM T. J. Watson Research Center, ۱۱۰۱ Kitchawan Road, Yorktown Heights, NY ۱۰۵۹۸, USA

[۴۷] A. Javey, J. Guo, Q. Wang, M. Lundstrom and H. Dai, “Ballistic carbon nanotube field-effect transistors”, Nature, Vol. ۴۲۴, No. ۹۵۹۳, pp. ۶۵۴–۶۵۷, ۲۰۰۳

[۴۸] International Technology Roadmap for Semiconductor ۲۰۰۵, Available : <http://public.itrs.net>

[۴۹] Prabhakar R. Bandaru* Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Materials Science Program, University of California, San Diego, La Jolla, CA ۹۲۰۹۳-۰۴۱۱, USA

[۵۰] A. Naderi, M. Ghodrati and S. Baniardalani, “The use of a Gaussian doping distribution in the channel region to improve the performance of a tunneling carbon nanotube field-effect transistor,” Journal of Computational Electronics, vol. ۱۹, no. ۱, pp. ۲۸۳–۲۹۰, ۲۰۲۰.

[۵۱] A. Singh, S. Chaudhary, S. M. Sharma and C. K. Sarkar, “Improved drive capability of silicon nano tube tunnel FET using halo implantation,” Silicon, vol. ۱۲, no. ۱۱, pp. ۲۵۵۵–۲۵۶۱, ۲۰۲۰.

[۵۲] A. Pacheco-Sanchez and M. Claus, “Bias-dependent contact resistance characterization of carbon nanotube FETs,” IEEE Transactions on Nanotechnology, vol. ۱۹, pp. ۴۷–۵۱, ۲۰۲۰

[۵۳] A. A. Orouji and S. A. Ahmadi, “Novel attributes and design considerations of source and drain regions in carbon nanotube transistors,” Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures, vol. ۴۲, no. ۵, pp. ۱۴۵۶–۱۴۶۲, ۲۰۱۰.