

اللهم اغفر لي



دانشگاه تربیت مدرس
دانشکده فنی و مهندسی

پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی الکترونیک

طراحی و شبیه سازی اثرات نقص در ترانزیستور اثر میدان گرافنی

علی محمد عبدالملکی

استاد راهنما:
دکتر داود فتحی

پاییز ۱۳۹۳

تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

آقای علی محمد عبدالملکی پایان نامه ۶ واحدی خود را با عنوان طراحی و شبیه سازی اثرات نقص در ترانزیستور اثر میدان گرافنی در تاریخ ۱۳۹۳/۹/۲۹ ارائه کردند. اعضای هیات داوران نسخه نهایی این پایان نامه را از نظر فرم و محتوا تایید کرده، پذیرش آنرا برای اخذ درجه کارشناسی ارشد الکترونیک پیشنهاد می کنند.

امضا	رتبه علمی	نام و نام خانوادگی	عضو هیات داوران
	استادیار	دکتر داود فتحی	استاد راهنما
	استادیار	دکتر سارا درباری	استاد ناظر
	استادیار	دکتر رضا سروری	استاد ناظر
	استادیار	دکتر سارا درباری	مدیر گروه (یا نماینده گروه تخصصی)

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

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی 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 هیات علمی، دانشجویان، دانش‌آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهشهای علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرحهای تحقیقاتی که با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد ذیل را رعایت نمایند:

ماده ۱- حقوق مادی و معنوی پایان‌نامه‌ها / رساله‌های مصوب دانشگاه متعلق به دانشگاه است و هرگونه بهره‌برداری از آن باید با ذکر نام دانشگاه و رعایت آیین‌نامه‌ها و دستورالعمل‌های مصوب دانشگاه باشد.

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 استاد راهنما مسئول مکاتبات مقاله 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 حاصل از نتایج پایان‌نامه / رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی دانشگاه باید با مجوز کتبی صادره از طریق حوزه پژوهشی دانشگاه و بر اساس آئین‌نامه‌های مصوب انجام می‌شود.

ماده ۴- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه 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 حوزه پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده ۵- این دستورالعمل در ۵ ماده و یک تبصره در تاریخ ۱۳۸۴/۴/۲۵ در شورای پژوهشی دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب لازم‌الاجرا است و هرگونه تخلف از مفاد این دستورالعمل، از طریق مراجع قانونی قابل پیگیری می‌شود.

نام و نام خانوادگی

علی محمد عبدالملکی

امضاء

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 _____ است که در سال _____ در دانشکده _____ دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی سرکار خانم/جناب آقای دکتر _____، مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر _____ و مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر _____ 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 رابه 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، تامین نماید.

ماده ۶: اینجانب **علی محمد عبدالملکی** دانشجوی رشته **الکترونیک** مقطع **کارشناسی ارشد**

تعهد فوق و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی: **علی محمد عبدالملکی**

تاریخ و امضا:

تقدیم به

پدر

و

مادر

عزیزم...

با سپاس صمیمانه از

استاد گرانقدرم جناب آقای دکتر داود فتحی
و همه عزیزانی که در انجام این پایان نامه از راهنمایی های ایشان استفاده کردم.

چکیده

در این پایان‌نامه، به بررسی و تحلیل عملکرد ترانزیستور اثر میدانی نانونوار گرافنی می‌پردازیم. همچنین اثرات افزودن نقص به کانال ترانزیستور و تغییر فاصله اتم‌ها در لبه نانونوار را مورد بررسی قرار می‌دهیم. برای شبیه‌سازی این ساختار از نرم افزار Nano TCAD ViDES، SIESTA و MATLAB استفاده شده است. در این راه شیوه بدست آوردن هامیلتونی نانونوار آرمچیر با رویکرد تنگ بست توضیح داده می‌شود. برای بالاتر بردن دقت محاسبات، اثر تغییر شکل لبه‌های نانونوار را نیز لحاظ می‌کنیم. برای بدست آوردن ویژگی‌های انتقالی ترانزیستور، مثل ضریب انتقال، معادلات پواسن و شرودینگر به صورت خودسازگار حل می‌شوند، که برای حل معادله شرودینگر از روش تابع گرین غیرتعادلی (Nonequilibrium Green's Function) استفاده شده است. همچنین در این پایان‌نامه، اثر نقص‌هایی از جمله: $V_2(555-777)$ و $V_2(5555-6-7777)$ بر روی ساختار باند و ویژگی‌های انتقالی ترانزیستور، از جمله ضریب انتقال، دیاگرام باند و جریان ترانزیستور مورد بررسی قرار می‌گیرد. نوسان زیر آستانه و نسبت جریان حالت روشن به جریان حالت خاموش نیز در حالت‌های مختلف مورد بررسی و مقایسه قرار می‌گیرند، که مشخص می‌شود افزودن نقص $V_2(555-777)$ در نزدیکی سورس (قرارگیری نقص در کانال در فاصله سه نانومتر از سورس با فرض طول کانال ده نانومتر) موجب افزایش نسبت جریان روشن به خاموش تا بیش از 10^5 در جریان روشنی $5/5 \times 10^{-7}$ و همچنین موجب کاهش نوسان زیر آستانه تا $67 \frac{mV}{dec}$ می‌شود.

کلیدواژه‌ها : نانونوار آرمچیر، روش تنگ‌بست، تابع گرین غیرتعادلی، ترانزیستور اثر میدانی، نقص در

کانال، اثرات لبه کانال.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فهرست جدول‌ها.....	۵
فهرست شکل‌ها.....	۵
فصل ۱- مقدمه.....	۷
۱-۱- پیش‌گفتار.....	۷
۲-۱- اهداف تحقیق.....	۸
۳-۱- ساختار پایان‌نامه.....	۸
فصل ۲- مبانی نظری فیزیک نانونوار گرافنی.....	۹
۱-۲- مقدمه.....	۹
۲-۲- تاریخچه گرافن.....	۹
۳-۲- گرافن.....	۹
۴-۲- ساختار بلوری گرافن و هندسه ی نانونوارهای گرافنی.....	۱۰
۱-۴-۲- ساختار بلوری گرافن.....	۱۰
۲-۴-۲- نانونوارهای گرافنی.....	۱۲
۵-۲- ویژگی‌های الکتریکی گرافن.....	۱۳
۶-۲- روش‌های ساخت گرافن.....	۱۴
۱-۶-۲- لایه برداری مکانیکی.....	۱۴
۲-۶-۲- تبدیل سطحی کربید سیلیکون توسط عملیات حرارتی.....	۱۵
۳-۶-۲- روش نشست شیمیایی فاز بخار.....	۱۶
۴-۶-۲- شکاف انرژی در گرافن.....	۱۶
۷-۲- ساختار باند انرژی گرافن و نانونوار گرافنی.....	۱۹
۱-۷-۲- حل تحلیلی ساختار انرژی در گرافن.....	۲۱
۲-۷-۲- همسایگی.....	۲۲
۳-۷-۲- ساختار باند انرژی نانونوار گرافنی.....	۲۴
۱-۲- نقص‌های نقطه‌ای:.....	۲۷
2-1-1- جای خالی انفرادی (SV).....	۲۷
۲-۱-۲- نقص استون-ویلز (SW).....	۲۸
۳-۱-۲- جاهای خالی چندگانه.....	۲۸
۲-۲- جمع بندی.....	۳۰
فصل ۳- مبانی فیزیک شبیه‌سازی‌ها برای ترانزیستور اثر میدان نانونوار گرافنی.....	۳۱
۱-۳- مقدمه.....	۳۱

۳۱	۲-۳- مدل تحلیلی افزاره.....
۳۳	۱-۲-۳- گسسته‌سازی فضای سه بعدی.....
۳۴	۲-۲-۳- شرایط مرزی.....
۳۵	۳-۳- حل معادله شرودینگر با بکارگیری تابع گرین غیرتعادلی.....
۳۶	۱-۳-۳- ایجاد ماتریس هامیلتونی.....
۳۷	۲-۳-۳- در نظر گرفتن تغییر شکل لبه در ساختار انرژی نانونوار آرمچیر.....
۳۸	۳-۳-۳- تابع گرین غیرتعادلی (NEGF).....
۴۱	۴-۳-۳- ضریب انتقال و جریان ترانزیستور.....
۴۶	فصل ۴- نتایج شبیه‌سازی.....
۴۶	۱-۴- مقدمه:.....
۴۶	۲-۴- تأثیر عرض نانونوار.....
۵۱	۴-۴- بررسی اثر نقص در رفتار ترانزیستور.....
۵۲	۱-۴-۴- بررسی اثر نقص بر ویژگی‌های الکترونیکی نانونوار آرمچیر.....
۵۲	4-5- شبیه‌سازی اثر نقص.....
۶۲	فصل ۵- نتیجه‌گیری و پیشنهادات.....
۶۴	فهرست مراجع.....

فهرست علائم و نشانه‌ها

عنوان	علامت اختصاری
ضریب گذر دهی الکتريکی	ε
تابع گرین	G
پتانسیل الکتروشییمیایی	μ
تابع موج	φ
خود انرژی سورس	Σ_S
خود انرژی درین	Σ_D
ضریب انتقال	T
تابع توزیع فرمی سمت سورس	f_S
تابع توزیع فرمی سمت درین	f_D
تابع طیفی	A
هامیلتونی	H
ثابت پلانک	\hbar
تابع پهن شدگی	Γ

فهرست جدول‌ها

صفحه	عنوان
۴۸	جدول ۱-۴: تغییر میزان شکاف انرژی با تغییر عرض نانونوار آرمچیر.
۴۸	جدول ۲-۴: مقادیر $ION/IOFF$ و نوسان زیر آستانه بر حسب (mV/dec) برای عرض‌های مختلف در نانونوار در ترانزیستور گرافنی.
۵۰	جدول ۳-۴: مقادیر $ION/IOFF$ و نوسان زیر آستانه بر حسب (mV/dec) برای حالت‌های مختلف افزودن نقص در عرض نانونوار.
۵۸

فهرست شکل‌ها

صفحه	عنوان
۷	شکل ۱-۱: ساختارهای مختلف کربن
۱۰	شکل ۱-۲: ساختار شش ضلعی ورق گرافن
۱۱	شکل ۲-۲: ساختار اوربیتال‌ها و نحوه پرشدن آنها در فرآیند هیبریداسیون
۱۱	شکل ۳-۲: ساختار بلوری گرافن
۱۲	شکل ۴-۲: شمای کلی انواع لبه‌ها در نانونوار گرافنی
۱۴	شکل ۵-۲: شمای تونل زنی برای حالات کلاسیک، کوانتومی و کوانتوم نسبیتی
۱۵	شکل ۶-۲: شمای مالش یک گرافیت به زیرلایه و تولید یک صفحه‌ی گرافنی
۱۷	شکل ۷-۲: ایجاد شکاف انرژی در گرافن دولایه
۱۸	شکل ۸-۲: شکاف انرژی ناشی از ایجاد کشش در گرافن
۲۱	شکل ۹-۲: شبکه گرافن
۲۵	شکل ۱۰-۲: نانونوار آرمچیر با ۵ اتم در پهنا
۲۶	شکل ۱۱-۲: ساختار باند انرژی نانونوار آرمچیر با $N=12$ اتم در پهنا
۲۶	شکل ۱۲-۲: ساختار باند انرژی نانونوار آرمچیر با $N=14$ اتم در پهنا
۲۷	شکل ۱۳-۲: ساختار باند انرژی نانونوار آرمچیر با $N=16$ اتم در پهنا
۲۸	شکل ۱۴-۲: ساختار اتمی نقص جای خالی انفرادی
۲۸	شکل ۱۵-۲: ساختار اتمی نقص استون-ویلز
۲۹	شکل ۱۶-۲: ساختار اتمی نقص جای خالی دوگانه
۳۲	شکل ۱-۳: ساختار کلی ترانزیستور شبیه‌سازی شده
۳۳	شکل ۲-۳: حل خودسازگار معادله‌های پواسن و شرودینگر به صورت نمادین
۳۴	شکل ۳-۳: سلول ورونی مربوط به I امین نقطه از مش در موقعیت Γ_1
۳۶	شکل ۴-۳: ساختار اتمی نانونوار برای ایجاد ماتریس همیلتونی
۳۸	شکل ۵-۳: ساختار شبکه اتمی با در نظر گرفتن تغییرات طول پیوند در لبه‌ها، بعد از ریلکس شدن
۴۲	شکل ۶-۳: چگالی جریان‌های ورودی و خروجی در پایانه‌های سورس و درین
۴۵	شکل ۷-۳: نمودار تابع پهن‌شدگی گرمایی بر حسب انرژی و در دماهای مختلف
۴۶	شکل ۱-۴: نمودار جریان بر حسب ولتاژ گیت برای سه نانونوار با $N = 12, 16, 18$
۴۷	شکل ۲-۴: نمودار ضریب انتقال (T(E) و ساختار باند برای $N = 12$
۴۷	شکل ۳-۴: نمودار ضریب انتقال (T(E) و ساختار باند برای $N = 16$
۴۸	شکل ۴-۴: نمودار ضریب انتقال (T(E) و ساختار باند برای $N = 18$
۴۹	شکل ۵-۴: نمودار تغییرات شکاف انرژی ایجاد شده در نانونوار بر حسب پهنای نانونوار
۵۰	شکل ۶-۴: مقایسه نسبت $\frac{I_{ON}}{I_{OFF}}$ بر حسب I_{ON} برای عرضهای مختلف نانونوار

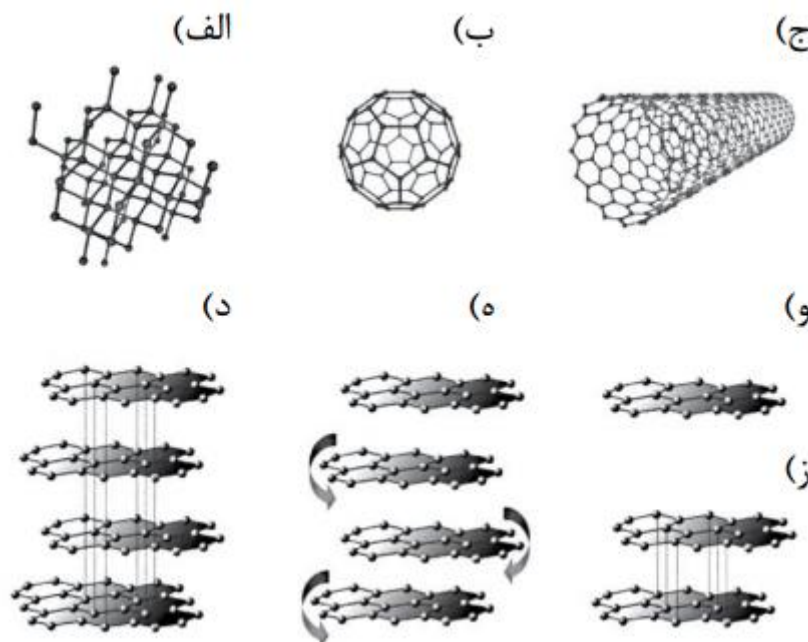
- شکل ۴-۷: نمودار هدایت انتقالی (gm) برای عرض‌های مختلف کانال. ۵۱
- شکل ۴-۸: نانونوار آرمچیر با $N = 16$ ، با نقص ۵۵۵-۷۷۷ و ساختار انرژی آن. ۵۳
- شکل ۴-۹: نانونوار آرمچیر با $N = 16$ ، با نقص ۵۵۵۵-۶-۷۷۷۷ و ساختار انرژی آن. ۵۴
- شکل ۴-۱۰: ضریب انتقال قبل و بعد از اعمال نقص ۵۵۵-۷۷۷. ۵۴
- شکل ۴-۱۱: ضریب انتقال قبل و بعد از اعمال نقص ۵۵۵۵-۶-۷۷۷۷. ۵۵
- شکل ۴-۱۲: نمودار جریان بر حسب ولتاژ گیت در سه مکان مختلف برای نقص ۵۵۵-۷۷۷. ۵۵
- شکل ۴-۱۳: نمودار جریان بر حسب ولتاژ گیت در سه مکان مختلف برای نقص ۵۵۵۵-۶-۷۷۷۷. ۵۶
- شکل ۴-۱۴: مقایسه نسبت $\frac{I_{ON}}{I_{OFF}}$ در سه مکان مختلف برای نقص ۵۵۵-۷۷۷. ۵۷
- شکل ۴-۱۵: مقایسه نسبت $\frac{I_{ON}}{I_{OFF}}$ در سه مکان مختلف برای نقص ۵۵۵۵-۶-۷۷۷۷. ۵۷
- شکل ۴-۱۶: نمودار هدایت انتقالی (gm) برای نقص ۵۵۵-۷۷۷ در مکان‌های مختلف کانال. ۵۸
- شکل ۴-۱۷: نمودار هدایت انتقالی (gm) برای نقص ۵۵۵۵-۶-۷۷۷۷ در مکان‌های مختلف کانال. ۵۹
- شکل ۴-۱۸: دیاگرام باند و طیف جریان برای نقص ۵۵۵-۷۷۷ نزدیک سورس، $VGS = -0/2v$ ۶۰
- شکل ۴-۱۹: دیاگرام باند و طیف جریان برای نقص ۵۵۵-۷۷۷ وسط کانال، $VGS = 0/3v$ ۶۱

ز

فصل ۱ - مقدمه

۱-۱ - پیش‌گفتار

گرافن یک ساختار لانه زنبوری با پهنای یک اتم است، که اولین بار در اواخر سال ۲۰۰۴ به روش مکانیکی از گرافیت جدا شد [۱]. در این ساختار هر اتم کربن با سه اتم کربن مجاور پیوند داده و دارای یک الکترون آزاد می‌باشد.



شکل ۱-۱: ساختارهای مختلف کربن (الف) الماس (ب) فولرن (ج) نانولوله کربنی (د) گرافیت (ه) گرافن پلکس (و) گرافن (ز) گرافن دولایه.

قبل از کشف گرافن، نانو لوله های کربنی برای مدت چندین سال مورد توجه پژوهشگران بودند. دلیل این توجه، ویژگی های منحصر به فرد این ماده است، که از مهم ترین این ویژگی ها می توان به موبیلیتی بالای الکترون اشاره کرد. مقالاتی که در سال های اخیر در مورد شبیه سازی های الکترونیکی مانند ماسفت ها با استفاده از نانو لوله های کربنی منتشر شده است، نشان می دهد که این ماده می تواند نقش مهمی در آینده الکترونیک سرعت بالا ایفا کند [۲،۳]. اما در عمل به دلیل ساختار غیر مسطح این ماده، بکارگیری آن در مدارات مجتمع با دشواری همراه است. مزیت گرافن نسبت به نانولوله های کربنی این است که به خاطر ساختار دو بعدی که دارد، به راحتی با استفاده از روش لیتوگرافی ساخته می شود. علاوه بر این، با هندسه مسطح به کار گرفته شده در صنعت نیمه هادی و مدارات مجتمع همخوانی دارد [۴]. گرافن به خاطر ساختار دو بعدی و موبیلیتی بالای حامل ها برای کاربرد در ساخت افزاره های الکترونیکی بسیار مناسب می باشد. اما شکاف انرژی صفر در گرافن باعث شده است که خاموش کردن افزاره های ساخته شده با گرافن بسیار مشکل باشد. نسبت جریان روشن به خاموش که یکی از مشخصه های مهم قطعات الکترونیکی می باشد، در گرافن

در محدوده ۲ تا ۲۰ می باشد که نسبت به ترانزیستورهای امروزی که در محدوده ۱۰^۶ تا ۱۰^۸ می باشد، بسیار کم است. برای اینکه بتوانیم از گرافن در کانال ترانزیستور استفاده کنیم، باید در ساختار باند انرژی آن شکاف ایجاد کنیم. یکی از مهم ترین روش ها، برش گرافن به صورت نانو نوار گرافنی می باشد که با این کار می توان الکترون ها را در یک جهت محدود نموده و شکاف انرژی ایجاد کرد و با تغییر پهناي نانونوار می توان به شکاف انرژی دلخواه رسید. البته هرچه قدر پهناي نانو نوار کمتر باشد، فاصله بین نوارهای انرژی بیشتر می شود و در نتیجه شکاف انرژی ایجاد شده افزایش می یابد. از طرفی با کاهش پهناي نانونوار، جرم موثر افزایش می یابد و در نتیجه موبیلیتی کم می شود [۵].

۱-۲- اهداف تحقیق

هدف از این تحقیق طراحی و شبیه سازی ترانزیستور اثر میدانی گرافنی با وجود نقص در کانال می باشد. اثر نقص های $V_2(555-777)$ و $V_2(5555-6-7777)$ روی ویژگی های ترانزیستور، از جمله ضریب انتقال و جریان ترانزیستور و همچنین متغیرهایی مانند نسبت جریان حالت روشن به جریان حالت خاموش و نوسان زیر آستانه که سرعت ترانزیستور را تعیین می کنند، مورد بررسی قرار می گیرند.

برای بررسی افزاره مورد نظر ابتدا هامیلتونی افزاره با وجود نقص در مکان های مختلف کانال بدست می آید و با استفاده از این هامیلتونی در ترانزیستور اثر میدان به تحلیل ساختار و استخراج پارامترها و مشخصات افزاره که از تابع گرین غیر تعادلی استفاده شده است می پردازیم.

۱-۳- ساختار پایان نامه

در فصل دوم این پایان نامه به مبانی نظری فیزیک نانونوار گرافن می پردازیم و ضمن آن شیوه استصحال هامیلتونی نانونوار از مدل تنگ بست را تشریح می کنیم. در فصل سوم مبانی نظری ترانزیستور نانونوار گرافن و چگونگی حل معادلات می پردازیم. و فصل چهارم به ارائه نتایج حاصل از شبیه سازی ها اختصاص یافته است و در فصل پنجم نتیجه گیری و پیشنهادات این تحقیق ارائه می گردد.

فصل ۲ - مبانی نظری فیزیک نانونوار گرافنی

۲-۱- مقدمه

در این فصل پس از معرفی ساختار بلوری گرافن به معرفی نانونوار گرافنی پرداخته می‌شود. سپس با توجه به اینکه برای انجام هرگونه شبیه‌سازی نیاز به هامیتونی توصیف کننده ساختار می‌باشد، شیوه تشکیل هامیتونی نانونوار گرافن بار ویکرد تنگ بست تبیین شده و رابطه پاندگی انرژی - تکانه نانونوار بدست می‌آید.

۲-۲- تاریخچه گرافن

گرافن اولین بار در اواخر سال ۲۰۰۴ توسط نووسلوف و گیم از گرافیت جدا شد. در واقع گرافن از مدت‌ها قبل ساخته شده بود ولی چند دلیل سبب شده بودند که این ماده کشف نشود. اول اینکه مشاهده این ماده خیلی نازک سخت بود، دوم اینکه مرمین و ویگنر ثابت کرده بودند این ماده نمی‌تواند نظم بلند برد داشته باشد [۶]. روش مورد استفاده توسط نووسلوف و گیم در ساخت لایه های گرافن، سایش مکانیکی بود. این روش در آن زمان برای تولید گرافن چند لایه با ابعاد ۱۰ میکرون بسیار کارآمد و مطمئن بود. همچنین این دو دانشمند در همین سال توانستند اثر میدان دوقطبی گرافن را مشاهده کنند. یک سال بعد آقایان گیم، نووسلوف، فیلیپ کیم و ژانگ به اثر کوانتومی غیرعادی هال پی بردند که ذات بدون جرم حامل های بار را در گرافن نشان می‌دهد. و در سال ۲۰۰۶ ایشان توانستند اثر کوانتومی هال را در دمای اتاق مشاهده کنند.

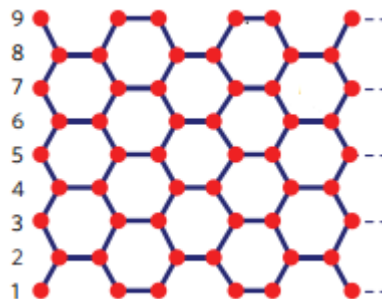
۲-۳- گرافن

گرافن و نانونوار گرافن از جمله مشهورترین ساختارهای نانو می‌باشند که با توجه به خواص الکتریکی، مکانیکی و حرارتی منحصر به فردی که دارند به عنوان کاندید به منظور استفاده در افزاره‌های نسل جدید معرفی شده اند. گرافن و گرافیت ۱ اشکال دوبعدی کربن با پیوند sp^2 هستند که در نوک مداد یافت می‌شوند. گرافیت از ورقه های گرافن روی هم انباشته تشکیل شده است. این ورقه ها از یکدیگر 0.3 نانومتر فاصله دارند و توسط نیروهای ضعیف واندروالس^۲ در کنار یکدیگر قرار گرفته اند. تعامل ضعیف بین ورقه ها به آنها اجازه می‌دهد که به آسانی در عرض لغزش کنند. این نکته به مدادها قابلیت نوشتن و به گرافیت خاصیت نرم بودن می‌دهد. ورق دو بعدی گرافن دارای ساختار لانه زنبوری بوده و ویژگی های بسیار جالبی دارد. به همین دلیل توجه بسیاری از دانشمندان و محققان را به سوی خود جلب نموده است. این ویژگی ها شامل ویژگی های الکتریکی، مکانیکی و... می‌باشند. خواص گرمایی، مکانیکی و الکتریکی از ویژگی های مهم گرافن است. یکی از این ویژگی‌ها مقاومت این ماده در برابر فشار است. سختی این ماده در برابر

^۱ Graphite

^۲ Van der Waals force

فشار در حد الماس است [۷]. هدایت گرمایی گرافن نیز به خاطر ساختار یکپارچه‌اش از دیگر ویژگی‌های آن است. در شکل زیر، ساختار شش ضلعی ورق گرافن قابل مشاهده است.



شکل ۱-۲: ساختار شش ضلعی ورق گرافن

۲-۴- ساختار بلوری گرافن و هندسه ی نانونوارهای گرافنی

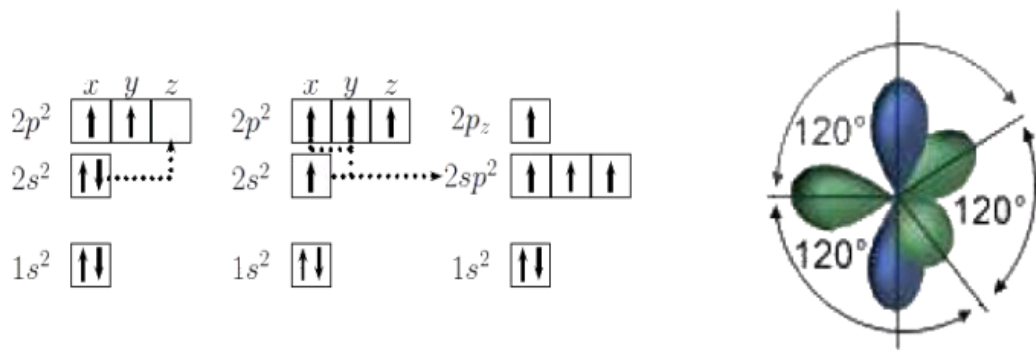
۲-۴-۱- ساختار بلوری گرافن

گرافن بلوری دو بعدی از اتم‌های کربن است. اتم کربن شش الکترون دارد که به ترتیب اوربیتال‌های s^2 ۱، s^2 ۲ و p^2 ۲ را اشغال می‌کنند. الکترون‌های s^2 ۱ شدیداً مقید به هسته هستند و الکترون‌های هسته ای^۱ نام دارند. چهار الکترون دیگر که در لایه بیرونی قرار دارند، الکترون‌های ظرفیت^۲ نامیده می‌شوند. همانطور که در شکل ۲-۲ نشان داده شده است، این الکترون‌ها در اوربیتال‌هایی که کمتر جایگزیده هستند جای می‌گیرند. چون اختلاف انرژی اوربیتال‌های s^2 ۲ و p^2 ۲ از انرژی پیوند آن‌ها کمتر است، توابع موج این الکترون‌ها به راحتی طی فرآیندی که هیبریداسیون^۳ 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 با هم زاویه‌ی 120° درجه می‌سازند (شکل ۲-۲). این حالت‌ها، حالت‌های σ نامیده می‌شوند و الکترون‌های آنها با الکترون‌های σ همسایه تشکیل پیوند کووالانسی محکمی می‌دهند. حالت‌های باقی مانده که حالت π نامیده می‌شوند، در راستای z قرار دارند. الکترون‌های π وابستگی کمتری به هسته دارند و به راحتی می‌توانند بین اتم‌های کربن جا به جا شوند. بنابراین خواص انتقال و الکترونیکی گرافن تحت تاثیر این الکترون‌ها می‌باشند و برای بررسی این خواص کافی است که حالت‌های π را بررسی کنیم [۸].

^۱ Core electrons

^۲ Valence electrons

^۳ hybridization

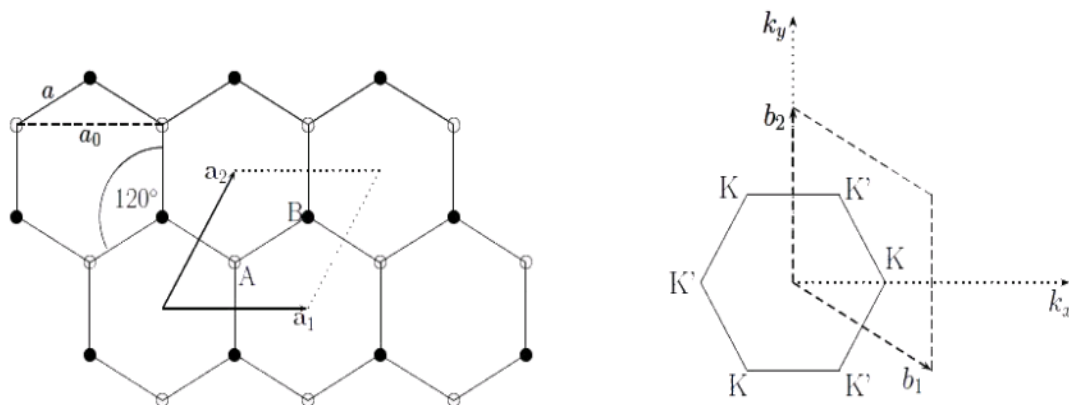


شکل ۲-۲: ساختار اوربیتال‌ها بعد از هیبریداسیون و نحوه پرشدن اوربیتال‌ها در فرآیند هیبریداسیون [۸]

ساختار بلور گرافن به صورت شش ضلعی‌های منتظمی است که در گوشه‌های آن اتم‌های کربن قرار دارند (شکل ۲-۳ الف). این ساختار بلور لانه زنبوری^۱ نامیده می‌شود. هرچند گرافن ساختار منتظمی دارد، ولی یک بلور براوه^۲ نیست. برای آنکه بتوان بلور گرافن را با یک شبکه‌ی براوه مدل کرد، باید برای آن پایه دو اتمی در نظر گرفت. این اتم‌ها، اتم‌های نوع A و B نامیده می‌شوند. سلول ابتدایی این ساختار یک لوزی است که با بردارهای پایه \vec{a}_1, \vec{a}_2 توصیف می‌شوند.

$$\vec{a}_1 = a\sqrt{3}\hat{x}, \vec{a}_2 = a(\sqrt{3}/2\hat{x} + 3/2\hat{y}) \quad (۱-۲)$$

در رابطه (۱-۲)، a فاصله‌ی بین اتم‌های کربن و برابر با $1/\sqrt{3}$ آنگستروم می‌باشد. ثابت شبکه a_0 برابر با $\sqrt{3}a$ می‌باشد.



شکل ۲-۳: ساختار بلوری گرافن. الف) ناحیه بریلوئن اول گرافن شش ضلعی است، K و K' لبه‌های ناحیه‌ی بریلوئن هستند. ب) گرافن در فضای مستقیم یک بلور براوه با پایه دو اتمی [۸]

شبکه معکوس گرافن مشابه شبکه‌ی مستقیم آن می‌باشد که ۹۰ درجه چرخش کرده است (شکل ۲-۳ ب). بردارهای واحد شبکه معکوس عبارتند از:

$$\vec{b}_1 = 2\pi / \sqrt{3}a(\hat{x} - 1/\sqrt{3}\hat{y}), \vec{b}_2 = 4\pi / 3a\hat{y} \quad (۲-۲)$$

^۱ Honeycomb lattice

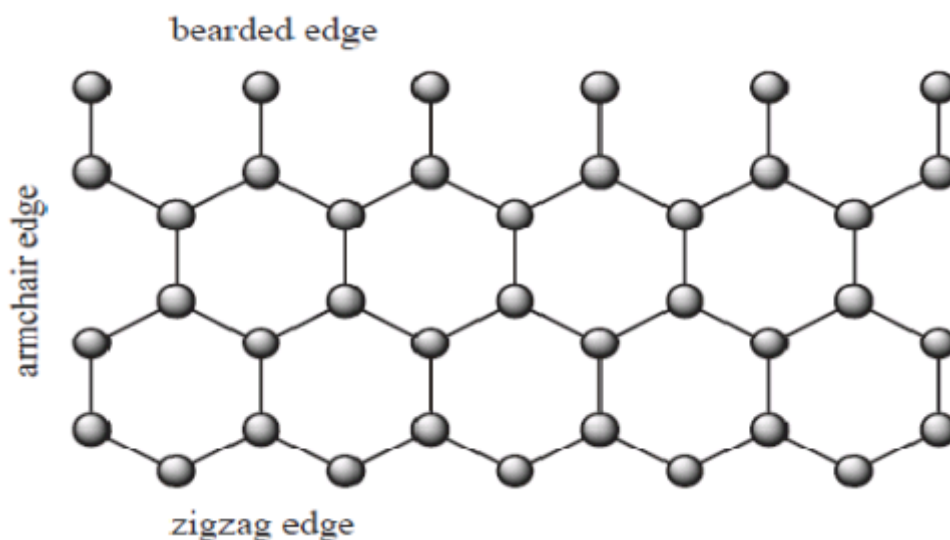
^۲ Bravais lattice

همان طور که در شکل ۲-۳-ب هم نشان داده شده است ، از شش گوشه ناحیه اول بریلوئن تنها دو گوشه از آن ها از هم متمایزند و بقیه با انتقال این دو نقطه به دست می آیند.

۲-۴-۲- نانونوارهای گرافنی

همانگونه که می دانیم ، اختلاف اصلی بین مواد در اندازه شکاف انرژی آنها است. نیمه هادی ها موادی هستند که شکاف انرژی در آنها بیشتر از فلزات (شکاف انرژی فلزات بسیار کوچک و یا صفر است) و کمتر از عایق ها هستند. گرافن ماده ای با شکاف انرژی صفر است. از طرفی می دانیم که اکثر ادوات حالت جامد از نیمه هادی ها ساخته می شوند. بنابراین جهت استفاده ی مناسب از این ماده ی تک لایه در صنعت الکترونیک که کمک شایانی به فشرده سازی قطعات می کند ، باید بتوانیم شکاف انرژی آن را به یک مقدار غیر صفر افزایش دهیم. اصولاً دو روش اصلی برای کنترل خواص الکترونیکی گرافن وجود دارد. نخست تزریق شیمیایی ناخالصی های منتخب به این ساختار است [۹-۱۰]. روش دوم که در عمل بیشتر مورد استفاده قرار می گیرد ، ساخت نواری با عرض محدود و باریک (به عرض چند تا چند ده نانومتر) از گرافن است که اصطلاحاً نانونوار گرافنی نامیده می شود. برخلاف نانولوله های کربنی که در پروسه ی ساخت به صورت ترکیبی از انواع فلزی و نیمه هادی می باشند ، با برش مناسب می توان به یک نانونوار با شکاف مشخص رسید [۱۰].

بسته به جهت برش گرافن و نوع لبه ی نانونوار می توان انواع مختلفی برای نانونوار گرافن متصور شد. با این وجود دو نوع مهم و معروف آن عبارتند از آرمچیر^۱ و زیگزاگ^۲. البته اخیراً نوع جدیدی از این نوارها ساخته می شوند که به آن نوع خوشه ای^۳ می گویند. اختلاف اصلی میان این نانونوارها در جهت برش آنها است.



شکل ۲-۴: شمای کلی انواع لبه ها در نانونوار گرافنی [۱۰].

^۱ Armchair

^۲ zigzag

^۳ bearded