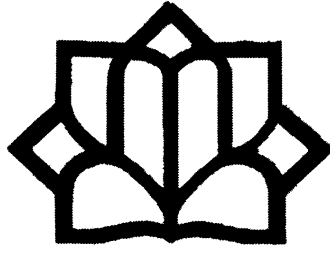


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه کاشان

دانشکده فیزیک

گروه فیزیک ماده چگال

پایان نامه

جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

رشته فیزیک

عنوان:

ترابرد اسپینی زنجیر کربنی در حضور برهم کنش الکترون-فونون

استاد راهنما:

دکتر روح اله فرقدان

توسط:

مرضیه یوسفی شیدانی

شهریور ۹۳

تقدیم به دو عشق پاک، هستی

پدر و مادر عزیزتر از جانم

که گام به گام مسیر زندگی را با عشق به آنان طی کرده ام و جز با حضور و پشتیبانی آن ها، گذراندن این مسیر برایم

ناممکن بود و تقدیم به نازنین برادرم

همدی

که وجودش، سوین بهانه ام برای زندگیست.

شکر و قدردانی

سپاس خدای را که سخنوران، دستوران او بمانند و شمارندگان، شمردن نعمت های او ندانند و کوشندگان، حق او را گزاردن نتوانند. و سلام و دور بر محمد و خاندان پاک او، طاهران معصوم، هم آنان که وجودمان و لیدار وجودشان است.

بدون شک جایگاه و منزلت معلم، اجل از آن است که در مقام قدردانی از زحمات بی شائبه می او، بازبان قاصر و دست ناتوان، چیزی بنگاریم. اما از آنجایی که تجلیل از معلم، سپاس از انسانی است که هدف و غایت آفرینش را تا این می کند و سلامت امانت های را که بر دستش سپرده اند، تضمین، بر حسب وظیفه:

از پدر و مادر عزیزم این دو معلم بزرگوارم که همواره بر کوتاهی و درستی من، قلم عضو کشیده و کریمانه از کنار غفلت هایم گذشته اند و در تمام عرصه های زندگی یار و یاور بی چشم داشت برای من بوده اند؛ از استاد با کمال و شایسته؛ جناب آقای دکتر روح الله فردان که در کمال سه صدر، با حسن خلق و فروتنی، از پیچ کلمی در این عرصه بر من دین نمودند و زحمت راهمانی این رساله را بر عهده گرفتند؛ از استاد صبور و باتقوا، جناب آقای دکتر عبدالعلی رضوانی و نیز از جناب آقای دکتر ابراهیم حدیدی سمیری که زحمت داور این رساله را متقبل شدند؛ کمال شکر و قدردانی را دارم.

باشد که این خردترین، بخشی از زحمات آنان را سپاس گوید.

چکیده

زنجیرهای کربنی ساختارهای یک بعدی هستند که اخیراً با استفاده از روش‌های تجربی، به صورت پایدار، تولید می‌شوند. این ساختارها نسبت به نانونوارهای گرافینی و نانولوله‌های کربنی، خصوصیات بارزی دارند. آرایش پیوندی در این زنجیرهای کربنی منجر به خواص ویژه از جمله رسانندگی بالا می‌شود. همچنین حالت‌های جفت نشده در این زنجیرها باعث ایجاد خواص مغناطیسی می‌گردند. از سوی دیگر انتظار می‌رود این زنجیرها به دلیل ساختار غیرصلب، به شدت تحت تأثیر برهم کنش‌های فونونی قرار گیرند.

در این تحقیق مدل سو-شریفر-هیگر (SSH) برای بررسی ترابرد در حضور و عدم حضور اثرات فونونی و مدل HH به منظور مطالعه‌ی ترابرد هم‌دوس وابسته به اسپین انتخاب شده است. همچنین با استفاده از فرمول‌بندی لاندائور-بوتیکر به بررسی ترابرد عبوری از زنجیرهای کربنی خواهیم پرداخت. ساختار پیشنهادی ما یک زنجیر کربنی متصل به دو نانونوار گرافینی زیگزاگ می‌باشد. نتایج مربوط به مدل SSH نشان می‌دهد که زنجیرهای ساده با تعداد اتم زوج به شدت تحت تأثیر برهم کنش‌های فونونی قرار می‌گیرند. در حالی که برای زنجیرهای فرد این چنین نخواهد بود. بر اساس نتایج ما، زنجیرهای کربنی فرد برای ساختارهای نانوالکترونیک مناسب‌تر از زنجیرهای زوج می‌باشند. علاوه بر زنجیرهای ساده، زنجیرهای بنزنی نیز با استفاده از مدل SSH بررسی شدند. بنابر نتایج حاصل، مشخص شد که در مورد این زنجیرها نیز، مانند زنجیرهای ساده، در حالت زوج برهم کنش‌های فونونی به شدت بر ترابرد تأثیر می‌گذارد. در این نوع زنجیرها، به دلیل کاهش تعداد پیوندهای π مقدار ترابرد کاهش می‌یابد.

خواص الکترونی زنجیرهای کربنی با استفاده از مدل HH بررسی شد. این مدل رقابت بین برهم کنش‌های الکترون-الکترون و الکترون-فونون را نشان می‌دهد. آرایش پیوندی متفاوت منجر به خواص الکترونی مختلفی برای زنجیرهای زوج و فرد می‌شود. بنابراین مغناطش محاسبه شده برای زنجیرهای فرد مقدار قابل توجه‌تری نسبت به زنجیرهای زوج دارد. با وجود ضعیف بودن مغناطش‌ها، دو جریان با اسپین بالا و پایین تا حدودی از هم جدا می‌شوند. افزایش اثرات فونونی باعث کاهش مغناطش‌ها می‌گردد. یک زنجیر بنزنی نیز در صورتی که با استفاده از یک زنجیر ساده‌ی فرد به یکی از الکترودهای گرافینی متصل شود، حالت جفت نشده‌ای خواهد داشت که مغناطش خالص ایجاد می‌نماید. در حالی که برای زنجیرهای ساده‌ی زوج در این حالت، نتایج متفاوتی خواهیم داشت. این نتایج می‌تواند برای بهینه کردن ساختارهای مغناطیسی و بهبود کارایی و افزایش بازده نانوترانزیستورها مورد توجه قرار گیرد.

واژه‌های کلیدی

ترابرد اسپینی، برهم کنش الکترون-فونون، زنجیرهای کربنی، تنگ بست، برهم کنش الکترون-الکترون.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	فصل اول اسپیترونیک و گرافن.....
۲	۱-۱ مقدمه.....
۲	۲-۱ شرحی بر اسپیترونیک.....
۳	۳-۱ مقاومت مغناطیسی مبنای اسپیترونیک.....
۶	۴-۱ ساختارهای کربنی.....
۷	۱-۴-۱ گرافن.....
۹	۲-۴-۱ نانولوله های کربنی.....
۱۰	۳-۴-۱ مولکول فولرن (C ₆₀).....
۱۰	۴-۴-۱ زنجیر کربنی.....
۱۱	۱-۴-۴-۱ ساخت زنجیر کربنی.....
۱۴	۲-۴-۴-۱ آرایش پیوندی در زنجیر کربنی.....
۱۵	۳-۴-۴-۱ خواص تراپردی و الکترونی زنجیر کربنی.....
۲۰	فصل دوم محاسبات.....
۲۱	۱-۲ مقدمه.....
۲۱	۲-۲ مدل تنگ بست.....
۲۲	۱-۲-۲ نمایش عملگری برای مدل تنگ بست.....
۲۳	۲-۲-۲ حل هامیلتونی تنگ بست به روش قطری سازی ماتریسی.....
۲۳	۳-۲ بررسی مدل هابارد به منظور مطالعه ی ساختار الکترونی.....
۲۶	۱-۳-۲ نظریه ی میدان مؤثر هابارد.....
۲۷	۴-۲ محاسبه ی تراپرد اسپینی همدوس با استفاده از مدل لاندائور-بوتیکر.....
۲۷	۱-۴-۲ معرفی تابع گرین.....

۲-۴-۱-۱ محاسبه ی تابع گرین با استفاده از معادله ی دایسون.....	۳۰
۲-۴-۱-۲ محاسبه ی تابع گرین سطحی و حجمی یک ساختار جامد با استفاده از روش حل خودسازگار.....	۳۱
۲-۴-۱-۳ تابع گرین مربوط به کانال در حضور اتصالات.....	۳۶
۲-۴-۲ محاسبه ی جملات خود-انرژی در اعمال اثر اتصالات.....	۳۷
۲-۴-۳ محاسبه ی چگالی حالت های الکترونی، ضریب عبور و ترابرد اسپینی با استفاده از تابع گرین.....	۳۹
۳ فصل سوم معرفی فونون ها و مدل های فونونی.....	۴۱
۳-۱ مقدمه.....	۴۲
۳-۲ معرفی فونون.....	۴۲
۳-۳ انواع فونون ها بر اساس انرژی.....	۴۳
۳-۴ معرفی مدل های مناسب به منظور بررسی اثرات فونونی.....	۴۵
۳-۴-۱ مدل سو-شریفر-هیگر (SSH).....	۴۵
۳-۴-۲ مدل هولشتین.....	۴۷
۳-۴-۳ مدل هولشتین-هابارد.....	۴۹
۳-۴-۳-۱ ساده سازی مدل هولشتین-هابارد.....	۵۰
۳-۵ فلوچارت انجام محاسبات به کمک کدنویسی متلب.....	۵۲
۴ فصل چهارم بحث و نتایج.....	۵۴
۴-۱ مقدمه.....	۵۵
۴-۲ بررسی نتایج مربوط به مدل SSH.....	۵۵
۴-۲-۱ تأثیر فونون ها بر ترابرد عبوری از زنجیر کربنی ساده با استفاده از مدل SSH.....	۵۵
۴-۲-۱-۱ بررسی اثر ثابت جفت شدگی بر میزان تأثیر اثرات فونونی در یک زنجیر ساده.....	۶۱
۴-۲-۱-۲ بررسی اثر ثابت کششی K بر میزان تأثیر اثرات فونونی در یک زنجیر ساده.....	۶۴

SSH مدل ۲-۲-۴ در نانوترانزیستور متشکل از زنجیر دارای حلقه ی بنزنی در ناحیه ی	
کانال.....	۶۴
۳-۲-۴ بررسی تأثیر ثابت جفت شدگی بر میزان اثرات فونونی در یک زنجیر کربنی بنزن	
دار.....	۶۸
۴-۲-۴ بررسی اثر ثابت کشسانی بر میزان تأثیرات فونونی در یک زنجیر بنزن دار کربنی.....	۷۰
۳-۴ بررسی خواص تراپردی و الکترونی زنجیر کربنی یک بعدی در حضور فونون ها با استفاده	
از مدل HH.....	۷۲
۱-۳-۴ بررسی نتایج مربوط به زنجیر کربنی با تعداد اتم فرد.....	۷۲
۱-۱-۳-۴ بررسی مدل HH در زنجیر ساده با تعداد اتم فرد.....	۷۲
۲-۱-۳-۴ بررسی مدل HH در زنجیر ساده با تعداد اتم زوج.....	۷۶
۲-۳-۴ بررسی مدل HH برای زنجیر کربنی بنزن دار.....	۷۷
۱-۲-۳-۴ زنجیر کربنی بنزن دار با دو زنجیر زوج و فرد به ترتیب در سمت راست و سمت	
چپ حلقه ی بنزنی.....	۷۷
۴-۴ نتیجه گیری.....	۸۱
۵-۴ پیشنهادات.....	۸۴
۶-۴ مراجع.....	۸۵

فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۱ : ساختار نواری یک فلز فرومغناطیس با مغناطشی در جهت بالا. تفاوت چگالی حالت‌های مجاز برای اسپین بالا و اسپین پایین.....	۴
شکل ۱-۲: نحوه‌ی عملکرد یک شیر اسپینی با استفاده از اثر GMR.....	۵
شکل ۱-۳: ساختارهای کربنی با ابعاد مختلف.....	۷
شکل ۱-۴ : تشکیل گاف انرژی با برش صفحه‌ی گرافنی به صورت نانونوار.....	۸
شکل ۱-۵ : مولکول کربنی فولرن.....	۱۰
شکل ۱-۶ : ساخت تجربی زنجیر کربنی با استفاده از نانونوارهای گرافنی.....	۱۲
شکل ۱-۷ : ساخت تجربی زنجیر کربنی با حلقه‌ی بنزنی و زنجیر دوتایی.....	۱۳
شکل ۱-۸ : تشکیل زنجیر کربنی با اعمال کشش به نانونوار گرافنی.....	۱۳
شکل ۱-۹ : ساختار زنجیر کربنی با تعداد اتم زوج.....	۱۴
شکل ۱-۱۰ : ساختار زنجیر کربنی با تعداد اتم فرد.....	۱۵
شکل ۱-۱۱ : رفتار نوسانی رسانندگی برای زنجیر زوج و فرد.....	۱۶
شکل ۱-۱۲ : زنجیر کربنی خالص و آلاینده به نیتروژن با مغناطش متفاوت.....	۱۹
شکل ۱-۱۳ : ساختار مربوط به دمبل کربنی متشکل از دو مولکول فولرن و یک زنجیر کربنی.....	۱۹
شکل ۱-۲ : در این تصویر دایره، مثلث و مربع ها لایه‌های اصلی را نشان می‌دهند. هر دسته از این لایه‌ها در یک مستطیل قرار گرفته‌اند که یک سلول واحد را تشکیل می‌دهند. L و l به ترتیب اندیس سلول واحد و لایه‌ی اصلی را نشان می‌دهند.....	۳۲
شکل ۲-۲ : مربع‌ها و دایره‌ها لایه‌های اصلی را نشان می‌دهند و l اندیس مربوط به لایه‌ی اصلی است. در این شکل هامیلتونی‌های مربوط به اتصال صفحات نشان داده شده‌اند. توجه شود که اتصالات بین جفت صفحات یکسان، از یک نوع هستند.....	۳۳

- شکل ۳-۲: اتصال دو الکتروود نیمه بینهایت به یک کانال..... ۳۷
- شکل ۳-۱: منحنی پاشندگی برای یک بلور دو اتمی..... ۴۴
- شکل ۳-۲: فلوجارت مربوط به روند محاسبات با استفاده از روش کد نویسی متلب..... ۵۳
- شکل ۴-۱: ساختار نانوترانزیستور پایه کربنی متشکل از دو الکتروودِ گرافنی و یک زنجیر کربنی ساده در ناحیه کانال..... ۵۶
- شکل ۴-۲: منحنی چگالی حالت‌ها (a) و ضرایب عبور (b) برای یک زنجیر کربنی ساده با یازده اتم کربن متصل به دو نانونوار گرافنی لبه زیگزاگ..... ۵۸
- شکل ۴-۳: منحنی ولتاژ - جریان برای یک زنجیر یازده اتمی ساده که به دو نانونوار گرافنی نیمه بینهایت زیگزاگ متصل شده است..... ۵۸
- شکل ۴-۴: منحنی چگالی حالت‌ها (a) و ضرایب عبور (b) برای یک زنجیر کربنی ساده‌ی هفده اتمی در ناحیه‌ی کانال یک نانوترانزیستور پایه کربنی..... ۵۹
- شکل ۴-۵: منحنی ولتاژ- جریان برای زنجیر کربنی ساده‌ی هفده اتمی متصل به دو نانونوار گرافنی نیمه بینهایت زیگزاگ..... ۵۹
- شکل ۴-۶: چگالی حالت‌ها (a) و ضرایب عبور (b) برای زنجیر کربنی ساده با چهارده اتم کربن متصل به دو نانونوار زیگزاگ نیمه بینهایت..... ۶۰
- شکل ۴-۷: منحنی ولتاژ- جریان در حضور و غیاب فونون‌ها برای زنجیر زوج چهارده اتمی ساده متصل به دو نانونوار زیگزاگ نیمه بینهایت..... ۶۱
- شکل ۴-۸: منحنی چگالی حالت‌ها (a) و ضرایب عبور (b) برای یک زنجیر هجده اتمی ساده متصل به دو نانونوار گرافنی نیمه بینهایت..... ۶۲
- شکل ۴-۹: منحنی ولتاژ - جریان مربوط به نانوترانزیستور متشکل از زنجیر هجده اتمی ساده و دو نانونوار گرافنی نیمه بینهایت..... ۶۲

- شکل ۴-۱۰: منحنی چگالی حالت‌ها (a) و ضرایب عبور (b) برای یک زنجیر هجده اتمی ساده متصل به دو نانونوار گرافنی نیمه بینهایت به ازای $K=49/7$ و سه مقدار $g=6/31$, $g=5/3$ و $g=4/1$ ۶۳
- شکل ۴-۱۱: بررسی منحنی ولتاژ - جریان برای یک زنجیر هجده اتمی ساده متصل به دو نانونوار گرافنی نیمه بینهایت به ازای $K=49/7$ و سه مقدار $g=6/31$, $g=5/3$ و $g=4/1$ ۶۳
- شکل ۴-۱۲: بررسی تأثیر ثابت کششی بر جریان عبوری از یک زنجیر ساده‌ی هجده اتمی به ازای $g=6/31$ و سه مقدار $K=49/7$, $K=47/4$ و $K=21/7$ ۶۴
- شکل ۴-۱۳: بررسی تأثیر ثابت کششی بر چگالی حالت‌ها (a) و ضرایب عبور (b) در یک زنجیر ساده‌ی هجده اتمی به ازای $g=6/31$ و سه مقدار $K=49/7$, $K=47/4$ و $K=21/7$ ۶۵
- شکل ۴-۱۴: طرح یک نانوترانزیستور پایه کربنی متشکل از یک کانال بنزن‌دار با تعداد کل هجده اتم کربن که به دو نانونوار گرافنی زیگزاگ نیمه بینهایت متصل شده است ۶۵
- شکل ۴-۱۵: منحنی چگالی حالت‌ها (a) و ضرایب عبور (b) برای یک زنجیر بنزن‌دار هجده اتمی شامل دو زنجیر زوج ۶ اتمی در سمت چپ و راست حلقه‌ی بنزنی و متصل به دو نانونوار زیگزاگ نیمه بینهایت. تعداد کل اتم‌ها در ناحیه‌ی کانال هجده اتم می‌باشد ۶۶
- شکل ۴-۱۶: منحنی جریان بر حسب ولتاژ چاه برای یک زنجیر هجده اتمی متصل به دو نانونوار زیگزاگ نیمه بینهایت با دو زنجیر اتمی زوج ۶ اتمی در دو طرف حلقه‌ی بنزنی ۶۷
- شکل ۴-۱۷: مقایسه منحنی چگالی حالت‌ها (a) و ضرایب عبور (b) برای یک زنجیر بنزن‌دار متصل به دو نانونوار زیگزاگ نیمه بینهایت شامل دو زنجیر فرد ۵ و ۷ اتمی به ترتیب در راست و چپ حلقه‌ی بنزن ۶۸
- شکل ۴-۱۸: منحنی جریان برای یک کانال بنزن‌دار هجده اتمی متصل به دو نانونوار زیگزاگ نیمه بینهایت شامل دو زنجیر فرد ۵ و ۷ اتمی به ترتیب در راست و چپ حلقه‌ی بنزن ۶۹
- شکل ۴-۱۹: بررسی اثر ثابت جفت شدگی بر میزان تأثیر فونون‌ها برای یک کانال بنزن دار بیست و دو اتمی با دو زنجیر ۷ و ۹ اتمی به ترتیب در سمت چپ و راست حلقه‌ی بنزن ۶۹

شکل ۴-۲۰: منحنی جریان برای سه مقدار $g=6/31$ ، $g=5/3$ و $g=4/1$ به ازای $K=49/7$ برای یک زنجیر بیست و دو اتمی با دو زنجیر ساده‌ی ۷ و ۹ اتمی به ترتیب در سمت چپ و راست. ۷۰.....

شکل ۴-۲۱: مقایسه چگالی حالت‌ها و ضرایب عبور به ازای سه مقدار K برای یک زنجیر زوج هجده اتمی با دوزنجیر ۵ و ۷ اتمی در دو طرف حلقه‌ی بنزن. ۷۰.....

شکل ۴-۲۲: مقایسه منحنی جریان برای مقادیر مختلف K به ازای $g=6/31$ در یک زنجیر ۱۸ اتمی بنزن‌دار با دو زنجیر ساده ۵ و ۷ اتمی در دو طرف حلقه‌ی بنزن. ۷۱.....

شکل ۴-۲۳: نمودار مربوط به چگالی حالت‌ها (a)، مغناطش‌های اتمی (b)، ضرایب عبور (c) و جریان‌های اسپینی (d) برای دو نوع اسپین بالا و پایین در یک زنجیر کربنی ساده‌ی هفده اتمی در غیاب اثرات فونونی ($U_{eff} = 3$). ۷۳.....

شکل ۴-۲۴: نمودار مربوط به چگالی حالت‌ها (a)، مغناطش‌های اتمی (b)، ضرایب عبور (c) و جریان‌های اسپینی (d) برای دو نوع اسپین بالا و پایین در یک زنجیر کربنی ساده‌ی هفده اتمی در غیاب اثرات فونونی ($U_{eff} = 2/5$). ۷۴.....

شکل ۴-۲۵: نمودار مربوط به چگالی حالت‌ها (a)، مغناطش‌های اتمی (b)، ضرایب عبور (c) و جریان‌های اسپینی (d) برای دو نوع اسپین بالا و پایین در یک زنجیر کربنی ساده‌ی هفده اتمی به ازای $U_{eff} = 2$. ۷۵.....

شکل ۴-۲۶: نمودار مربوط به چگالی حالت‌ها (a)، مغناطش‌های اتمی (b)، ضرایب عبور (c) و جریان‌های اسپینی (d) برای دو نوع اسپین بالا و پایین در یک زنجیر کربنی ساده‌ی هفده اتمی به ازای $U_{eff} = 0$. ۷۶.....

شکل ۴-۲۷: نمودار مربوط به چگالی حالت‌ها (a)، مغناطش‌های اتمی (b)، ضرایب عبور (c) و جریان‌های اسپینی (d) برای دو نوع اسپین بالا و پایین در یک زنجیر کربنی ساده‌ی هجده اتمی به ازای $U_{eff} = 3$. ۷۷.....

شکل ۴-۲۸: نمودار مربوط به چگالی حالت‌ها (a)، مغناطش‌های اتمی (b)، ضرایب عبور (c) و جریان‌های اسپینی (d) برای دو نوع اسپین بالا و پایین در یک زنجیر کربنی ساده‌ی هجده اتمی به ازای $U_{eff} = 0$ ۷۸

شکل ۴-۲۹: نمودار مربوط به چگالی حالت‌ها (a)، مغناطش‌های اتمی (b)، ضرایب عبور (c) و جریان‌های اسپینی (d) برای دو نوع اسپین بالا و پایین در یک زنجیر کربنی بنزن‌دار هفده اتمی متشکل از دو زنجیر ساده ۵ و ۶ اتمی به ترتیب در سمت چپ و راست حلقه‌ی بنزنی به ازای $U_{eff} = 3$ ۷۹

شکل ۴-۳۰: نمودار مربوط به چگالی حالت‌ها (a)، مغناطش‌های اتمی (b)، ضرایب عبور (c) و منحنی ولتاژ-جریان (d) مربوط به جریان‌های اسپینی برای دو نوع اسپین بالا و پایین در یک زنجیر کربنی بنزن‌دار هفده اتمی متشکل از دو زنجیر ساده‌ی ۵ و ۶ اتمی به ترتیب در سمت چپ و راست حلقه‌ی بنزنی به ازای $U_{eff} = 2$ ۸۰

شکل ۴-۳۱: نمودار مربوط به چگالی حالت‌ها (a)، مغناطش‌های اتمی (b)، ضرایب عبور (c) و منحنی ولتاژ-جریان (d) مربوط به جریان‌های اسپینی برای دو نوع اسپین بالا و پایین در یک زنجیر کربنی بنزن‌دار هفده اتمی متشکل از دو زنجیر ساده‌ی ۵ و ۶ اتمی به ترتیب در سمت چپ و راست حلقه‌ی بنزنی به ازای $U_{eff} = 0$ ۸۱

شکل ۴-۳۲: (a) چگالی حالت‌ها، (b) مغناطش‌های موضعی، (c) ضرایب عبور. تأثیر پتانسیل هابارد بر جریان‌های اسپینی (d) یک زنجیر کربنی بنزن‌دار هفده اتمی با زنجیر ساده‌ی ۷ اتمی در چپ و زنجیر ۴ اتمی در راست در غیاب بر هم کنش الکترون-فونون و به ازای $U_{eff} = 3$ ۸۲

شکل ۴-۳۳: (a) چگالی حالت‌ها، (b) مغناطش‌های موضعی، (c) ضرایب عبور. تأثیر پتانسیل هابارد بر جریان‌های اسپینی (d) یک زنجیر کربنی بنزن‌دار هفده اتمی با زنجیر ساده‌ی ۷ اتمی در راست و زنجیر ۴ اتمی در چپ در غیاب بر هم کنش الکترون-فونون و به ازای $U_{eff} = 3$ ۸۳

فصل اول

اسپینترونیک و گرافن

۱-۱ مقدمه

در این فصل قصد داریم در ابتدا به معرفی اسپینترونیک پرداخته و سپس به انواع ساختارهای کربنی که در سال‌های اخیر مورد توجه قرار گرفته‌اند اشاره نمائیم. در میان این ساختارها، گرافن از جمله ساختارهای کربنی است که به دلیل خواص منحصر به فرد، توجه بسیاری را در این شاخه به خود جلب کرده است. لذا تحقیقات بسیاری در این زمینه انجام شده که به ذکر برخی نتایج آن‌ها خواهیم پرداخت.

زنجیرهای کربنی ساختارهای مورد بحث در این پایان نامه می‌باشند. به همین دلیل در بخشی از این فصل به معرفی این ساختارها می‌پردازیم. همچنین به برخی تحقیقات انجام شده در زمینه‌ی روش‌های ساخت، پیکربندی ساختاری و نیز خواص الکترونی و تراپردی این زنجیرها اشاره خواهیم کرد.

۲-۱ شرحی بر اسپینترونیک

اسپینترونیک پدیده‌ی نوظهوری است که از درجه‌ی آزادی ذاتی اسپین الکترون بهره‌برداری می‌کند [۱]. اساس ساخت قطعات اسپینترونیک^۱، فلزات فرومغناطیس هستند [۲-۴]. در فلزات معمولی، به‌طور طبیعی گرادیان چگالی حامل بار وجود ندارد و به همین دلیل الکترون‌ها هیچ سهمی در خواص مغناطیسی کل نخواهند داشت. ولی این داستان برای فلزات فرومغناطیس کاملاً متفاوت است. در فلزات فرومغناطیس که در قلب قطعات اسپینترونیکی جای دارند، تعداد الکترون‌های رسانشی با اسپین پایین با تعداد الکترون‌های با اسپین بالا متفاوت بوده و همین تفاوت باعث به وجود آمدن مغناطش می‌شود. به عبارتی سمت‌گیری اسپین‌ها در یک راستای خاص، به گونه‌ای است که در حضور یک میدان مغناطیسی، الکترون‌های با اسپین بالا و پایین انرژی‌های متفاوتی دارند؛ یعنی در نوار انرژی، شکافتگی وجود دارد [۵].

^۱ . Spintronics

جهت اسپین الکترون‌های متحرک در فرومغناطیس‌ها، برای زمان نسبتاً طولانی (در حد چند نانو ثانیه) ثابت می‌ماند. این ویژگی باعث می‌شود ابزار اسپینترونیکی برای ذخیره‌ی اطلاعات، قطعات حسگر مغناطیسی و مخصوصاً برای محاسبات کوانتومی که در آن اسپین نشان دهنده‌ی یک بیت اطلاعات می‌باشد، مناسب شوند. مگنتو الکترونیک، الکترونیک اسپینی و اسپینترونیکی نام‌های متفاوت از یک مفهوم هستند؛ یعنی الکترونیک بر اساس خواص مغناطیسی اسپینی [۶]. هدف از این نوع الکترونیک، کاهش اندازه‌ی قطعات، افزایش سرعت پردازش و کاهش توان مصرفی است [۷].

۳-۱ مقاومت مغناطیسی^۱ مبنای اسپینترونیکی

تغییرات مقاومت الکتریکی تحت اثر میدان مغناطیسی، مقاومت مغناطیسی نامیده می‌شود. در سال ۱۹۶۴ مشاهده شد که مقاومت الکتریکی یک ماده‌ی فرومغناطیسی، به زاویه‌ی نسبی بین مغناطش و راستای جریان بستگی دارد. تعبیر فیزیکی این اثر که مقاومت مغناطیسی ناهمسانگرد (AMR)^۲ نامیده می‌شود مربوط به پراکندگی از نوارهای s و d در ساختار فرومغناطیس می‌باشد. با کشف این خاصیت، زمینه برای ساخت حسگرهای مغناطیسی به منظور خواندن اطلاعات ذخیره شده روی دیسک‌های سخت، فراهم گردید [۶]. پس از آن، کشف اثر GMR^۳ در چندلایه‌های مغناطیسی، توسط آلبرت فرت^۴ و پیتر گرونبرگ^۵ که به طور همزمان جایزه‌ی نوبل ۲۰۰۷ را از آن خود کردند [۸]، باعث بهبود کارایی حسگرهای مغناطیسی و در نتیجه افزایش چشمگیری در مقدار اطلاعاتی شد که می‌تواند روی یک دیسک سخت در رایانه‌ها ذخیره شود [۹]. مهمترین فلزات برای ساخت چند لایه‌ای‌های مناسب مربوط به GMR، عناصر فرو-مغناطیسی یعنی کبالت، نیکل و آهن هستند [۱۰].

مبنای ابتدایی GMR، پراکندگی وابسته به اسپین الکترون‌های رسانشی است که سطح مقطع‌های پراکندگی متفاوتی در یک فلز فرومغناطیس، با مغناطش مشخص، دارا هستند. این تفاوت در سطح مقطع پراکندگی، ناشی از تفاوت در چگالی حالت‌های مجاز است که باعث می‌شود الکترون‌های رسانش پراکندگی‌های غیریکسانی را حس کنند. در نهایت این روند منجر به تولید جریان قطبیده خواهد شد [۱۱].

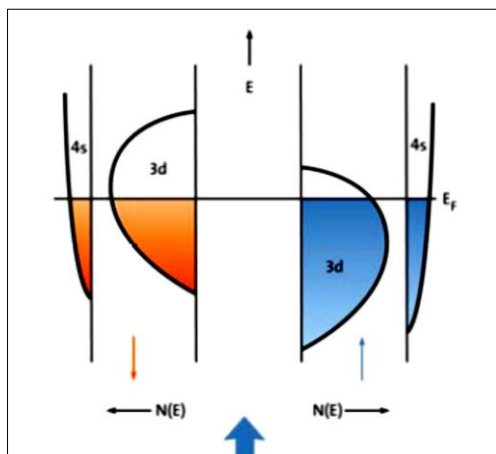
1. Magnetoresistance

2. Anisotropy Magnetoresistance

3. Giant Magnetoresistance

4. Albert Fert

5. Peter Grunberg

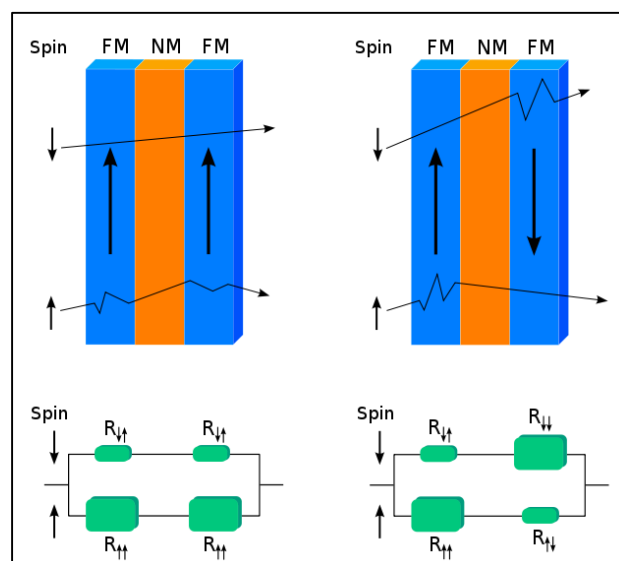


شکل ۱-۱ : ساختار نواری یک فلز فرومغناطیس با مغناطشی در جهت بالا. تفاوت چگالی حالت‌های مجاز برای اسپین بالا و اسپین پایین [۸].

وقتی جریانی از الکترون‌ها با اسپین‌های تصادفی به لایه‌ی مغناطیسی وارد می‌شود بر حسب نوع مغناطش تعداد حالات مجاز بیشتری برای یک نوع اسپین وجود دارد و در نتیجه جریان عبوری با آن نوع اسپین بزرگتر است. در نتیجه در عبور از لایه‌ی مغناطیسی اول یک جریان قطبیده می‌تواند ایجاد شود و اسپین نوع دوم جریان کوچکتری خواهد داشت که ناشی از مقاومت اتصال است. این اثر مبنای کار شیرهای اسپینی^۱ [۱۲] گردید. در شکل ۱-۲ ساختار یک شیر اسپینی در دو حالت ^۲CPP و ^۳CIP نشان داده شده است.

پس از کشف GMR، راه برای پیشرفت پدیده‌های فیزیکی جدید نظیر مقاومت مغناطیسی تونل‌زنی (TMR)^۴ [۱۳، ۱۴]، فناوری‌های اسپینی و فناوری حسگرهای جدید مانند حسگرهای زیستی باز شد. اثر دیگر، مغناطو امپدانس بزرگ^۵ است که برای ساخت حسگرهای مغناطیسی از اهمیت زیادی برخوردار می‌باشد.

1 . spin-valve
 2 . Current Perpendicular to Plane
 3 . Current In Plane
 4 . Tunnel Magnetoresistance
 5 . Giant Magneto Impedance (GMI)



شکل ۱-۲: نحوه‌ی عملکرد یک شیر اسپینی با استفاده از اثر GMR [۱۵]

استفاده از خاصیت مغناطیسی الکترون یعنی اسپین، منجر به ظهور اسپینترونیک و ایجاد قطعات اسپینترونیکی گردید. نمونه‌ی این ساختارها ترانزیستورهای مغناطیسی هستند که اولین بار توسط داتا^۱ و داس^۲ مدل‌سازی شد [۱۶]. این نوع ترانزیستورها دارای سه پایانه‌ی چشمه^۳، چاه^۴ و دریچه^۵ می‌باشند. بین چشمه و چاه ولتاژی اعمال می‌گردد که جریان الکتریکی را در ساختار به وجود می‌آورد و ولتاژ چاه^۶ نامیده می‌شود. در اصل اختلاف پتانسیل الکتروشیمیایی به وجود آمده ناشی از تفاوت در تابع توزیع الکترون‌ها در دو الکتروود، عامل شارش جریان است. معمولاً الکتروودهای به کار رفته در ساختارهای اسپینی، فلزات مغناطیسی هستند که از طریق یک کانال غیرمغناطیسی به یکدیگر مربوط می‌شوند. از طرفی کانال حامل جریان باید ویژگی‌هایی نظیر رسانندگی بالا و پراکندگی کم داشته باشد تا بتواند جریان را به خوبی هدایت کند. شدت جریان قطبیده بین دو الکتروود به تعداد حالت‌های مجازی بستگی دارد که در ساختار نواری کانال موجود است. ولتاژ دریچه به صورت عمود بر کانال وارد می‌شود. حالت‌های مجاز کانال با توجه به مثبت یا منفی بودن این میدان می‌توانند جابه‌جا شوند. بنابراین می‌توان حالت‌های مجاز در دسترس را برای افزایش یا کاهش جریان به ترتیب زیاد یا کم نمود [۸،۱۷].

^۱. Datta

^۲. Das

^۳. Source

^۴. Drain

^۵. Gate

^۶. Drain Voltage

به طور کلی امروزه محدودیت‌های مربوط به اندازه در مقیاس نانو، اثرات مغناطی و مقاومت قابل توجهی را ایجاد کرده است. در واقع اگر ابعاد قطعه به نسبت بزرگ باشد، مقاومتی که حاملان در اثر پراکندگی از ناخالصی‌ها و نقص‌های ساختاری حس می‌کنند در مقایسه با مقاومت موجود در اتصالات قابل توجه است. در صورتی که اگر ابعاد خیلی کوچک باشد (از مرتبه نانو)، آنگاه مقاومت موجود در اتصالات نیز قابل توجه خواهد بود؛ زیرا با ورود حاملان بار و شارش آنها مقابله کرده و در نهایت سرعت انتقال داده را کاهش می‌دهد. با این حال اساس کار قطعات اسپیترونیک استفاده از مقاومت موجود در اتصالات و سطح مشترک^۱ به منظور جدا کردن جریان‌های اسپینی از یکدیگر و ایجاد جریان‌های قطبیده با زمان‌های همدوسی بالاست؛ به همین دلیل ابعاد این قطعات در مقیاس نانو انتخاب می‌شود.

از جمله موادی که برای ساخت کانال مناسب هستند ساختارهای کربنی می‌باشند [۱۸] که در بین آنها نانولوله‌های کربنی^۲ و نانونوارهای گرافنی^۳، مورد تحقیق و بررسی بسیاری قرار گرفته‌اند [۱۹-۲۲]. مولکول فولرن^۴ (C₆₀) ساختار مفید دیگری است که به شکل کره‌ای شامل شصت اتم کربن قابل استفاده می‌باشد.

۴-۱ ساختارهای کربنی

امروزه در زمینه‌ی نانوالکترونیک، ساختارهای کربنی از نظر کاربردهای نانوالکترونیک و اسپیترونیک، مورد توجه بسیاری قرار گرفته‌اند. تحرک بالای حامل‌ها، جفت‌شدگی اسپین-مدار ضعیف، برهم کنش فوق ریز ضعیف و در نتیجه طول و زمان واهلش اسپینی طولانی، باعث افزایش اهمیت آنها شده است [۲۳-۲۵]. چندین ماده‌ی کربنی برای کاربردهای اسپیترونیک پیشنهاد شده‌اند که این ساختارهای کربنی در صفر، یک، دو و سه بعد ساخته می‌شوند. مولکول فولرن (C₆₀ بدون بعد)، نانولوله‌ها و زنجیر کربنی (یک‌بعدی)، گرافن (دو‌بعدی) و گرافیت و الماس (سه‌بعدی) از جمله ساختارهای کربنی هستند که تاکنون در زمینه‌های مختلفی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. همپوشانی^۵ اوربیتال‌های مولکولی در این ساختارها متفاوت بوده و از این نظر دارای خواص رسانندگی مختلف می‌باشند. در ادامه به معرفی هر کدام از این ساختارها خواهیم پرداخت.

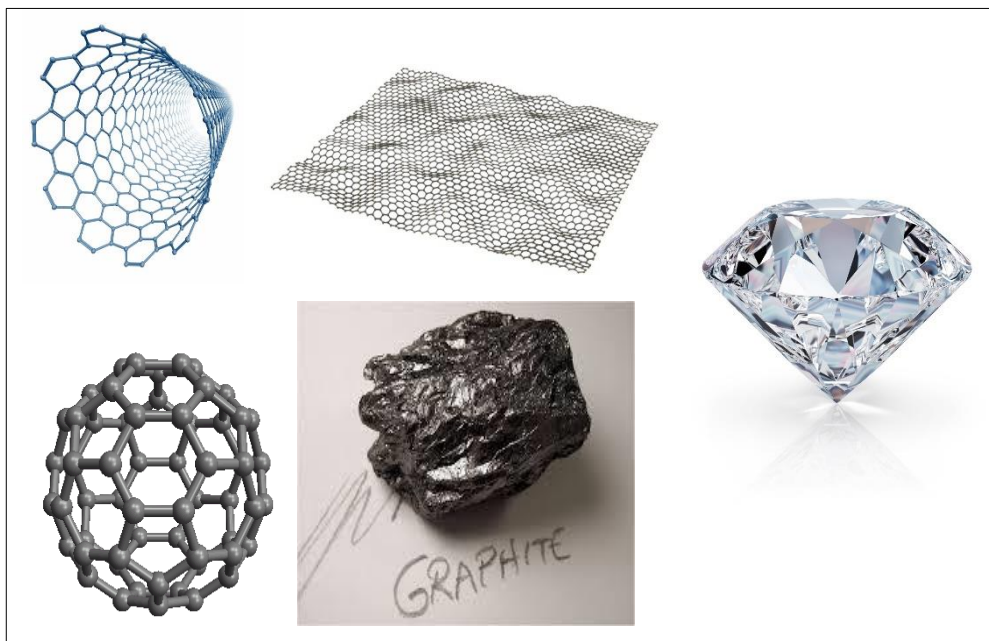
1 . Interface

2 . Carbon Nanotubes

3 . Graphene Nanoribbon

4 . Fullerenes

5 . Hibridization



شکل ۱-۳: ساختارهای کربنی با ابعاد مختلف [۱۵].

۱-۴-۱ گرافن

از سال ۲۰۰۴ با کشف گرافن [۲۶]، تحقیقات روی این ساختار دو بعدی افزایش یافته و خواص نیم‌فلزی برای آن پیش‌بینی شد. از آن‌جا که اتم کربن دارای چهار الکترون ظرفیت است می‌تواند با چهار اتم دیگر پیوند کووالانسی برقرار نماید. در ساختار گرافن با شبکه‌ی لانه زنبوری، هر اتم کربن با سه اتم کربن دیگر پیوند کووالانسی داده و یکی از حالت‌ها به صورت پیوند π باقی می‌ماند. عموماً حالت‌های σ در میانه‌ی پیوندهای کربن-کربن جایگزیده شده‌اند؛ در حالی که حالت‌های π حول تک اتم‌های کربن قرار گرفته و جایگزیده نیستند. این پیوندها به عنوان یک سیستم الکترون آزاد یک بعدی رفتار می‌کنند و در فرآیند رسانش شرکت می‌نمایند [۲۷]. به این ترتیب با وجود پیوندهای π ، خواص نیم‌فلزی گرافن قابل توجه می‌باشد.

بر اساس نتایج تحقیقات در زمینه‌ی اسپینترونیک کربنی، مشخص شد که ساختارهای کربنی می‌توانند جایگزین عناصر مغناطیسی در ساختارهای اسپینترونیکی گردند. در واقع از ساختارهای کربنی علاوه بر ناحیه‌ی کانال می‌توان به عنوان الکترودهای فلزی نیز استفاده نمود. به این ترتیب یک ساختار کاملاً کربنی می‌تواند خواص منحصر به فردی از خود نشان دهد [۲۸].