بنام خداوند بخشنده‌ی مهربان

۱۲۶۰۳۵

دانشگاه مازندران

دانشکده علوم پایه

پایان نامه دوره کارشناسی ارشد در رشته فیزیک گرایش حالت جامد

موضوع:

بررسی تئوری و عددی خواص الکتریکی نانولوله‌های کربنی به عنوان یک کانال در ترانزیستورهای اثر میدانی

استاد راهنما:

دکتر علی بهاری

استاد مشاور:

دکتر حسین میلانی مقدم

اساتید داور:

دکتر علی اصغر حسینی و دکتر سید نوردین میرنیا

نام دانشجو:

مسعود امیری

۱۳۸۸/۴/۱۶

مرکز اطلاعات و مدارک علمی مازندران
تهیه مدارک

ب

۱۲۶۰۳۵

دی ماه ۱۳۸۷

سپاسگزاری

خداوند را شاکرم که توفیق کسب علم و معرفت را چندی در محضر اساتید مجرب و مهربان به من داد. از استاد عزیزم دکتر علی بهاری نهایت تشکر وسپاسگذاری را دارم که در طول مدت تحصیل چراغ راهنمایی بر مسیر من بود. در آخر از تمامی اساتیدی که در طول مدت تحصیل از محضر درس ایشان معرفتی کسب کردم نهایت سپاسگذاری و تشکر را دارم.

تقدیم به:

پدر و مادر مهربانم

چکیده:

پس از کشف نانولوله‌های کربنی توسط ایجیما و همکارانش بررسی‌های بسیار زیادی بر روی این ساختارها در سایر علوم انجام شده است. این ساختارها به دلیل خواص منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی که از خود نشان داده‌اند جایگزین مناسبی برای سیلیکون و ترکیبات آن در قطعات الکترونیکی خواهند شد. در اینجا به بررسی خواص الکتریکی نانولوله‌های کربنی زیگزاگ که به عنوان یک مجرا بین چشمه و درو قرار داده شده پرداختیم و نحوه‌ی توزیع جریان در ترانزیستورهای اثر میدانی را در شرایط دمایی و میدان‌های مختلف بررسی کرده ایم. از آنجایی که سرعت خاموش و روشن شدن ترانزیستور برای ما در قطعات الکترونیکی و پردازنده‌های کامپوتری از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است، انتخاب نانولوله‌ای که تحرک پذیری بالایی داشته باشد بسیار مهم است. نتایج بررسی‌ها نشان می‌دهد تحرک پذیری الکترون در نانولوله‌های کربنی متفاوت به ازای میدان‌های مختلفی که در طول نانولوله‌ها اعمال شود، مقدار بیشینه‌ای را خواهد گرفت. بنا بر این در طراحی ترانزیستورها با توجه به مشخصه‌های هندسی ترانزیستور و اختلاف پتانسیلی که بین چشمه و درو آن اعمال می‌شود باید نانولوله‌ای را انتخاب کرد که تحرک پذیری مناسبی داشته باشد.

واژه های کلیدی

نانولوله‌ی کربنی، ترانزیستور اثر میدانی، مدل ثابت نیرو ، تحرک‌پذیری الکترون

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

مقدمه ۱

فصل اول: مقدمه‌ای بر کربن و اشکال مختلف آن در طبیعت و کاربرهای آن ۳

۱-۱. مقدمه ۳

۱-۲ گونه‌های مختلف کربن در طبیعت ٤

۱-۲-۱ کربن بی‌شکل ٤

۱-۲-۲ الماس ٤

۱-۲-۳ گرافیت ٥

۱-۲-٤ فلورن و نانولوله‌های کربنی ٥

۱-۳ ترانزیستورهای اثر میدانی فلز- اکسید - نیمرسانا و ترانزیستور های اثرمیدانی نانولوله‌ی کربنی ۸

فصل ۲: بررسی ساختار هندسی و الکتریکی گرافیت و نانولوله‌های کربنی ۱۱

۲-۱ مقدمه ۱۱

۲-۲ ساختار الکترونی کربن ۱۲

۲-۲-۱ اربیتال ۲P کربن ۱۲

۲-۲-۲ روش وردشی ۱۳

۲-۲-۳ هیبریداسون اربیتال های کربن ۱۵

۲-۳ ساختار هندسی گرافیت و نانولوله‌ی کربنی ۱۹

۲-۳-۱ ساختار هندسی گرافیت ۱۹

۲-۳-۲ ساختار هندسی نانولوله‌های کربنی ۲۲

۲-٤ یاخته‌ی واحد گرافیت و نانولوله‌ی کربنی ۲٦
۲-٤-۱ یاخته واحد صفحه‌ی گرافیت ۲٦
۲-٤-۲ یاخته واحد نانولوله‌ی کربنی ۲۷
۲-٥ محاسبه ساختار نواری گرافیت و نانولوله‌ی کربنی ۲۹
۲-٥-۱ مولکول‌های محدود ۲۹
۲-٥-۲ ترازهای انرژی گرافیت ۳۱
۲-٥-۳ ترازهای انرژی نانولوله‌ی کربنی ۳۳
۲-٥-٤ چگالی حالات در نانولوله‌ی کربنی ۳۷
۲-٦ نمودار پاشندگی فونون‌ها در صفحه‌ی گرافیتی و نانولوله‌های کربنی ۳۸
۲-٦-۱ مدل ثابت نیرو و رابطه پاشندگی فونونی برای صفحه گرافیت ۳۹
۲-٦-۲ رابطه پاشندگی فونونی برای نانولوله‌های کربنی ٤٦
فصل ۳: پراکندگی الکترون فونون ٤۸
۳-۱ مقدمه ٤۸
۳-۲ تابع توزیع الکترون ٤۹
۳-۳ محاسبه نرخ پراکندگی کل ٥۳
۳-٤ شبیه سازی پراکندگی الکترون – فونون ٥۷
۳-٥ محاسبه جریان و مقاومت نانولوله‌ی کربنی ٥۹
۳-٦ ضرورت تعریف روال واگرد ٥۹
فصل ٤: بحث و نتیجه گیری ٦۳
٤-۱ مقدمه ٦۳
٤-۲ نرخ پراکندگی ٦۳
٤-۳ تابع توزیع در شرایط مختلف فیزیکی ٦٥

٤-٤ بررسی سرعت میانگین الکترون‌ها، جریان، مقاومت و تحرک‌پذیری الکترون ٦٧
٤-٤-١ بررسی توزیع سرعت در نانولوله‌های زیگزاگ نیمرسانا ٦٧
٤-٤-٢ بررسی جریان الکتریکی در نانولوله‌های زیگزاگ نیمرسانا ٦٩
٤-٤-٣ بررسی مقاومت نانولوله‌های زیگزاگ نیمرسانا ٧٠
٤-٤-٤ بررسی تحرک‌پذیری الکترون ٧١
نتیجه‌گیری ٧٢
پیشنهادات ٧٣
ضمیمه ٧٤
منابع ٧٦

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل۱-۱. گونه‌های مختلف کربن ٦

شکل ۱-۲. ترانزیستور اثر میدانی ۹

شکل ۱-۳. ترانزیستور نانولوله‌ی کربنی ۱۰

شکل ۲-۱. اربیتال $2p_x$ ۱۵

شکل ۲-۲. هیبرید sp ۱۷

شکل ۲-۳. ساختار sp^2 ..... ۱۸

شکل ۲-٤. شبکه گرافیت ۲۱

شکل ۲-۵. یاخته‌ی واحد گرافیت ۲۱

شکل۲-٦. یاخته‌ی واحدنانولوله‌ی کربنی ۲۳

شکل ۲-۷. گونه‌های متفاوت نانولوله‌های کربنی ۲۵

شکل ۲- ۸. تبهگنی خطوط مجاز در نانولوله‌ی کربنی ۳٦

شکل ۲-۹. مؤلفه‌های ماتریس ثابت نیرو ٤۳

فهرست جدول‌ها

عنوان صفحه

جدول ۲-۱ عناصر ماتریس ثابت نیرو..... ۴۳

فهرست نمودارها

عنوان **صفحه**

نمودار ۲-۱. نوار انرژی الکترونی گرافیت ۳۳

نمودار ۲-۲. نوار انرژی الکترونی نانولوله‌ی کربنی ۳۵

نمودار ۲-۳. چگالی حالات در نانولوله‌ی کربنی ۳۸

نمودار ۲-٤. نوار سه بعدی انرژی فونونی گرافیت ٤٥

نمودار ۲-٥. نوار انرژی فونونی در راستای خطوط متقارن منطقه اول بریلوئن ٤٥

نمودار ۲-٦. نوار انرژی فونونی نانولوله‌ی کربنی ٤٧

نمودار ۳-۱. سطح فرمی در نانولوه‌های کربنی ٥٤

نمودار ۳-۲. منطقه‌ی تکرار شونده در نانولوله‌های کربنی ٦٠

نمودار ۳-۳. نقاط متقارن در مسئله پراکندگی ٦٢

نمودار ٤-۱. نرخ پراکندگی در دو نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۰،۰) و (۱۴،۰) ٦٤

نمودار ٤-۲. وابستگی دمایی نرخ پراکندگی ٦٤

نمودار٤-۳. تابع توزیع در میدان ضعیف و قوی $v=۶$ نانولوله‌ی (۱۰،۰) ٦٥

نمودار٤-٤. تابع توزیع در میدان ضعیف و قوی $v=۷$ نانولوله‌ی (۱۰،۰) ٦٦

نمودار ٤-٥. وابستگی سرعت میانگین الکترون به دما در نانولوله‌ی کربنی ٦٨

نمودار ٤-٦. توزیع سرعت در نانولوله‌های زیگزاگ ٦٨

نمودار ٤-۷. نمودار جریان – ولتاژ در مورد نانولوله‌های زیگزاگ ٦٩

نمودار ٤-٨. برازش مقاومت نانولوله‌های مختلف ۷۰

نمودار ٤-٩. برازش‌تحرک‌پذیری الکترون در نانولوله‌های زیگزاگ مختلف ۷۱

فهرست پیوست‌ها

عنوان **صفحه**

پیوست الف: توضیح روال واگرد..... ۷٤

چکیده انگلیسی ۷۹

مقدمه

با گذر زمان و پیشرفت علم و تکنولوژی نیاز بشر به کسب اطلاعات و سرعت پردازش و ذخیره سازی آنها به صورت فزاینده‌ای بالا رفته است. گوردن مور[1] معاون ارشد شرکت اینتل در سال ۱۹۶۵ نظریه‌ای ارائه داد مبنی بر اینکه در هر ۱۸ ماه تعداد ترانزیستورهایی که در هر تراشه به کار می‌رود دو برابر شده و اندازه آن نیز نصف می‌شود [۱]. این کوچک شدگی نگرانی‌هایی را به وجود آورده است. بر اساس این نظریه در سال ۲۰۱۰ باید ترانزیستورهایی وجود داشته باشد که ضخامت اکسید درگاه که یکی از اجزای اصلی ترانزیستور است به کمتر از یک نانومتر برسد. بنا بر این باید بررسی کرد، اکسید سیلیسیم به عنوان اکسید درگاه در ضخامت تنها کمتر از یک نانومتر انتظارات ما را در صنایع الکترونیک برآورده می‌کند یا نه. در راستای همین تحقیقات گروه دیگری از دانشمندان به بررسی نیترید سیلیکون به عنوان نامزد جدیدی برای اکسید درگاه پرداختند و نشان دادند که این ماده می تواند جایگزین مناسبی برای اکسید سیلیکون باشد [۲]. جهت تولید ترانزیستورهای نسل امروز احتیاج به دانشی داریم که بتوانیم در ابعاد نانو تولیدات صنعتی

[1] Gordon E.Moore

از تراشه‌ها را داشته باشیم. بنا بر این توجه جوامع علمی و اقتصادی جهان بر این شاخه از علم که به فن آوری نانو[1] معروف است، جلب شده است. در این بین نانولوله‌های کربنی به دلیل خواص منحصر به فرد الکتریکی و مکانیکی که از خود نشان داده اند توجه بسیاری از دانشمندان را به خود جلب کرده‌اند [۳و٤].

در راستای این تحقیقات ما به بررسی خواص الکتریکی نانولوله‌های کربنی پرداخته‌ایم. بسیاری از دانشمندان بر این باور هستند که نانولوله‌های کربنی به دلیل قابلیت رسانش ویژه یک بعدی جای مواد سیلیکونی در تراشه‌های نسل آینده را خواهند گرفت [٥و٦].

[1] Nanotechnology

فصل اول

مقدمه‌ای بر کربن و اشکال مختلف آن در طبیعت و کاربرهای آن

۱-۱ مقدمه

کربن با عدد اتمی ٦ در گروه ششم جدول تناوبی قرار دارد. این عنصر ترکیب اصلی موجودات زنده را در بر گرفته است. بنا بر این بیشتر دانشمندان سعی می‌کنند ترکیبات کربنی را در شاخه‌ی شیمی آلی بررسی کنند. این عنصر از دیر باز برای انسان به صورت دوده و ذغال چوب شناخته شده بود. گونه‌های متفاوت دیگری از کربن نیز وجود دارند که تفاوت این گونه‌ها صرفاً به شکل گیری اتم‌های کربن نسبت به هم یا به ساختار شبکه‌ای آن‌ها بر می‌گردد.

۱-۲ گونه های مختلف کربن در طبیعت

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

۱-۲-۱ کربن بی‌شکل

از سوختن ناقص بسیاری از هیدروکربن‌ها و یا مواد آلی (مثل چوب یا پلاستیک) ماده سیاه رنگی به جا می‌ماند که کربن بی‌شکل یا آمورف نام دارد. این ماده که پس مانده‌ی سوخت ناقص مواد آلی است از دیر باز جهت تولید انرژی بشر قرار می‌گرفت. ذغال چوب و ذغال سنگ از انواع مواد کربن بی شکل هستند که انسان با سوزاندن آن‌ها انرژی زیادی را بدست می‌آورد.

۱-۲-۲ الماس

الماس گونه‌ی شناخته شده دیگری از کربن می‌باشد که دارای ساختار بلوری منظمی است. در این ساختار هر اتم کربن با چهار اتم کربن دیگر پیوند برقرار می‌کند. اتم‌های الماس در یک شبکه fcc با ثابت شبکه $a = ۰/۳۵۶\,nm$ قرار دارند. طول پیوند کربن – کربن در این ساختار برابر $۰/۱۵\,nm$ گزارش شده است [۷]. این ماده به دلیل سختی بالا تمام عناصر موجود در طبیعت را می‌خراشد و از این رو در تراش فلزات سخت، سرامیک‌ها و شیشه از آن استفاده می‌کنند. این ماده به دلیل درخشش بالایی که دارد از دیرباز در جواهر آلات نیز مورد استفاده قرار می‌گرفته است.

۱-۲-۳ گرافیت

بررسی دقیق هندسی و خواص الکتریکی گرافیت را در فصل بعد انجام خواهیم داد. در اینجا فقط به معرفی این ماده به عنوان یکی از گونه‌های کربن در طبیعت اکتفا می‌کنیم. گرافیت از دیر باز جهت نوشتن به کار می‌رفته است. گرافیتی که در طبیعت یافت می‌شود معمولا دارای ناخالصی‌هایی می‌باشد و کربن خالص نیست.

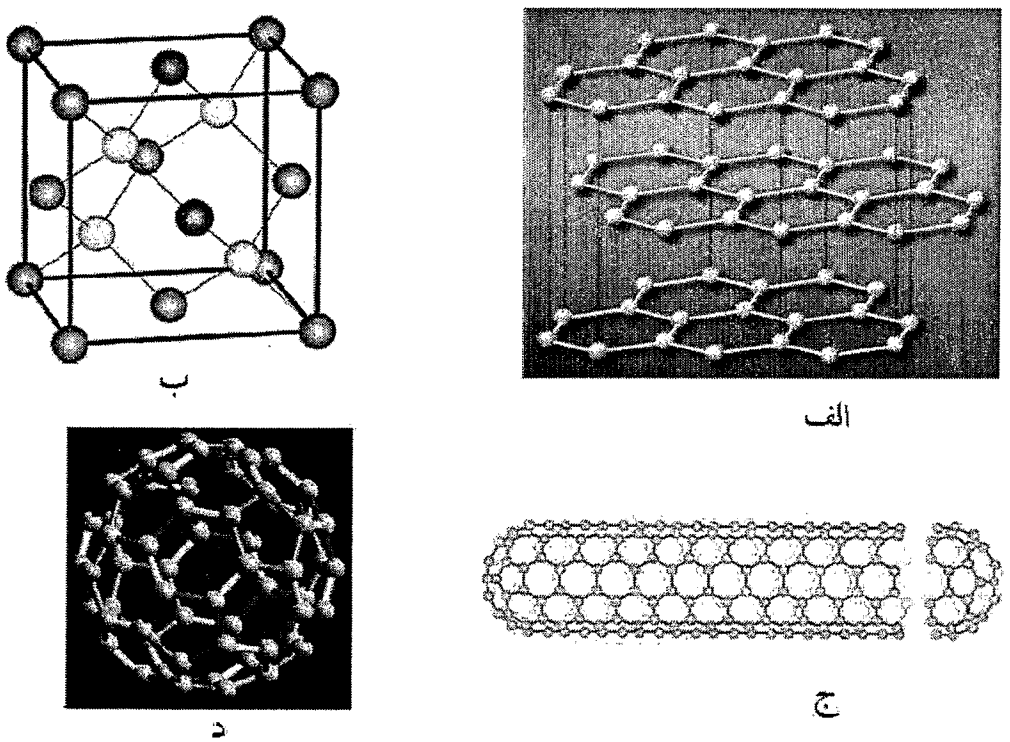
۱-۲-٤ فلورن و نانو لوله‌های کربنی

در سال ۱۹۸۵ ریچارد اسملی[1] ساختاری جدید از کربن را کشف کرد که فلورن نامگذاری شد [۸]. C_{60} اولین فلورنی بود که کشف شد. این ملکول همانند یک توپ فوتبال کروی است و شامل ٦۰ اتم کربن می‌باشد که در گوشه‌های شش ضلعی‌های منتظم و تعدادی مشخص پنج ضلعی قرار دارد. سطح یک کره را نمی‌توان تنها با شش ضلعی‌های منتظم پوشش داد بنا بر این اتم‌های کربن جهت قرار گیری بر روی یک سطح کروی ناچار هستند در بعضی از مکان‌ها تشکیل پنج ضلعی بدهند. مولکول C_{60} متشکل از ساختاری با ۲۰ شش ضلعی و ۱۲ پنج ضلعی است [۷].

بعد از گزارش کشف مولکول C_{60} دانشمندان زیادی شروع به انجام آزمایش‌های جدید جهت ساخت مولکول‌های جدید از کربن کردند. سرانجام در سال ۱۹۹۱ ایجیما[2] موفق به کشف نانولوله‌های چند دیواره‌ی کربنی[3] شد [۹]. دوسال بعد از گذارش کشف نانولوله‌های کربنی چند دیواره، ایجیما و همکارانش

[1] Rick Smalley
[2] Iijima
[3] MWCNT

موفق به ساخت نانولوله‌های کربنی تک دیواره[1] شدند [۱۰و۱۱]. نانولوله‌های کربنی به دلیل خواص الکتریکی جالبی که دارند در قطعات الکتریکی موارد استفاده زیادی می‌توانند داشته باشند. این مواد به دلیل رسانش یک‌بعدی در مقیاس نانو می‌توانند جاگزین مناسبی برای فلزات و یا نیمرساناها باشند.



شکل۱-۱. (الف): این شکل صفحات گرافیت رانشان می‌دهد. (ب): ساختار بلوری الماس در این شکل نشان داده شده است. (ج) نمونه ای از یک نانولوله‌ی آرمیچر را مشاهده می‌کنید. (د) مولکول C_{60} که یک فلورین است در این شکل نشان داده شده است [۱۲].

[1] SWCNT

نانولوله‌ها بنا بر پیکربندی هندسی خود می‌توانند خواص رسانایی و یا نیمرسانایی از خود نشان دهند و همین موضوع این مواد را از سایر مواد مشابه متمایز می‌کند. نانولوله‌ها علاوه بر سبک بودن استحکامی چند برابر فولاد نیز دارند [۱۳]. در شکل (۱-۱) انواع گوناگون کربن که در اینجا معرفی کردیم نشان داده‌ایم.

رسوب گذاری بخار شیمیایی[1]، قوس الکتریکی[2] و تبخیر لیزری[3] عمومی‌ترین روش‌هایی هستند که جهت تولید نانو ساختارها از جمله نانولوله‌های کربنی به کار می‌روند.

در روش لایه نشانی بخار شیمیایی عموماً ترکیبات عالی از کربن همچون متان، اسیتیلن و. . . را در یک کوره حرارتی از روی یک کاتالیزور مشخص عبور می‌دهند در طی این فرایند کربن از ماده آلی جدا شده و روی کاتالیزر تشکیل نانولوله‌ی کربنی می‌دهد. در این روش می‌توان نانولوله‌های تک دیواره ویا چند دیواره تولید کرد. نانو ذراتی همچون نانو ذرات آهن، کبالت یا نیکل به تنهایی و یا به صورت مخلوط عموماً به عنوان کاتالیزور استفاده می‌شوند [۱٤و۱٥].

روش قوس الکتریکی روش دیگری جهت تولید نانولوله‌ها می‌باشد. در این روش تخلیه الکتریکی بین دو الکترود گرافیتی در محیط گازی یا مایع انجام می‌شود. روش‌هایی جهت بهبود و بالا بردن راندمان نانولوله پیشنهاد شده است از جمله تخلیه قوس در میدان مغناطیسی [۱٦] و یا استفاده از آنود چرخان جهت تولید قوسی با پلاسمای دوار [۱۷].

روش تبخیر لیزری جهت تولید نانولوله‌ی کربنی در سال ۱۹۹٥ به وسیله‌ی گروه ریچارد اسملی مورد استفاده قرار گرفت [۱۸]. در این روش جهت بخار کردن گرافیت که در کوره حرارتی قرار گرفته از لیزر استفاده می‌کنند. بخار داغ گرافیت را به سرعت سرد می‌کنند از چگالش بخار گرافیت برروی سرد کننده نانولوله‌هایی با خلوص بالا تولید می‌شود.

---

[1] Chemical Vapor Deposition
[2] Arc Discharge
[3] Laser Vaporization