



دانشگاه تربیت مدرس
دانشکده فنی و مهندسی

پایان نامه دوره کارشناسی ارشد مهندسی نانوفناوری

شبیه سازی و تحلیل فوتوترانزیستور مبتنی بر نانونوارهای گرافینی آرمچیر

آرش معروف

استاد راهنما:

دکتر وحید احمدی

استاد مشاور:

دکتر مهدی پورفتح

زمستان ۱۳۹۰

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



بسمه تعالی

تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان نامه

آقای آرش معروف پایان نامه ۶ واحدی خود را با عنوان: شبیه سازی و تحلیل فوتو ترانزیستور مبتنی بر نانو نوارهای گرافنی در تاریخ ۱۳۹۰/۱۲/۰۶ ارائه کردند.

اعضای هیات داوران نسخه نهایی این پایان نامه را از نظر فرم و محتوا تایید کرده و پذیرش آنرا برای تکمیل درجه کارشناسی ارشد مهندسی نانو فناوری پیشنهاد می کنند.

عضو هیات داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	نامضا
استاد راهنما	دکتر وحید احمدی	استاد	
استاد مشاور	دکتر مهدی پور فتح	استادیار	
استاد ناظر	دکتر محمد کاظم مروج فرشی	استاد	
استاد ناظر	دکتر مرتضی فتحی پور	دانشیار	
مدیر گروه (یا نماینده گروه تخصصی)	دکتر محمد کاظم مروج فرشی	استاد	

این نسخه به عنوان نسخه نهایی پایان نامه ارسال مورد تایید است.
اعضای هیات داوران

آیین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش‌های علمی دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی و فناوری دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسانها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیأت علمی، دانشجویان، دانش‌آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهش‌های علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرح‌های تحقیقاتی با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد زیر را رعایت نمایند:

ماده ۱- حق نشر و تکثیر پایان‌نامه/ رساله و درآمدهای حاصل از آنها متعلق به دانشگاه می باشد ولی حقوق معنوی پدید آورندگان محفوظ خواهد بود.

ماده ۲- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان‌نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و با تایید استاد راهنمای اصلی، یکی از اساتید راهنما، مشاور و یا دانشجو مسئول مکاتبات مقاله باشد. ولی مسئولیت علمی مقاله مستخرج از پایان‌نامه و رساله به عهده اساتید راهنما و دانشجو می باشد.

تبصره: در مقالاتی که پس از دانش‌آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده ۳- انتشار کتاب، نرم افزار و یا آثار ویژه (اثری هنری مانند فیلم، عکس، نقاشی و نمایشنامه) حاصل از نتایج پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی کلیه واحدهای دانشگاه اعم از دانشکده ها، مراکز تحقیقاتی، پژوهشکده ها، پارک علم و فناوری و دیگر واحدها باید با مجوز کتبی صادره از معاونت پژوهشی دانشگاه و براساس آئین نامه های مصوب انجام شود.

ماده ۴- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه یافته ها در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق معاونت پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده ۵- این آیین‌نامه در ۵ ماده و یک تبصره در تاریخ ۸۷/۴/۱ در شورای پژوهشی و در تاریخ ۸۷/۴/۲۳ در هیأت رئیسه دانشگاه به تایید رسید و در جلسه مورخ ۸۷/۷/۱۵ شورای دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب در شورای دانشگاه لازم‌الاجرا است.

«اینجانب آرش معروف دانشجوی رشته نانوفناوری ورودی سال تحصیلی ۱۳۸۸ مقطع کارشناسی ارشد دانشکده فنی و مهندسی متعهد می شوم کلیه نکات مندرج در آئین نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش های علمی دانشگاه تربیت مدرس را در انتشار یافته های علمی مستخرج از پایان نامه / رساله تحصیلی خود رعایت نمایم. در صورت تخلف از مفاد آئین نامه فوق الاشعار به دانشگاه وکالت و نمایندگی می دهم که از طرف اینجانب نسبت به لغو امتیاز اختراع بنام بنده و یا هر گونه امتیاز دیگر و تغییر آن به نام دانشگاه اقدام نماید. ضمناً نسبت به جبران فوری ضرر و زیان حاصله بر اساس برآورد دانشگاه اقدام خواهم نمود و بدینوسیله حق هر گونه اعتراض را از خود سلب نمودم»

امضاء:

تاریخ: ۱۳۹۰/۱۲/۲۶

آیین نامه چاپ پایان نامه (رساله) های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله) های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه، دانش آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله) ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

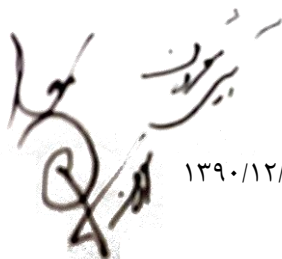
«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه کارشناسی ارشد/ رساله دکتری نگارنده در رشته نانوفناوری است که در سال ۱۳۹۰ در دانشکده فنی و مهندسی دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی جناب آقای دکتر وحید احمدی، مشاوره جناب آقای دکتر مهدی پورفتح از آن دفاع شده است.»

ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت چاپ) را به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر در معرض فروش قرار دهد.

ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت مدرس، تأدیه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده ۴ را از محل توقیف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تأمین نماید.

ماده ۶: اینجانب آرش معروف دانشجوی رشته نانوفناوری مقطع کارشناسی ارشد تعهد فوق و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.



نام و نام خانوادگی:

تاریخ و امضا: ۱۳۹۰/۱۲/۶



دانشگاه تربیت مدرس
دانشکده فنی و مهندسی

پایان نامه دوره کارشناسی ارشد مهندسی نانوفناوری

شبیه‌سازی و تحلیل فوتوترانزیستور مبتنی بر نانونوارهای گرافینی آرمچیر

آرش معروف

استاد راهنما:

دکتر وحید احمدی

استاد مشاور:

دکتر مهدی پورفتح

زمستان ۱۳۹۰

چکیده

در این پایان نامه به بررسی و تحلیل عملکرد آشکارساز نوری با ساختار ترانزیستوری و ناحیه فعال از جنس نانونوار گرافین پرداخته شده است. در این راه ابتدا نانونوار گرافین معرفی و شیوه به دست آوردن هامیلتونین آن با رویکرد تنگبست توضیح داده شده است. با استناد به نتایج حاصل از شبیه سازی ها در رویکرد تنگبست نیاز به در نظر گرفتن سه همسایگی اول و آثار لبه ای مشهود است. سپس با استفاده از قانون طلایی فرمی ضریب جذب نوری و بازدهی کوانتومی برای نانونوار با طول نامحدود محاسبه گردید، که مقدار بازدهی کوانتومی از مرتبه ۱۰٪ به دست آمد. همچنین با استفاده از این قانون اثر اعمال بایاس به نانونوار بررسی شد. این بررسی ها نشان می دهند که با اعمال بایاس بین سورس و درین افزاره بازدهی کوانتومی افزایش می یابد، اما به طور کلی افزایش اندازه ولتاژ گیت موجب کاهش بازدهی کوانتومی می گردد. در موارد خاصی بایاس اعمالی به گیت منجر به از بین رفتن گرادیان رابطه پاشندگی انرژی-تکانه شده، لذا جذب موثر در ناحیه گسترده تری از ناحیه اول بریلوئن اتفاق می افتد و به تبع آن بازدهی کوانتومی از مرتبه ۳۰٪ حاصل می شود. در ادامه با استفاده از توابع گرین غیر تعادلی به بررسی عملکرد افزاره پرداخته و جریان تاریک و سهم خطی جریان نوری محاسبه شده است. با انجام این شبیه سازی ها برای افزاره با ساختار ترانزیستوری جریان تاریک در مرتبه میکروآمپر پیش بینی می شود. برای کاهش جریان تاریک ساختاری با دو گیت پیشنهاد گردید که به گیت های آن ولتاژ با علامت مختلف متصل گردد. در صورت بایاس افزاره پیشنهادی در ولتاژ آستانه هدایت، شبیه سازی ها جریان تاریک از مرتبه نانوآمپر و بازدهی کوانتومی در حدود ۷٪ را پیش بینی می نمایند.

کلید واژه: نانونوار گرافین، آشکارساز نوری، توابع گرین غیر تعادلی، قانون طلایی فرمی.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فهرست شکل‌ها	ج
فهرست جدول‌ها	ز
فصل ۱- مقدمه	۱
۱-۱- پیشگفتار	۱
۱-۲- اهداف تحقیق	۴
۱-۳- ساختار پایان نامه	۴
فصل ۲- مبانی نظری فیزیک نانونوار گرافین	۵
۱-۲- مقدمه	۵
۲-۲- ساختار بلوری گرافین و معرفی نانونوار آن	۵
۳-۲- تشکیل هامیلتونین نانونوار گرافین	۸
۴-۲- هامیلتونین در فضای مد	۱۰
۵-۲- رابطه پاشندگی انرژی- تکانه نانونوار گرافین	۱۲
۶-۲- جمع بندی	۱۷
فصل ۳- مبانی فیزیک شبیه‌سازیها برای فوتوترانزیستور نوری	۱۹
۱-۳- مقدمه	۱۹
۲-۳- مدل تحلیلی افزاره	۱۹
۱-۲-۳- مکانیسم ترمویونیک	۲۱
۲-۲-۳- ارزیابی مدل تحلیلی و ارائه راهکار جهت ارتقاء آن	۲۲
۳-۳- قانون طلایی فرمی	۲۳
۱-۳-۳- هامیلتونین برهم کنش نور و ماده	۲۳
۲-۳-۳- نرخ جذب	۲۴
۳-۳-۳- ضریب جذب نوری و قسمت موهومی ضریب دی الکتریک ماده	۲۶
۴-۳- مطالعه و بررسی انتقال در نانونوار گرافین با استفاده از توابع گرین	۲۸
۱-۴-۳- مقدمات	۲۸
۲-۴-۳- انتقال در یک نانوساختار	۳۲
۳-۴-۳- تشکیل ماتریس‌های خود-انرژی برای اتصال یک سو نامحدود	۳۷
۱-۳-۴-۳- تشکیل ماتریس‌های خود-انرژی برای اتصالی با شبکه گرافین	۳۸
۴-۴-۳- روش مورد استفاده برای محاسبه جریان نوری در فضای حقیقی	۳۹
۱-۴-۴-۳- هامیلتونین اندرکنش الکترومغناطیسی	۴۰
۲-۴-۴-۳- میدان الکترومغناطیسی به فرم کوانتیزه دوم	۴۰

۴۱	تبدیل هامیلتونین به فرم کوانتیزه دوم.....	۳-۴-۴-۳
۴۲	خود انرژی اندرکنش الکترون- فوتون.....	۳-۴-۴-۴
۴۳	تابع گرین برانگیزش خطی فوتونی و جریان نوری.....	۳-۴-۴-۵
۴۶	ارتباط بین ضریب جذب، بازدهی کوانتمی و پاسخدهی نوری	۳-۵
۴۶	جمع‌بندی	۳-۶
۴۹	فصل ۴ - نتایج شبیه‌سازی	
۴۹	مقدمه.....	۴-۱
۴۹	رابطه پاشندگی و چگالی حالات الکترونی	۴-۲
۵۴	قانون طلایی فرمی	۴-۳
۶۶	توابع گرین غیر تعادلی	۴-۴
۷۸	ساختار پیشنهادی	۴-۵
۷۸	نتایج حاصل از قانون طلایی فرمی	۴-۵-۱
۸۲	نتایج حاصل از توابع گرین غیر تعادلی	۴-۵-۲
۸۳	جمع‌بندی	۴-۶
۸۷	فصل ۵ - نتیجه‌گیری و پیشنهادات	
۸۷	نتیجه‌گیری	۵-۱
۸۷	پیشنهادات	۵-۲
۸۹	ضمیمه أ - مدل تین-گردن	
۹۳	فهرست مراجع	
۹۵	واژه نامه فارسی به انگلیسی	
۹۷	واژه نامه انگلیسی به فارسی	

فهرست شکل‌ها

صفحه

عنوان

- شکل ۱-۱- ساختارهای مختلف کربن (الف) الماس (ب) فولرن (ج) نانولوله کربنی (د) گرافیت (ه) گرافین پلکس (و) گرافین (ز) گرافین دولایه [۲] ۲
- شکل ۲-۱- تصویر SEM از آرایه‌های از ۱۰ نانونوار گرافین [۷] ۳
- شکل ۱-۲- هیبریداسیون sp^2 در گرافین: الف) پر شدن اوربیتالها در فرآیند هیبریداسیون (ب) ساختار اوربیتالها پس از هیبریداسیون [۹] ۶
- شکل ۲-۲- ساختار بلوری گرافین. الف) گرافین در فضای مستقیم یک بلور براوه با پایه دو اتمی (ب) ناحیه بریلوئن اول گرافین شش ضلعی است، K و K' لبه‌های ناحیه بریلوئن هستند. [۹] ۶
- شکل ۳-۲- نانونوار گرافین و سلول واحد آن الف) زیگزاگ (ب) آرمچیر ۷
- شکل ۴-۲- نانونوار گرافین آرمچیر هیدروژنه و شمارگذاری اتمهای آن ۸
- شکل ۵-۲- هامیلتونین پس از اعمال تغییر پایهها ۱۲
- شکل ۶-۲- تغییر شکاف انرژی با افزایش تعداد اتمهای سلول واحد در سه گروه نانونوار آرمچیر ۱۵
- شکل ۷-۲- ساختار نوار انرژی نانونوار آرمچیر الف) $N = 78 = 3 \times p$ (ب) $N = 82 = 3 \times p + 1$ (ج) $N = 86 = 3 \times p + 2$ ۱۶
- شکل ۸-۲- ساختار نوار انرژی نانونوار زیگزاگ برای $N = 42$ ۱۷
- شکل ۱-۳- نمای افزاره مورد بررسی الف) از بالا (ب) جانبی [۲۴] ۱۹
- شکل ۲-۳- ساختار نوار انرژی افزاره مورد بررسی الف) در بایاس پایین گیت که منجر به جریان تونلی نشده بدون تابش نور (ب) در بایاس پایین گیت که منجر به جریان تونلی نشده با تابش نور (ج) در بایاس بالای گیت که منجر به جریان تونلی شده و با تابش نور [۲۴] ۲۰
- شکل ۳-۳- پاسخدهی به صورت تابعی از انرژی نرمال شده فوتون به گاف انرژی ۲۲
- شکل ۴-۳- فرآیندهای جذب و نشر یک فوتون در سامانه دو ترازه ۲۶
- شکل ۵-۳- الف) یک افزاره در تعادل (ب) حل بازگشتی معادلات پواسون و شرودینگر ۲۹
- شکل ۶-۳- یک کانال که با یک اتصال به دنیای خارج وصل میشود [۳۶] ۳۱
- شکل ۷-۳- کانال متصل به دو اتصال سورس و درین [۳۶] ۳۳
- شکل ۸-۳- روندنمای به دست آوردن جریان نوری با استفاده از توابع گرین غیرتعادلی ۴۵
- شکل ۱-۴- رابطه پاشندگی انرژی- تکانه الف) ۲۰ (ب) ۲۴ (ج) ۳۲ (د) ۳۶ اتم در سلول واحد ۵۱
- شکل ۲-۴- چگالی حالات الکترونی برای الف) ۲۰ (ب) ۲۴ (ج) ۳۲ (د) ۳۶ اتم در سلول واحد ۵۳
- شکل ۳-۴- رابطه پاشندگی انرژی- تکانه نانونوار با در نظر گرفتن اثر همسایه سوم و آثار لبه‌های ۵۴
- شکل ۴-۴- الف) طرحواره افزاره مورد بررسی (ب) طرحواره افزاره پیشنهادی با دو گیت ۵۵
- شکل ۵-۴- نتایج حاصل از قانون طلایی فرمی برای نانونوار با ۲۰ اتم در سلول واحد بدون بایاس الف) ضریب جذب (ب) بازدهی کوانتومی (ج) پاسخدهی نوری ۵۶

شکل ۴-۶- نتایج حاصل از قانون طلایی فرمی برای نانونوار با ۲۴ اتم در سلول واحد بدون بایاس (الف) ضریب جذب (ب) بازدهی کوانتومی (ج) پاسخدهی نوری ۵۷

شکل ۴-۷- نتایج حاصل از قانون طلایی فرمی برای نانونوار با ۳۲ اتم در سلول واحد بدون بایاس (الف) ضریب جذب (ب) بازدهی کوانتومی (ج) پاسخدهی نوری ۵۸

شکل ۴-۸- نتایج حاصل از قانون طلایی فرمی برای نانونوار با ۳۶ اتم در سلول واحد بدون بایاس (الف) ضریب جذب (ب) بازدهی کوانتومی (ج) پاسخدهی نوری ۵۹

شکل ۴-۹- نتایج حاصل از قانون طلایی فرمی برای نانونوار با ۲۰ اتم در سلول واحد با اعمال بایاس ۰/۰۵ ولت برای ولتاژهای گیت متفاوت (۱) مد اول (۲) مد دوم (الف) ضریب جذب (ب) بازدهی کوانتومی (ج) پاسخدهی نوری ۶۱

شکل ۴-۱۰- نتایج حاصل از قانون طلایی فرمی برای نانونوار با ۲۴ اتم در سلول واحد با اعمال بایاس ۰/۰۵ ولت برای ولتاژهای گیت متفاوت (۱) مد اول (۲) مد دوم (الف) ضریب جذب (ب) بازدهی کوانتومی (ج) پاسخدهی نوری ۶۲

شکل ۴-۱۱- نتایج حاصل از قانون طلایی فرمی برای نانونوار با ۳۲ اتم در سلول واحد با اعمال بایاس ۰/۰۵ ولت برای ولتاژهای گیت متفاوت (۱) مد اول (۲) مد دوم (الف) ضریب جذب (ب) بازدهی کوانتومی (ج) پاسخدهی نوری ۶۳

شکل ۴-۱۲- نتایج حاصل از قانون طلایی فرمی برای نانونوار با ۳۶ اتم در سلول واحد با اعمال بایاس ۰/۰۵ ولت برای ولتاژهای گیت متفاوت (۱) مد اول (۲) مد دوم (الف) ضریب جذب (ب) بازدهی کوانتومی (ج) پاسخدهی نوری ۶۴

شکل ۴-۱۳- تغییرات رابطه پاشندگی در اثر اعمال بایاس (الف) مد اول نانونوار با ۳۶ اتم در سلول واحد (ب) مد دوم نانونوار با ۳۲ اتم در سلول واحد ۶۵

شکل ۴-۱۴- چگالی مکانی حاملها در تعادل (الف) ۲۰ (ب) ۲۴ (ج) ۳۲ (د) ۳۶ اتم در سلول واحد ۶۶

شکل ۴-۱۵- انتقالدهی حاملها در تعادل (الف) ۲۰ (ب) ۲۴ (ج) ۳۲ (د) ۳۶ اتم در سلول واحد ۶۷

شکل ۴-۱۶- چگالی مکانی حاملها در کانال با ولتاژ گیت ۰/۱- ولت و ولتاژ درین ۰/۴ ولت (الف) ۲۰ (ب) ۲۴ (ج) ۳۲ (د) ۳۶ اتم در سلول واحد ۶۸

شکل ۴-۱۷- نمودار جریان بر حسب ولتاژ درین-سورس برای نانونوار با ۲۰ اتم در سلول واحد با سطح فرمی ۰/۶۵ eV در اتصالات ۶۸

شکل ۴-۱۸- نمودار جریان بر حسب ولتاژ درین-سورس برای نانونوار با ۲۰ اتم در سلول واحد با سطح فرمی ۰/۷۵ eV در اتصالات ۶۹

شکل ۴-۱۹- نمودار جریان بر حسب ولتاژ گیت-سورس برای نانونوار با ۲۰ اتم در سلول واحد با سطح فرمی ۰/۶۵ eV در اتصالات ۶۹

شکل ۴-۲۰- نمودار جریان بر حسب ولتاژ گیت-سورس برای نانونوار با ۲۰ اتم در سلول واحد با سطح فرمی ۰/۷۵ eV در اتصالات ۷۰

شکل ۴-۲۱- نمودار جریان بر حسب ولتاژ درین-سورس برای نانونوار با ۳۲ اتم در سلول واحد با سطح فرمی ۰/۶۵ eV در اتصالات ۷۰

شکل ۴-۲۲- نمودار جریان بر حسب ولتاژ درین-سورس برای نانونوار با ۳۲ اتم در سلول واحد با سطح فرمی 0.75 eV در اتصالات ۷۱

شکل ۴-۲۳- نمودار جریان بر حسب ولتاژ گیت-سورس برای نانونوار با ۳۲ اتم در سلول واحد با سطح فرمی 0.65 eV در اتصالات ۷۱

شکل ۴-۲۴- نمودار جریان بر حسب ولتاژ گیت-سورس برای نانونوار با ۳۲ اتم در سلول واحد با سطح فرمی 0.75 eV در اتصالات ۷۲

شکل ۴-۲۵- نمودار جریان بر حسب ولتاژ درین-سورس برای نانونوار با ۲۰ اتم در سلول واحد با سطح فرمی 0.75 eV در اتصالات تنها با احتساب مد اول ۷۲

شکل ۴-۲۶- نمودار جریان بر حسب ولتاژ درین-سورس برای نانونوار با ۳۲ اتم در سلول واحد با سطح فرمی 0.75 eV در اتصالات تنها با احتساب مد اول ۷۳

شکل ۴-۲۷- نمودار جریان بر حسب ولتاژ درین-سورس برای نانونوار با ۲۴ اتم در سلول واحد با سطح فرمی 0.5 eV در اتصالات ۷۳

شکل ۴-۲۸- نمودار جریان بر حسب ولتاژ گیت-سورس برای نانونوار با ۲۴ اتم در سلول واحد با سطح فرمی 0.5 eV در اتصالات ۷۴

شکل ۴-۲۹- نمودار جریان بر حسب ولتاژ درین-سورس برای نانونوار با ۲۴ اتم در سلول واحد با سطح فرمی 0.4 eV در اتصالات ۷۴

شکل ۴-۳۰- نمودار جریان بر حسب ولتاژ گیت-سورس برای نانونوار با ۳۶ اتم در سلول واحد با سطح فرمی 0.4 eV در اتصالات ۷۵

شکل ۴-۳۱- نمودار جریان بر حسب ولتاژ گیت-سورس برای نانونوار با ۳۶ اتم در سلول واحد با سطح فرمی 0.5 eV در اتصالات ۷۵

شکل ۴-۳۲- نمودار جریان بر حسب ولتاژ درین-سورس برای نانونوار با ۳۶ اتم در سلول واحد با سطح فرمی 0.4 eV در اتصالات ۷۶

شکل ۴-۳۳- نمودار جریان بر حسب ولتاژ درین-سورس برای نانونوار با ۳۶ اتم در سلول واحد با سطح فرمی 0.5 eV در اتصالات ۷۶

شکل ۴-۳۴- بازدهی کوانتومی برای افزاره با نانونوار دارای ۳۲ اتم در سلول واحد در ولتاژ گیت صفر و ولتاژ درین-سورس 0.05 ولت ۷۷

شکل ۴-۳۵- بازدهی نوری برای افزاره با نانونوار دارای ۳۲ اتم در سلول واحد در ولتاژ گیت صفر و ولتاژ درین-سورس 0.05 ولت ۷۷

شکل ۴-۳۶- نتایج حاصل از قانون طلایی فرمی برای دو مد اول و دوم نانونوار با ۲۰ اتم در سلول واحد با اعمال بایاس 0.05 ولت برای ولتاژهای گیت ± 0.05 الف) بازدهی کوانتومی ب) ضریب جذب ج) بازدهی نوری ۷۸

شکل ۴-۳۷- نتایج حاصل از قانون طلایی فرمی برای دو مد اول و دوم نانونوار با ۲۴ اتم در سلول واحد با اعمال بایاس 0.05 ولت برای ولتاژهای گیت ± 0.05 الف) بازدهی کوانتومی ب) ضریب جذب ج) بازدهی نوری ۷۹

شکل ۴-۳۸- نتایج حاصل از قانون طلایی فرمی برای دو مد اول و دوم نانونوار با ۳۲ اتم در سلول واحد با اعمال بایاس ۰/۰۵ ولت برای ولتاژهای گیت ± 0.05 (الف) بازدهی کوانتومی ب) ضریب جذب ج) پاسخدهی نوری ۸۰

شکل ۴-۳۹- نتایج حاصل از قانون طلایی فرمی برای دو مد اول و دوم نانونوار با ۳۶ اتم در سلول واحد با اعمال بایاس ۰/۰۵ ولت برای ولتاژهای گیت ± 0.05 (الف) بازدهی کوانتومی ب) ضریب جذب ج) پاسخدهی نوری ۸۱

شکل ۴-۴۰- جریان تاریک افزاره پیشنهادی با نانونواری با الف) ۲۰ ب) ۲۴ ج) ۳۲ د) ۳۶ اتم در سلول واحد ۸۲

شکل ۴-۴۱- رفتار نوری افزاره پیشنهادی با ۳۲ اتم در سلول واحد الف) بازدهی کوانتومی ب) پاسخدهی نوری ۸۳

فهرست جدول‌ها

صفحه	عنوان
۵۴	جدول ۱-۴- پارامترها و نتایج به‌دست آمده از نمودارهای رابطه پاشندگی
۶۰	جدول ۲-۴- نتایج شبیه‌سازی قانون طلایی فرمی برای نانونوار بدون اعمال پتانسیل

فصل ۱ - مقدمه

۱-۱ - پیش‌گفتار

با توجه به نیاز بازار و پیشرفت در حوزه‌های مختلف ساخت ادوات، ابعاد فن‌آوری‌های مختلف الکترونیک کوچک شده است. هر چند کوچک شدن این ابعاد مزایای خاص خود مثل سرعت بیشتر ادوات را به همراه دارد، ولی سبب شده است آثار و پدیده‌های کوانتومی خود را نشان بدهند. بنابراین کوچک‌تر شدن ادوات با فن‌آوری حاضر ساخت، امکان پذیر نیست. محدودیت‌های فیزیکی که پیش‌روی فن‌آوری سیلیکونی قرار دارد، نیاز به افزاره‌های نانوالکترونیک جدید و فن‌آوری‌های نوین ساخت را روزبه‌روز بیشتر می‌کند و انتظار می‌رود برای ادامه نقشه راه فن‌آوری نیمه‌هادی در سطح بین‌المللی^۱، از این افزاره‌ها استفاده شود [۱]. علاوه بر فن‌آوری‌های جدید مبتنی بر سیلیکن، افزاره‌های مولکولی و افزاره‌های کربنی مبتنی بر نانولوله‌های کربنی^۲ و نانونوارهای گرافینی^۳ گزینه‌های مناسبی برای صنعت الکترونیک آینده به نظر می‌رسند. برای این‌که بر مشکل آثار و پدیده‌های کوانتومی در ابعاد کوچک غلبه کرد، باید از سازوکارهای کوانتومی انتقال بار مثل انتقال قطبی شده اسپینی^۴ و مواد نوین در صنعت الکترونیک بهره برد.

یکی از گزینه‌های موجود برای به کارگیری در صنعت الکترونیک آینده، گرافین^۵ می‌باشد. گرافین نامی است که به بلور دوبعدی کربن داده شده است. کربن به صورت ترکیب‌های متفاوت و زیادی در طبیعت یافت می‌شود ولی به صورت خالص در دو حالت الماس و گرافیت وجود دارد. این دو ماده هردو تنها از کربن ساخته شده‌اند ولی نحوه تشکیل هر کدام از این دو و چیدمان مختلف اتم‌های کربن در آن‌ها خواص متفاوتی را برای هر یک از آن‌ها رقم زده است. الماس ماده‌ای عایق و بسیار سخت است در حالی که گرافیت رسانا و بسیار نرم است و ویژگی‌های ظاهری کاملاً متفاوتی دارد.

بلور دوبعدی اتم‌های کربن که به صورت شبکه‌ای از شش ضلعی‌های منتظم قرار گرفته‌اند، گرافین نام دارد. آثار و پدیده‌های کوانتومی و نسبیتی که در گرافین وجود دارند، ویژگی‌های خاصی را برای آن به وجود آورده‌اند. شکل ۱-۱ ساختارهای مختلفی را نشان می‌دهد که کربن سنگ بنای آن است.

اگر گرافین روی خود پیچیده شود ساختار صفربعدی فولرن^۶، اگر حول یک محور پیچیده شود ساختار شبه یک بعدی نانولوله کربنی و اگر چندین لایه از آن به صورت پشته‌ای با تزویج الکترونیکی روی هم قرار بگیرند ساختار سه سه‌بعدی گرافیت پدید می‌آید. در صورتی که بین لایه‌های اتمی گرافیت تزویجی وجود نداشته باشد ساختاری با نام گرافین پلکس به وجود آمده است [۲].

¹ International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS)

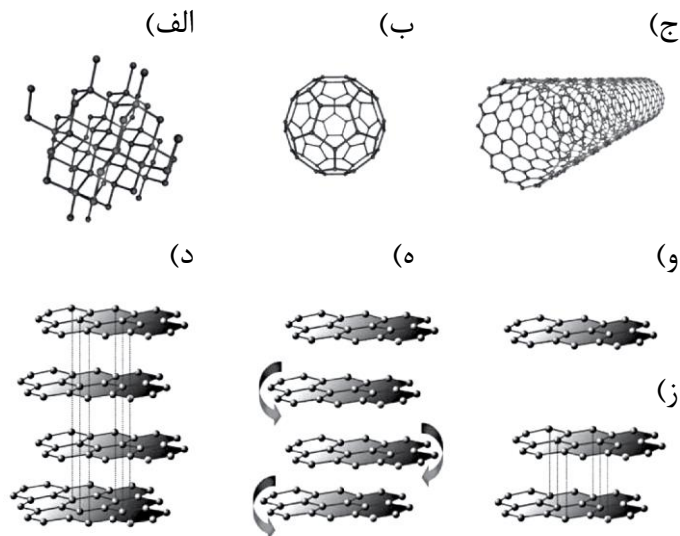
² Carbon Nanotube (CNT)

³ Graphene Nanoribbon (GNR)

⁴ Spin Polarized Transport

⁵ Graphene

⁶ Fullerene



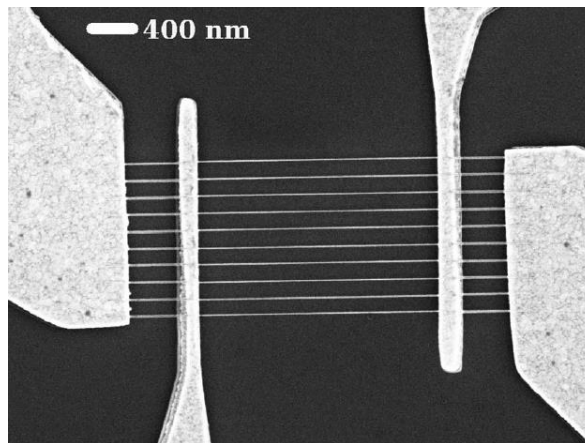
شکل ۱-۱- ساختارهای مختلف کربن (الف) الماس (ب) فولرن (ج) نانولوله کربنی (د) گرافیت (ه) گرافین پلکس (و) گرافین (ز) گرافین دولایه [۲]

رابطه تقریباً خطی بین انرژی E_k و تکانه دو بعدی $k = (k_x, k_y)$ در لبه‌های ناحیه بریلوئن^۱ گرافین، آن را برای استفاده در الکترونیک متمایز می‌کند. این رابطه در این لبه‌ها به صورت $E = v_F k$ تقریب زده می‌شود. رابطه خطی انرژی و تکانه در گرافین جرم مؤثر نزدیک به صفر را برای الکترون در این ساختار نتیجه می‌دهد [۳]. این امر سبب قابلیت حرکت بالای حامل‌ها در گرافین می‌شود.

لاندائو^۲ و پیرلز^۳ بیش از ۷۰ سال پیش بیان کردند که امکان وجود بلورهای دوبعدی مثل گرافین نیست. طبق نظریه آن‌ها در بلورهای دوبعدی نوسانات گرمایی اتم‌ها را به اندازه‌ای جابه‌جا می‌کنند که قابل مقایسه با فواصل اتمی می‌شود، بنابراین این ساختارها ناپایدار هستند. نظریه لاندائو و پیرلز توسط مرمین^۴ گسترش داده شد و با آزمایش‌های مختلف تأیید شد. این عوامل سبب شد گرافین حدود ۶۰ سال به عنوان مفهومی نظری مطرح باشد و خواص جالب الکتروپدینامیکی آن تنها از نقطه نظر این که سنگ بنای سایر ساختارها است و فیزیک جالبش به عنوان مدلی نظری بررسی شود. در سال ۲۰۰۴ گرافین برای اولین بار توسط کوستانو ناوازلف^۵ و آندره جیم^۶ از فیزیکدان‌های دانشگاه منچستر انگلیس و انستیتو فن‌آوری میکروالکترونیک روسیه سنتز شد و دوره جدیدی برای گرافین آغاز شد [۴]. وجود این بلور دوبعدی را با توجه به اندازه کوچک آن ($\ll 1 \text{ mm}$)، باندهای محکم اتم‌های کربن در این ساختار و این که از ساختاری سه‌بعدی به دست می‌آید می‌توان توجیه کرد [۵].

¹ Brillouin Zone
² Landau
³ Peierls
⁴ Mermin
⁵ Kostya Novoselov
⁶ Andre Geim

پس از ساخت گرافین برای اولین بار در سال ۲۰۰۴ روش‌های متفاوت دیگری برای رشد و تولید گرافین ابداع شده‌اند که بعضی از آن‌ها با روش‌های ساخت الکترونیکی هماهنگ هستند. اندازه‌گیری‌های انجام شده روی گرافین‌های سنتز شده، ویژگی‌های انتقال چشم‌گیری مثل قابلیت حرکت در حد $10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ برای الکترون‌ها و حفره‌ها را در این ساختار نشان داده‌اند [۶]. نیمه‌هادی‌های دیگری هم وجود دارند که قابلیت حرکت بالایی دارند ولی قابلیت حرکت آن‌ها با تغییر دما و افزودن ناخالصی بسیار تغییر می‌کند. در صورتی که در گرافین اثر دما و ناخالصی‌ها روی قابلیت حرکت کمتر است. مشکلی که وجود دارد این است که شکاف انرژی گرافین صفر است و نمی‌توان از آن به صورت مستقیم در ادوات الکترونیکی مثل ترانزیستورها استفاده کرد. با محدود کردن گرافین در یک جهت و درست کردن نوارهای باریکی از آن در ابعاد نانو می‌توان بر این مشکل فائق آمد. این نوارها، نانونوارهای گرافین نام دارند (شکل ۲-۱ [۷]).



شکل ۲-۱- تصویر SEM از آرایه‌ای از ۱۰ نانونوار گرافین [۷]

محدود کردن گرافین در یک جهت باعث می‌شود مقدار k در آن جهت کوانتیزه شود و نوارهای انرژی مختلفی در ساختار نوار انرژی به وجود آید. با تغییر شرایط مرزی این نوارها یا همان جهت برش آن‌ها روی گرافین، ممکن است در ساختار نوار انرژی شکاف انرژی به وجود آید و نانونوارها خواص نیمه‌رساناها را از خود نشان دهند [۸]. مهم‌ترین تفاوت نانونوار گرافین با گرافین این است که نانونوار گرافین می‌تواند دارای شکاف انرژی غیرصفر و قابل کنترل با عرض و شرایط مرزی باشد. هر چند قابلیت حرکت در نانونوار کمتر از گرافین است ولی امکان وجود شکاف انرژی غیرصفر، آن را برای استفاده در ادوات نانو الکترونیک مناسب می‌کند. از طرف دیگر ساختار دوبعدی نانونوار گرافین با فن‌آوری غالب ساخت ادوات نیمه‌هادی یعنی CMOS هماهنگ است. فصل مشترک نانونوار گرافین در ابعاد اتمی نسبت به نانولوله‌های کربنی بسیار بهتر است [۳]. این امر نقش اساسی در انتقال بهینه حامل‌ها در این ساختار دارد. با توجه به این‌که با تغییر عرض و شرایط مرزی می‌توان هم نانونوارهای فلزی داشت هم نیمه‌هادی، امکان ساخت ساختارهایی یکپارچه مثل ترانزیستوری که کانال و اتصالات آن از جنس نانونوار باشند، وجود دارد. این ساختارها کارایی بالاتری نسبت به ساختارهایی که جنس اتصالات و کانال آن‌ها متفاوت است، دارند.

نانونوارهای گرافینی سامانه‌هایی با گاف انرژی مستقیم در ساختار نوار انرژی خود هستند و همچنین از ضریب جذب نوری بالایی برخوردارند. بر این اساس امکان استفاده از آن‌ها در افزاره‌های الکترونیک نوری از جمله آشکارسازهای نوری نیز وجود دارد [۲].

۱-۲- اهداف تحقیق

در این تحقیق به بررسی و تحلیل آشکارساز نوری که ناحیه فعال آن از نانونوار گرافین ساخته شده می‌پردازیم. در این راه خواص الکترونیکی و نوری نانونوار گرافینی بررسی می‌شوند و سپس خواص ترابرد سامانه، تحت تابش نور مورد بررسی قرار می‌گیرد و با استفاده از نتایج به دست آمده پاسخ‌دهی نوری^۱ افزاره که یکی از مهم‌ترین پارامترها در آشکارسازهای نوری است استخراج می‌گردد.

برای بررسی افزاره مورد نظر ابتدا با استفاده از مدل تنگ‌بست^۲ هامیلتونین افزاره به دست می‌آید و پس از آن با استفاده از قانون طلایی فرمی^۳ جذب نوری در نانونوار بررسی می‌گردد. سپس با استفاده از فرمولاسیون توابع گرین غیر تعادلی خواص ترابرد افزاره تحت تابش نور و بدون تابش نور مورد مطالعه قرار می‌گیرند. در ضمیمه با اشاره به مدل تین و گردن^۴ جریان تونلی به کمک فوتون^۵ در افزاره استخراج شده و حد رسانش صفر افزاره به دست می‌آید.

۱-۳- ساختار پایان نامه

در فصل دوم این پایان نامه به مبانی نظری فیزیک نانونوارگرافین می‌پردازیم و ضمن آن شیوه استحصال هامیلتونین نانونوار از مدل تنگ‌بست تبیین می‌گردد. در ادامه این فصل ساختار نوار انرژی نانونوار با استفاده از قضیه بلاخ و ویژه توابع هامیلتونین آن به دست می‌آید. در فصل سوم به مبانی نظری آشکارساز نوری پرداخته و ضمن ارائه مدل تحلیلی ارائه شده در [۲] برای افزاره، به بررسی کاستی‌های آن پرداخته و راهکارهای ارتقاء آن بیان می‌گردد. پس از آن قانون طلایی فرمی به عنوان سنگ بنای بررسی اندرکنش نور و مواد ارائه می‌گردد. سپس به شیوه بررسی ترابرد با بهره‌گیری از توابع گرین غیر تعادلی می‌پردازیم. اندرکنش نور و ناحیه فعال آشکارساز را به صورت خود انرژی وارد فرمولاسیون توابع گرین غیر تعادلی نموده و الگوریتمی برای به دست آوردن قسمت خطی جریان با توجه به نور فرودی ارائه می‌کنیم. فصل چهارم به ارائه نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها اختصاص یافته و در فصل پنجم نتیجه‌گیری و پیشنهادات این تحقیق ارائه می‌گردد. در ضمیمه مدل تین و گردن که با استفاده از آن می‌توان به سادگی حد رسانش صفر در ساختارهای رسانا- نیمه‌رسانا- رسانا را به دست آورد، توضیح داده می‌شود.

¹ Responsivity

² Tight binding

³ Fermi's golden rule

⁴ Tien and Gordon

⁵ Photon assisted tunneling current

فصل ۲ - مبانی نظری فیزیک نانونوار گرافین

۲-۱- مقدمه

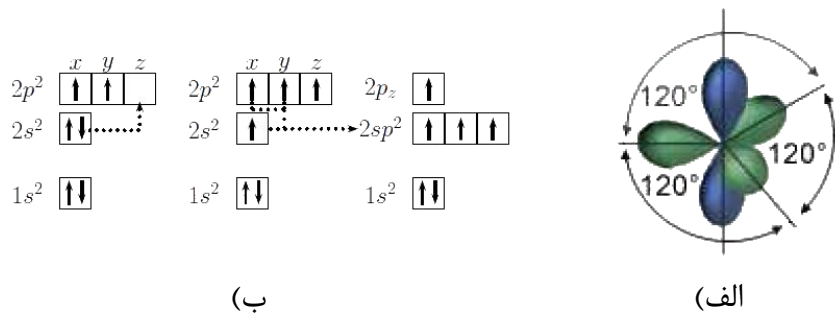
در این فصل پس از معرفی ساختار بلوری گرافین به معرفی نانونوار گرافین پرداخته شده. سپس با توجه به این که برای انجام هرگونه شبیه‌سازی نیاز به هامیلتونین توصیف کننده ساختار می‌باشیم، شیوه تشکیل هامیلتونین نانونوار گرافین با رویکرد تنگ‌بست تبیین شده و رابطه پاشندگی انرژی- تکانه نانونوار به دست آمده است. در نهایت با در نظر گرفتن نتایج، گروهی از نانونوارها که استفاده از آن‌ها برای کاربرد در ساختار مورد بررسی در این پایان‌نامه مناسب‌ترند معرفی می‌شود.

۲-۲- ساختار بلوری گرافین و معرفی نانونوار آن

گرافین بلوری دوبعدی از اتم‌های کربن است. اتم کربن شش الکترون دارد که به ترتیب اوربیتال‌های $1s^2$ ، $2s^2$ و $2p^2$ را اشغال می‌کنند. الکترون‌های $1s^2$ شدیداً مقید به هسته می‌باشند و الکترون‌های هسته‌ای^۱ نام دارند. چهار الکترون دیگر که در لایه بیرونی قرار دارند، الکترون‌های ظرفیت^۲ نامیده می‌شوند. همان‌طور که در شکل ۱-۲ نشان داده شده است، این الکترون‌ها در اوربیتال‌هایی که کمتر جایگزیده هستند جای می‌گیرند. چون اختلاف انرژی اوربیتال‌های $2s^2$ و $2p^2$ از انرژی پیوند آن‌ها کمتر است، توابع موج این الکترون‌ها به راحتی طی فرآیندی که هیبریداسیون نام دارد، با هم ترکیب می‌شوند و اوربیتال‌های ترکیبی را تشکیل می‌دهند. حالت‌های حاصل از این فرآیند در شکل ۱-۲ الف نشان داده شده است. سه حالت از این چهار حالت ترکیبی در صفحه xy قرار دارند و باهم زاویه 120° می‌سازند (شکل ۱-۲ ب). این حالت‌ها، حالت‌های σ نامیده می‌شوند و الکترون‌های آن‌ها با الکترون‌های σ همسایه تشکیل پیوند کووالانسی محکمی می‌دهند. حالت باقی مانده که حالت π نامیده می‌شود، در راستای z قرار دارد. الکترون‌های π وابستگی کمی به هسته دارند و به راحتی می‌توانند بین اتم‌های کربن جابه‌جا شوند. بنابراین خواص انتقال و الکترونیکی گرافین تحت تأثیر این الکترون‌هاست و برای بررسی این خواص کافی است حالت‌های π را بررسی کنیم [۹].

^۱ Core Electrons

^۲ Valence Electrons

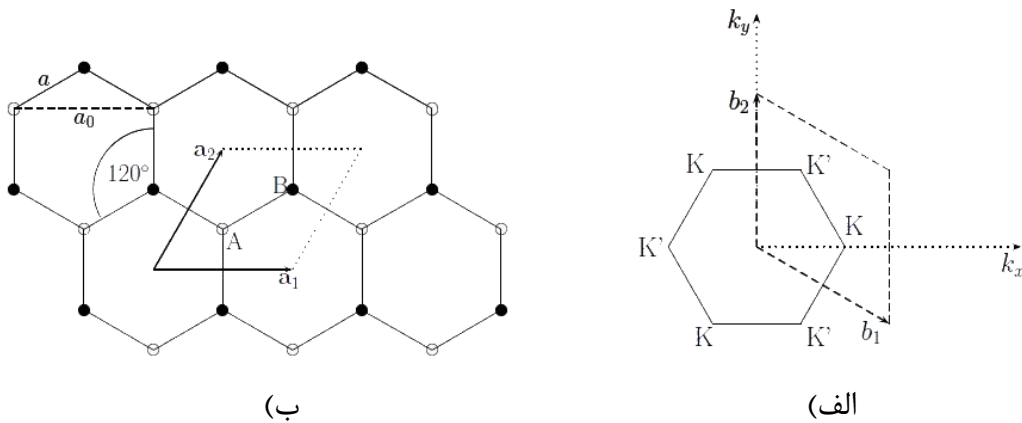


شکل ۱-۲- هیبریداسیون sp^2 در گرافین: الف) ساختار اوربیتال‌ها پس از هیبریداسیون ب) پر شدن اوربیتال‌ها در فرآیند هیبریداسیون [۹]

ساختار بلور گرافین به صورت شش ضلعی‌های منظمی است که در گوشه‌های آن‌ها اتم‌های کربن قرار دارند (شکل ۲-۲-الف). این ساختار معمولاً بلور لانه زنبوری^۱ نامیده می‌شود. هرچند گرافین ساختار منظمی دارد، ولی یک بلور براوه^۲ نیست. برای آن که بتوان بلور گرافین را با یک شبکه براوه مدل کرد باید برای آن پایه دو اتمی در نظر گرفت. این اتم‌ها، اتم‌های نوع A و B نامیده می‌شوند. سلول واحد واینر-سیتز گرافین یک لوزی است که با بردارهای پایه \vec{a}_1 و \vec{a}_2 توصیف می‌شود.

$$\vec{a}_1 = a\sqrt{3}\hat{x}, \vec{a}_2 = a(\sqrt{3}/2\hat{x} + 3/2\hat{y}) \quad (1-2)$$

در رابطه (۱-۲) a فاصله بین اتم‌های کربن و برابر با $1/42$ آنگستروم است. ثابت شبکه a_0 برابر با $\sqrt{3}a$ می‌باشد [۹].



شکل ۲-۲- ساختار بلوری گرافین. الف) ناحیه بریلوئن اول گرافین شش ضلعی است، K و K' لبه‌های ناحیه بریلوئن هستند. ب) گرافین در فضای مستقیم یک بلور براوه با پایه دو اتمی [۹]

¹ Honey comb lattice

² Bravais Lattice