



دانشگاه پیام نور

دانشکده علوم - گروه فیزیک

پایان نامه برای دریافت کارشناسی ارشد

بررسی توپراورد الکترون از طریق نانودیسک‌های گرافینی

استاد راهنما:

دکتر علیرضا صغارزاده

استاد مشاور:

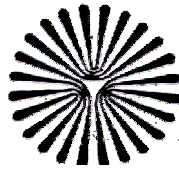
دکتر محمد رضا بنام

نگارش:

سمانه نجفی دیسفانی

تابستان ۸۹

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه پیام نور
دانشکده علوم
گروه فیزیک

پایان نامه برای دریافت کارشناسی ارشد

عنوان:

بررسی ترابرد الکترون از طریق نانودیسک های گرافینی

استاد راهنما:

دکتر علیرضا صفارزاده

استاد مشاور:

دکتر محمدرضا بنام

نگارش:

سمانه نجفی دیسفانی

تابستان ۸۹

دانشگاه پیام نور

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه برای دریافت کارشناسی ارشد

عنوان:

بررسی ترابرد الکترون از طریق نانودیسک های گرافینی

استاد راهنما:

دکتر علیرضا صفارزاده

استاد مشاور:

دکتر محمدرضا بنام

نگارش:

سمانه نجفی دیسفانی

تابستان ۸۹



دانشگاه پیام نور

جمهوری اسلامی ایران
وزارت علوم، تحقیقات و
فناوری

تاریخ: ۱۳۸۹ / ۴ / ۲۲
شماره: ۸۸۰۲۹۰۴۵۴
پیوست:

بسمه تعالی

تصویب نامه پایان نامه

پایان نامه تحت عنوان: بررسی ترابرد الکترونی در نانودیسک های گرافینی که توسط
سمانه نجفی دیسفانی تهیه و به هیأت داوران ارائه گردیده است مورد تایید می باشد.

نمره: ۱۹/۲۰ بزرگ درجه ارزشیابی: ۴۴

تاریخ دفاع: ۸۹/۴/۱۰

اعضای هیأت داوران:

نام و نام خانوادگی:	هیأت داوران	مرتبہ علمی	امضاء
دکتر علیرضا صفار زاده	استاد راهنما	دانشیار	
دکتر محمدرضا بنام	استاد راهنمای همکار	دانشیار	
دکتر حسین/اسغر رهبر	استاد مشاور	دانشیار	
دکتر حسن رهنما	استاد ممتحن	استادیار	
دکتر افضل رقوی	نماینده گروه آموزشی	استادیار	

مشاهد: خیابان امام خمینی ۴۰ - صندوق پستی ۹۱۹ تلفن: ۸۵۲۸۵۲۸ (۰۵۱۱)

پست الکترونیک: mashhad@pnu.ac.ir

دورنگار: ۸۵۲۸۵۲۰ (۰۵۱۱)



دانشگاه پیام نور

جمهوری اسلامی ایران
وزارت علوم، تحقیقات و
فناوری

تاریخ: ۱۳۸۹/۰۴/۰۲
شماره: ۰۸۱۰/۹۰۰۰
پیوست:

بسمه تعالی

صور تجلسه دفاع از پایان نامه

پایان نامه تحت عنوان: **بررسی تراورد الکترونی در نانودیسک های گرافینی که توسط سمانه نجفی دیسفانی تهیه و به هیأت داوران ارائه گردیده است مورد تایید می باشد.**

نمره: ۱۹.۱۰۰۰ **بهر روز** درجه ارزشیابی: **مجلس**

تاریخ دفاع: ۸۹/۴/۱۰

اعضای هیأت داوران:

نام و نام خانوادگی:	هیأت داوران	مرتبہ علمی	امضاء
دکتر علیرضا صفار زاده	استاد راهنما	دانشیار	
دکتر محمدرضا بنام	استاد راهنمای همکار	دانشیار	
دکتر حسین امیر رحیمی دکتر حسین رحمتا	استاد مشاور	استادیار	
دکتر افضل رفوی	استاد ممتحن	استادیار	
	نماینده گروه آموزشی	استادیار	

دکتر علیرضا صفار زاده

مشهد: خیابان امام خمینی ۴۰ - صندوق پستی ۹۱۹ تلفن: ۸۵۲۸۵۲۸ (۰۵۱۱)
دورنگار: ۸۵۲۸۵۲۰ (۰۵۱۱) پست الکترونیک: mashhad@pnu.ac.ir

تقدیم به

پدر و مادرم و تمام مهربانانی که مرا علم آموختند

با سپاس از جناب آقای دکتر علی رضا صفارزاده
که در تمامی مراحل نگارش این پایان نامه، از
راهنمایی های ایشان بهره جسته ام، دکتر محمدرضا
بنام و دوست عزیزم خانم فائزه ایزدپناه.

سمانه نجفی دیسفانی

تابستان ۸۹

فهرست مطالب

فصل اول: کربن و آلوتروپ‌های آن

مقدمه.....	۱
۱-۱ آلوتروپ‌های کربن.....	۱
۱-۱-۱ ساختار بلوری کربن.....	۳
۱-۱-۲ ساختار بلوری الماس.....	۴
۱-۱-۳ فولرین.....	۵
۱-۱-۴ نانولوله های کربنی.....	۶
۲-۱ گرافین.....	۸
۱-۲-۱ مروری بر تاریخ گرافین.....	۸
۲-۲-۱ ویژگی‌های گرافین.....	۹
۳-۲-۱ کاربردهای گرافین.....	۱۱
۴-۲-۱ نانو نوارهای گرافینی.....	۱۲
۵-۲-۱ نانودیسک‌های گرافینی.....	۱۳

فصل دوم: ترابرد کوانتومی براساس فرمول بندی تابع گرین غیرتعادلی

مقدمه.....	۱۶
۱-۲ چگونگی شارش جریان.....	۱۷

۲۰ جنبه کوانتومی رسانش
۲۴ سیستم‌های باز
۳۱ چگالی حالت‌های موضعی
۳۵ تابع گرین و طول عمر

فصل سوم: فرآیندهای عبور

۴۲ ۱-۳ تاثیر برخی مقیاس‌های طولی در فرآیند عبور
۴۲ ۳-۱-۱ طول موج دوبروی
۴۳ ۳-۱-۲ مسافت آزاد
۴۳ ۳-۱-۳ طول واهلش فاز
۴۴ ۳-۲ فرآیند عبور کلاسیک
۴۵ ۳-۳ فرآیند عبور کوانتومی
۴۵ ۳-۳-۱ عبور بالستیک
۴۷ ۳-۳-۲ عبور پخشی
۴۷ ۳-۳-۳ ضریب عبور و جریان عبور همدوس
۵۱ ۳-۴ تابع گرین سیم کوانتومی بینهایت
۵۳ ۳-۵ تابع گرین سیم کوانتومی نیم بینهایت

فصل چهارم: اسپیترونیک

۵۶ مقدمه
----	-------------

- ۱-۴ انواع مقاومت مغناطیسی ۵۷
- ۲-۴ رسانندگی در فلزات فرومغناطیس ۵۸
- ۳-۴ جریان‌های اسپینی قطبیده ۶۰

فصل پنجم: محاسبه ترابرد الکترون و اسپین در نانودیسک‌های گرافینی

- ۱-۵ ترابرد الکترونی نانودیسک‌های گرافینی در اتصال با دو الکتروود فلزی ۶۴
- ۱-۱-۵ ترابرد در نانودیسک‌های مثلثی زیگزاگ ۶۷
- ۲-۱-۵ ترابرد در نانودیسک‌های شش گوشه زیگزاگ ۷۷
- ۳-۱-۵ ترابرد در نانودیسک‌های مثلثی آرمچیر ۸۶
- ۴-۱-۵ ترابرد در نانودیسک‌های شش گوشه آرمچیر ۹۱
- ۲-۵ ترابرد اسپینی و مقاومت مغناطیسی یک نانودیسک گرافینی با الکتروودهای فرومغناطیسی .. ۹۷
- منابع ۱۰۴

فهرست شکل ها

- شکل (۱-۱): برخی از ترکیبات کربن: (a) الماس (b) گرافیت (c) لونسدالیت (d-f) فولرین (g) کربن بی شکل (h) نانولوله کربنی..... ۲
- شکل (۲-۱): (a)، نمای ورقه های گرافیت که از کنار (b)، نمای ورقه های گرافیت از بالا..... ۳
- شکل (۳-۱): ساختار بلوری الماس..... ۴
- شکل (۴-۱): ساختار فولرین C_{60} ۵
- شکل (۵-۱): سمت چپ ورقه گرافین و سمت راست نانولوله کربنی تک دیواره..... ۷
- شکل (۶-۱): (a)، نانولوله آرمچیر (b)، نانولوله زیگزاگ (c)، نانولوله کایرال..... ۷
- شکل (۷-۱): گرافین. سمت راست تصویر گرافین در میکروسکوپ الکترونی انتقالی..... ۸
- شکل (۸-۱): طیف انرژی الکترون ها در گرافین با بردار موج k در تقریب بستگی قوی..... ۱۰
- شکل (۹-۱): نانو نوارهای گرافینی..... ۱۲
- شکل (۱۰-۱): (a) بنزن، (b) فنالن، (c)، نانو دیسک مثلثی سایز $N=2$ ۱۳
- شکل (۱۱-۱): (a) و (b) نانودیسک های آرمچیر مثلثی، (a) تری فنیلن، (c) نانودیسک آرمچیر شش-گوشی (هگزابنزوکورونن)..... ۱۴
- شکل (۱۲-۱): نانودیسک های زیگزاگ شش گوشه..... ۱۴
- شکل (۱-۲): ولتاژ بایاس اعمالی به سیستم پتانسیل شیمیایی در چاهک را نسبت به چشمه پایین

- می آورد..... ۱۸
- شکل (۲-۲): شارش الکترون به داخل و خارج کانال تک ترازی متصل به چشمه و چاهک. تصویر
- ساده ای از رابطه سرعت ۱۹
- شکل (۳-۲): (a)، کانال تک ترازی، با اعمال ولتاژ بایاس اختلاف بین پتانسیل شیمیایی چشمه و چاهک اتفاق می افتد. (b)، پهن شدگی ترازها در فرآیند جفت شدگی کانال..... ۲۱
- شکل (۴-۲): (a)، چگالی حالت‌ها قبل از اتصال (b)، چگالی حالت‌ها پس از جفت شدگی ۲۲
- شکل (۵-۲): کانال متصل به یک منبع. مجموعه ای از حالت‌های گسسته به حالت‌های پیوسته تبدیل می شوند..... ۲۴
- شکل (۶-۲): کانال با هامیلتونی $[H]$ با ماتریس جفت شدگی $[T]$ به الکتروود با هامیلتونی $[H_R]$ متصل شده است ۲۵
- شکل (۷-۲): سیم کوانتومی نیم بی نهایت متصل به یک کانال ۲۶
- شکل (۸-۲): (a)، کانال بدون الکترون جدا شده از الکتروود درحالی که الکترون‌ها حالت‌های $\{\Phi_R\}$ را در الکتروود اشغال کرده‌اند. (b)، توابع $\{\Phi_R\}$ ، پس از جفت شدگی داخل کانال پخش شده منجر به توابع $\{\psi_R\}$ می شوند..... ۲۸
- شکل (۹-۲): کانای با تک تراز انرژی ϵ به منبعی با ترازهای $\{\epsilon_n\}$ متصل شده است. پس از اتصال تراز انرژی کانال به مجموعه ای از ترازهای انرژی با ارتفاع‌های متفاوت را نشان می دهد..... ۳۳

- شکل (۲-۱۰): نمایی از اندازه هر عنصر قطری توابع گرین تاخیری و پیش رونده در نمایش ویژه حالت‌ها و تابع طیفی در محدوده زمان ۳۷
- شکل (۲-۱۱): ترازهای انرژی منبع در اتصال با کانال تک تراز. ۳۹
- شکل (۳-۱): فرآیندهای مختلف پراکندگی ۴۶
- شکل (۳-۲): شارش الکترون‌ها به داخل و خارج کانال، مدل تراز مستقل ۴۸
- شکل (۳-۳): شار ورودی و شار خروجی برای یک دستگاه چند تراز که ترازهای انرژی آن توسط ماتریس هامیلتونی H وجفت شدگی آن با چشمه و چاهک با به ترتیب ماتریس‌های خود انرژی Σ_1 و Σ_2 نشان داده می‌شود ۴۸
- (۴-۱): مقاومت مغناطیسی و انواع آن ۵۷
- شکل (۴-۲): انواع مقاومت‌های مغناطیسی ۵۸
- شکل (۴-۳): زیر نوارهای اسپینی مربوط به الکترون‌های اسپین بالا و پایین برای یک فلز. ۵۹
- شکل (۴-۴): زیرنوارهای اسپینی مربوط به الکترون‌های اسپین بالا و پایین در یک فلز فرومغناطیس ۶۰
- شکل (۴-۵): پیوند تونلی مغناطیسی ۶۱
- شکل (۴-۶): حالت مغناطش موازی ۶۱
- شکل (۴-۷): حالت مغناطش پادموازی ۶۲
- شکل (۵-۱): سمت راست نانودیسک قبل از ایجاد تهی جای، سمت چپ پس از ایجاد تهی جای. خط چین‌های شماره گذاری شده مکان الکترودها را نشان می‌دهند ۶۸

شکل (۲-۵): چگالی حالت‌های الکترونی را برای حالت اولیه (خط پر) و حالت همراه با تهی

جای (خط چین) نشان می‌دهد. ۶۸

شکل (۳-۵): (الف) ضرایب عبور بر حسب انرژی. (ب) نمودار جریان - ولتاژ. الکترودها به

ترتیب در موقعیت (۱)، (۲) و (۳) قرار گرفته‌اند. خط پر حالت بدون تهی جای و خط چین

نانودیسک همراه با تهی جای را نشان می‌دهد. ۶۹

شکل (۵-۵): (الف) چگالی حالت‌ها قبل (خط پر) و بعد (خط چین) از ایجاد تهی جای. (ب) چگالی

حالت‌ها پس از ایجاد تهی جای (۲)، خط پر چگالی تهی جای (۱) و خط چین چگالی تهی جای

(۲) ۷۰

شکل (۶-۵): (الف)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۱) (خط

چین). (ب)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۲) (خط چین)

الکترودها در هر دو حالت در مکان (۱) قرار گرفته‌اند. ۷۱

شکل (۷-۵): (الف)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۱) (خط

چین). (ب)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۲) (خط چین)

الکترودها در هر دو حالت در مکان (۲) قرار گرفته‌اند. ۷۲

شکل (۸-۵): (الف)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۱) (خط

چین). (ب)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۲) (خط چین).

الکترودها در هر دو حالت در مکان (۳) قرار گرفته‌اند. ۷۳

شکل (۹-۵): (الف)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۱) (خط چین). (ب)، جریان و ضریب عبور را قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۲) (خط چین).
الکترودها در هر دو حالت در مکان (۴) قرار گرفته اند. ۷۴

شکل (۱۰-۵): (الف)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۱) (خط چین). (ب)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۲) (خط چین).
الکترودها در هر دو حالت در مکان (۵) قرار گرفته اند. ۷۵

شکل (۱۱-۵): (الف)، نانودیسک شش گوشه. (ب) و (ج)، نانودیسک پس از ایجاد تهی جای (۱) و (۲). خط چین ها مکان الکترودها را نمایش می دهند. ۸۶

شکل (۱۲-۵): (الف)، چگالی حالت‌ها برای حالت اولیه (خط پر) و تهی جای (۱) (خط چین). (ب) چگالی حالت‌ها برای تهی جای (۱)، (خط پر) و تهی جای (۲)، (خط چین). ۸۷

شکل (۱۳-۵): (الف)، (الف)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۱) (خط چین). (ب)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۲) (خط چین).
الکترودها در هر دو حالت در مکان (۱) قرار گرفته اند. ۷۹

شکل (۱۴-۵): (الف)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۱) (خط چین). (ب)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۲) (خط چین).
الکترودها در هر دو حالت در مکان (۲) قرار گرفته اند. ۸۱

- شکل (۵-۱۵): (الف)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۱) (خط چین). (ب)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۲) (خط چین).
الکترودها در هر دو حالت در مکان (۳) قرار گرفته اند ۸۲
- شکل (۵-۱۶): (الف)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۱) (خط چین). (ب)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۲) (خط چین).
الکترودها در هر دو حالت در مکان (۴) قرار گرفته اند ۸۴
- شکل (۵-۱۷): (الف)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۱) (خط چین). (ب)، جریان و ضریب عبور قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۲) (خط چین).
الکترودها در هر دو حالت در مکان (۵) قرار گرفته اند ۸۵
- شکل (۵-۱۸): نانو دیسک مثلثی آرمچیر. خط چین‌های شماره گذاری شده مکان الکترودها را نشان می‌دهند. ۸۶
- شکل (۵-۱۹): چگالی حالت‌ها برای نانودیسک آرمچیر ۸۶
- شکل (۵-۲۰): (الف)، سمت چپ جریان بر حسب ولتاژ و سمت راست ضریب عبور. الکترودها در مکان (۱)، قرار دارد. (ب) سمت چپ جریان بر حسب ولتاژ و سمت راست ضریب عبور. الکترودها در مکان (۲)، قرار دارد. ۸۷
- شکل (۵-۲۱): (الف) نانودیسک مثلثی دسته مبلی، (ب) و (ج) نانودیسک پس از ایجاد تهی جای (۱) و (۲) خط چین‌ها محل الکترودها را نشان می‌دهند. ۸۸

شکل (۵-۲۲): (الف)، چگالی حالت‌های الکترونی نانودیسک قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۱) (خط چین). (ب)، چگالی حالت‌های الکترونی نانودیسک قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۲) (خط چین)..... ۸۸

شکل (۵-۲۳): (الف)، نمودار جریان-ولتاژ و ضریب عبور برای حالت اولیه (خط پر) و حالت‌های تهی جای اول (خط چین). (ب) جریان-ولتاژ و ضریب عبور برای حالت اولیه (خط پر) و حالت‌های تهی جای دوم (خط چین) در هر دو حالت الکترودها در موقعیت (۱) قرار دارند. ۸۹

شکل (۵-۲۴): (الف)، نمودار جریان-ولتاژ و نمودار ضریب عبور برای حالت اولیه (خط پر) و حالت‌های تهی جای اول (خط چین). (ب) نمودار جریان-ولتاژ و نمودار ضریب عبور برای حالت اولیه (خط پر) و حالت‌های تهی جای دوم (خط چین) در هر دو حالت الکترودها در موقعیت (۲) قرار دارند. ۹۰

شکل (۵-۲۵): نانودیسک آرمچیر دسته مبلی، (الف) قبل از ایجاد تهی جای (ب) پس از ایجاد تهی جای (۱) و (۲). خط چین‌های شماره گذاری شده محل الکترودها را نشان می‌دهند. ۹۱

شکل (۵-۲۶): (الف)، چگالی حالت‌های الکترونی نانودیسک قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۱) (خط چین). (ب)، چگالی حالت‌های الکترونی نانودیسک قبل (خط پر) و پس از ایجاد تهی جای (۲) (خط چین)..... ۹۲

شکل (۵-۲۷): (الف)، سمت چپ نمودار جریان-ولتاژ و سمت راست نمودار ضریب عبور برای حالت اولیه (خط پر) و حالت‌های تهی جای اول (خط چین). (ب) سمت چپ نمودار جریان-

ولتاژ و سمت راست نمودار ضریب عبور برای حالت اولیه (خط پر) و حالت‌های تهی جای دوم

(خط چین) در هر دو حالت الکترودها در موقعیت (۱) قرار دارند. ۹۳

شکل (۵-۲۸): (الف)، سمت چپ نمودار جریان- ولتاژ و سمت راست نمودار ضریب عبور برای

حالت اولیه (خط پر) و حالت‌های تهی جای اول (خط چین). (ب) سمت چپ نمودار جریان-

ولتاژ و سمت راست نمودار ضریب عبور برای حالت اولیه (خط پر) و حالت‌های تهی جای دوم

(خط چین) در هر دو حالت الکترودها در موقعیت (۲) قرار دارند. ۹۴

شکل (۵-۲۹): (الف)، سمت چپ نمودار جریان- ولتاژ و سمت راست نمودار ضریب عبور برای

حالت اولیه (خط پر) و حالت‌های تهی جای اول (خط چین). (ب) سمت چپ نمودار جریان-

ولتاژ و سمت راست نمودار ضریب عبور برای حالت اولیه (خط پر) و حالت‌های تهی جای دوم

(خط چین) در هر دو حالت الکترودها در موقعیت (۳) قرار دارند. ۹۵

شکل (۵-۳۰): پیکربندی الکترودها/نانودیسک/الکترودها. دایره قرمز مکان تهی جای را نشان می‌دهد.

..... ۹۷

شکل (۵-۳۱): جریان اسپینی برحسب ولتاژ بایاس (الف) قبل از ایجاد تهی جای و (ب) پس از ایجاد

تهی جای در نانودیسک. منحنی سیاه (خط چین) جریان در آرایش موازی (پادموازی) ۱۰۰

شکل (۵-۳۲): مقاومت مغناطیسی برحسب ولتاژ بایاس در غیاب تهی جای ۱۰۱

شکل (۵-۳۳): مقاومت مغناطیسی برحسب ولتاژ در حضور تهی جای ۱۰۱

چکیده

در این پروژه با استفاده از روش تابع گرین غیر تعادلی، فرمول بندی لانداور- بوتیکر و هامیلتونی بستگی قوی، رفتار منحنی مشخصه جریان-ولتاژ و ضریب عبور را برای سامانه ای متشکل از یک نانودیسک ساندویچ شده بین دو الکتروود فلزی مطالعه کرده و سپس اثر ایجاد تهی جای جایگزیده در نانودیسک و تغییر مکان الکتروود در سامانه را مورد بررسی قرار دادیم. نتایج به دست آمده حاکی از تغییر در جریان عبوری و ضریب عبور به دلیل اثرات تداخلی و تغییر در حالت های الکترونی است. هم چنین ترابرد همدوس وابسته به اسپین را با استفاده از تابع گرین غیرتعادلی در تقریب بستگی قوی را برای یک نانودیسک گرافینی مثلثی ساندویچ شده بین الکتروودهای فرومغناطیس در حضور تهی جای بررسی کردیم. نتایج نشان می دهد که حضور تهی جای می تواند مشخصه جریان-ولتاژ را در ولتاژهای پایین افزایش داده و باعث ایجاد مقاومت دیفرانسیلی منفی شود. بعلاوه مقاومت مغناطیسی در حضور تهی جای بسیار بیشتر از حالت بدون ناخالصی است.