بسم الله الرحمن الرحیم

دانشگاه تربیت مدرس
دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر

بسمه تعالی

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

آقای محمدرضا عزیزیان پایان نامه ۶ واحدی خود را با عنوان **شبیه سازی و تحلیل عملکرد نور گسیلی ترانزیستور مبتنی بر نانو لوله های کربنی** در تاریخ ۱۳۹۰/۱۱/۸ 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.

عضو هیات داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضا
استاد راهنما	دکتر وحید احمدی	استاد	
استاد ناظر	دکتر داوود فتحی	استادیار	
استاد ناظر	دکتر محمدکاظم مروج فرشی	استاد	
استاد ناظر	دکتر سید شمس الدین مهاجرزاده	استاد	
مدیر گروه (یا نماینده گروه تخصصی)	دکتر محمدکاظم مروج فرشی	استاد	

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، دانش آموختگان 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 پایان نامه‌ها / 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 پایان نامه/ 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 دانش آموختگی 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 پایان نامه / رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی دانشگاه باید با مجوز کتبی صادره از طریق حوزه پژوهشی دانشگاه و بر اساس آئین نامه های 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 پایان نامه/ 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 لازم الاجرا است و هرگونه تخلف از مفاد این دستورالعمل، از طریق مراجع قانونی قابل پیگیری می شود.

نام و نام خانوادگی: محمد رضا عزیزیان

امضاء

دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر

آیین نامه چاپ پایان‌نامه (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 می‌شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله)ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثارعلمی» 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 هزینه‌های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت‌چاپ) را به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر درمعرض فروش قرار دهد.

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

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

ماده ۶: اینجانب محمدرضا عزیزیان دانشجوی رشته برق-الکترونیک مقطع کارشناسی- ارشد

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

نام و نام خانوادگی: محمد رضا عزیزیان

تاریخ و امضا: ۱۳۹۰/۱۱/۰۹

دانشکده فنی و مهندسی

پایان‌نامه دوره‌ی کارشناسی ارشد مهندسی برق- الکترونیک

شبیه سازی و تحلیل عملکرد نور گسیلی ترانزیستور مبتنی بر نانولوله‌های کربنی

نام دانشجو:

محمد رضا عزیزیان

استاد راهنما:

دکتر وحید احمدی

بهمن ۱۳۹۰

تقدیم به پدر و مادرم

که از نگاهشان صلابت

از رفتارشان محبت

و از صبرشان ایستادگی را آموختم

و همسرم، اسطوره زندگیم، پناه خستگیم و امید بودنم

تشکر و قدردانی

اینجانب کمال تشکر و قدرانی خود را از استاد گرانقدرم جناب آقای دکتر وحید احمدی دارم که با راهنمایی‌های با ارزششان اینجانب را در تکمیل این پایان نامه یاری رساندند و راه بهتر زیستن، بهتر دیدن و بهتر آموختن را به من آموختند.

همچنین بر خود لازم می دانم که از کلیه اساتید گروه الکترونیک دانشگاه تربیت مدرس که در این مدت از دانش ایشان بهره‌مند گشتم به خصوص جناب آقای دکتر محمدکاظم مروج‌فرشی به دلیل راهنمایی‌های ارزنده‌شان در زمینه تکمیل این پایان نامه و الطاف پدرانه‌شان در مسیر زندگی‌ام تشکر و قدردانی کنم.

همچنین از جناب آقای دکتر داوود فتحی به خاطر همکاری موثر ایشان در جهت بهبود این پایان‌نامه سپاسگزارم.

بر خود لازم می دانم تا از همسر صبور و مهربانم سرکار خانم نرجس مقدم تشکر کنم که بی شک اگر از خود گذشتگی و تلاش ایشان نبود این کار هرگز به ثمر نمی‌رسید.

در انتها از همه دوستانم در آزمایشگاه شبیه سازی ادوات پیشرفته و آزمایشگاه نانواپتوالکترونیک کمال تشکر را می نمایم.

چکیده

در این پایان نامه یک مدل کوانتومی برای شبیه سازی قطعات نانومتری ارائه می‌شود. این مدل علاوه بر پیش بینی مناسب عملکرد نورگسیلی ساختار، اثرات کوانتومی را نیز به خوبی در بر دارد. بدین منظور از حل خودسازگار معادلات پواسن-شرودینگر و روش تابع گرین غیر تعادلی، برای حل معادله انتقال، استفاده می‌کنیم. برای لحاظ کردن اثر برهمکنش حامل‌ها از مفهوم ماتریس خود-انرژی ، با در نظر گرفتن قانون بقای جریان، بهره می‌گیریم. با صرفنظر از بازترکیب‌های غیر نوری، نرخ باز ترکیب نوری و طیف نورگسیلی افزاره pin شبیه سازی و اثر تغییرات بایاس گیت و درین و همچنین تغییرات طول کانال بر عملکرد نورگسیلی افزاره بررسی می‌گردد. برای محاسبه ضریب بازترکیب دو مولکولی استفاده از تئوری لنجوین پیشنهاد می‌شود که نتایج حاصله با نتایج تجربی به خوبی سازگار است. مدل ارائه شده تایید می-کند که عملکرد الکتریکی و نوری افزاره به شدت به هم وابسته‌اند، که با نتایج تحقیقات پیشین سازگار است. به علاوه با تعمیم روابط تابع گرین و تغییر ماتریس همیلتونی جهت پیش‌بینی رفتار افزاره تحت کرنش، به بررسی عملکرد الکتریکی افزاره تحت کرنش می‌پردازیم. نتایج نشان می‌دهد که تغییرات فیزیکی نانولوله‌های کربنی تاثیر چشمگیری بر مشخصه الکتریکی افزاره دارند، در نتیجه توقع داریم که مشخصات نورگسیلی افزاره نیز به شدت تحت تاثیر کرنش تغییر کند. برای بررسی این مسئله، به بررسی عملکرد نوری افزاره تحت کرنش می‌پردازیم. نتایج نشان می‌دهند که مشخصه‌های نوری افزاره نیز به شدت تحت تاثیر تغییرات فیزیکی هستند به طوری که کاهش نرخ بازترکیب نوری و همچنین جابه‌جایی پیک طیف نور گسیلی با اعمال مقدار کمی کرنش به وضوح دیده می‌شود.

واژگان کلیدی: ترانزیستور نانولوله کربنی، تابع گرین غیر تعادلی، نرخ باز ترکیب نوری، طیف نورگسیلی، انتقال حامل، تئوری لنجوین، کرنش کششی و پیچشی

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فهرست علایم و نشانه‌ها ..... ج
فهرست جدول‌ها ..... ه
فهرست شکل‌ها ..... و

فصل ۱- مقدمه ای بر نانولوله های کربنی و کاربرد آن ها ۱
۱-۱- مقدمه ۱
۱-۲- معرفی نانولوله های کربنی ۲
۱-۳- انواع نانولوله های کربنی ۴
۱-۳-۱- نانولوله کربنی تک جداره ۴
۱-۳-۲- نانولوله کربنی چند جداره ۶
۱-۴- روابط حاکم بر نانولوله های کربنی ۶
۱-۵- کاربردهای نانولوله‌های کربنی ۷
۱-۶- خواص نانولوله های کربنی ۸
۱-۶-۱- خواص الکتریکی ۸
۱-۶-۲- خواص نوری ۱۱
۱-۷- اهداف و روند کلی پایان نامه ۱۲

فصل ۲- مروری بر ساختارهای نور گسیل مبتنی بر ترانزیستور نانولوله کربنی ۱۴
۲-۱- مقدمه ۱۴
۲-۲- ساختارهای ترانزیستوری مبتنی بر نانولوله کربنی ۱۵
۲-۲-۱- ترانزیستور سد شاتکی ۱۵
۲-۲-۲- ترانزیستور با اتصال اهمی ۱۷
۲-۳- ساختارهای نور گسیلی ۱۸
۲-۳-۱- ساختارهای نورگسیل نانولوله کربنی شاتکی با طول کانال بالا ۱۹
۲-۳-۲- ساختارهای نورگسیل نانولوله کربنی شاتکی با طول کانال کوتاه ۲۴
۲-۳-۳- ساختار نورگسیلی نانولوله کربنی با دیود پیوندی p-n ۲۶

فصل ۳- رویکرد شبیه سازی ۳۰
۳-۱- مقدمه ۳۰
۳-۲- حل معادله پواسن ۳۱
۳-۲-۱- شرایط مرزی ۳۷

۳-۳- فرمول بندی تابع گرین غیر تعادلی ۴۰
۳-۳-۱- رویکرد تابع گرین غیر تعادلی در فضای حقیقی ۴۳
۳-۳-۲- رویکرد تابع گرین غیر تعادلی در فضای مد ۴۷
۳-۴- محاسبه خود-انرژی اتصالها ۵۰
۳-۴-۱- خود-انرژی برای یک اتصال اهمی نیمه بی‌نهایت در فضای حقیقی ۵۰
۳-۴-۲- خود-انرژی برای یک اتصال اهمی نیمه بی‌نهایت در فضای مد ۵۳
۳-۵- برهم کنش حاملها ۵۳
۳-۶- محاسبه بازترکیب الکترون و حفره ۵۵
۳-۷- محاسبه ضریب دو مولکولی (تئوری لنجوین) ۵۶

فصل ۴- بررسی عملکرد الکتریکی ساختارهای تحت کرنش ۵۹

۴-۱- مقدمه ۵۹
۴-۲- مشخصه الکتریکی یک ماسفت نانولوله کربنی ۶۰
۴-۳- اثرات کرنش و روش شبیه سازی ۶۱
۴-۴- کرنش طولی ۶۵
۴-۵- کرنش پیچشی ۶۹

فصل ۵- شبیه سازی و تحلیل عملکرد نور گسیلی pin-CNTFET ۷۲

۵-۱- مقدمه ۷۲
۵-۲- ساختار افزاره ۷۲
۵-۳- نتایج شبیه سازی افزاره پیشنهادی ۷۴
۵-۴- اثر کرنش بر عملکرد نورگسیلی افزاره ۸۱
۵-۴-۱- عملکرد نورگسیلی تحت کرنش طولی ۸۱
۵-۴-۲- عملکرد نورگسیلی تحت کرنش پیچشی ۸۴

فصل ۶- نتیجه گیری و پیشنهادات ۸۷

۶-۱- مقدمه ۸۷
۶-۲- نتیجه گیری ۸۸
۶-۳- پیشنهاد ۹۰
مراجع ۹۱
واژه نامه فارسی به انگلیسی ۹۴
واژه نامه انگلیسی به فارسی ۹۶

فهرست علایم و نشانه‌ها

عنوان	علامت اختصاری
بردار کایرال	(n,m)
قطر نانولوله کربنی	d
بردار موج	k
عدد کوانتومی	q
بردار یکه در جهت محور نانولوله کربنی	c
پارامتر کوپلینگ یا تنگ بست	t
فاصله بین اتم کربن-کربن	a_{cc}
تابع پله	$\Theta(x)$
احتمال انتقال از سد شاتکی	$T(E)$
سطح شبه فرمی الکترون/حفره	$F_{e/h}$
سطح فرمی سورس و درین	$E_{FD/FS}$
نرخ بازترکیب نوری	R
ضریب بازترکیب دو قطبی	β
قابلیت حرکت حامل	μ
چگالی جریان الکترون/حفره	$J_{n,p}$
ثابت بولتزمن	k_B
دما (کلوین)	T
انتگرال معکوس فرمی دیراک۱/۲	$\Im_{1/2}$
چگالی حالات موثر در نوار هدایت	N_C
ضخامت ناحیه اکسید	t_{ox}
شعاع نانولوله	R_{cnt}
سطح انرژی خلا منهای تابع کار نانولوله ذاتی	E_m
ماتریس همیلتونی	H
تابع گرین	$G(E)$
خود-انرژی	Σ

چگالی حالات سطحی محلی	$LDOS$
پهن شدگی سطوح انرژی سورس و درین	$\Gamma_{S(D)}$
سطح انرژی در حالت خنثایی بار	E_N
کوپل‌شوندگی بین دو حلقه مجاور	b_{2q}
تابع گرین سطحی	g_m
توابع همبستگی الکترون/حفره	$G^{n/p}$
چگالی ذاتی حامل های نانولوله کربنی	n_i
شعاع کلمب	r_c
ثابت دی الکتریک	ε_t
فاصله پرش	r
هدایت نانولوله کربنی	σ_{cnt}
چگالی بار کانال	Q_{ch}
رسانش	G
خازن گیت	C_G
میزان استرین طولی	σ
میزان استرین پیچشی	γ
طیف الکترولومینسانس	EL
پیک بازترکیب حامل‌های محصورشده	LC
پیک حامل‌های آزاد	FC

فهرست جدول‌ها

عنوان **صفحه**

جدول ۴-۱. پارامترهای فیزیکی DLD-MOSCNT ۶۲
جدول ۵-۱. پارامترهای افزاره پیشنهادی. ۷۳

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل ۱-۱. نانولوله تک جداره..... ۴
شکل ۱-۲. ساختارهای مختلف نانولوله های کربنی با توجه به بردار کایرال [۳]..... ۵
شکل ۱-۳. ساختار نانولوله کربنی چند جداره.....۶
شکل ۱-۴. چگالی حالات نانولوله (۰و۱۶) [۴]..... ۱۰
شکل ۱-۵. ساختار نوار نانولوله های الف) زیگزاگ (۱۳و۰)، ب) آرمچر (۷و۷)، ج) زیگزاک فلزی (۱۲و۰). ۱۱
شکل ۲-۱. شماتیکی از ساختار یک ترانزیستور سد شاتکی کواکسیالی[۱۱].....۱۶
شکل ۲-۲. سطح مقطع ساختار کواکسیالی ترانزیستور شبه ماسفت..... ۱۸
شکل ۲-۳. طرحی از حل معادله انتقال برای ترانزیستور سد شاتکی با طول کانال بلند در ناحیه دوقطبی همسان[۱۰]..... ۲۰
شکل ۲-۴. مقایسه پیک تابش ناشی از نتایج شبیه سازی(خط) با نتایج تجربی(دایره). ضریب بازترکیب نوری با برازش منحنی تجربی بدست آمده است[۱۴]..... ۲۱
شکل ۲-۵. نرخ تابش فوتون با تغییر بایاس و جریان ثابت ۰/۲ میکروآمپر(نتایج به گاف نوار افزاره نرمالایز شده اند)[۱۴]..... ۲۲
شکل ۲-۶. پیک تابش ثابت در اتصال درین یک افزاره از نوع p با تغییر بایاس درین و گیت[۱۴]..... ۲۲
شکل ۲-۷. الف) پروفایل بار افزاره با طول ۱۰ میکرومتر در $V_{DS}=2V_{GS}$ ، خط ولتاژ گیت ۱/۰۱- ولت، خط چین ولتاژ گیت ۰/۹۵- ولت ، ب) نمودار نوار انرژی افزاره با حل خودسازگار (خط) و حل لاپلاس (نقطه چین) در $V_{DS}=2V_{GS}$ [۱۰]..... ۲۳
شکل ۲-۸. طیف نور گسیلی سه ساختار ترانزیستوری، سبز (مربع) افزاره ای با طول کانال بلند ۵۰ میکرو متر و رشد CVD در بایاس V_D=-20V, V_G=-10V, I=3.5μA ، قرمز (دایره) افزاره ای با طول کوتاه ۵۰۰nm در بایاس V_D=5V, V_G=2.5V, I=5μA و آبی(مثلث) افزارهای با طول کوتاه ۵۰۰nm در بایاس V_D=-11V,V_G=-5.5V, I=900nA[۱۵]..... ۲۵
شکل ۲-۹. جریان تزریقی الکترون (خط چین) و حفره (خط) از درین و سورس برحسب طول کانال نرمالیزه شده (i): طول ۱۰ میکرو و V_G=-1.01V, V_D=-2.02V، (ii) : طول ۱ میکرمتر و V_G=-1.01V, V_D=-2.02V و (iii): طول ۱۰ میکرومتر و V_G=-0.95V, V_D=-1.99V [۱۰].....۲۶
شکل ۲-۱۰. الف) ساختار افزاره، ب) ساختار نوار افزاره در بایاس مستقیم $V_{DS}>0$. الکترون و حفره به ناحیه ذاتی تزریق شده و بخشی به صورت نوری و بخشی غیر نوری بازترکیب می شوند[۱۶]..... ۲۷

شکل ۲-۱۱. صفحه بالا، تصویر SEM دیود پیوندی که نانولوله کربنی به رنگ مشکی، اتصالات سورس و درین زرد و الکترود گیت به رنگ زرد کمرنگ نشان داده شده اند. صفحه پایین، تابش مادون قرمز: سمت چپ وقتی که افزاره به صورت دوقطبی بایاس میشود و سمت راست: در حالت تک قطبی[۱۶]..... ۲۷
شکل ۲-۱۲. طیف نورگسیلی دیود پیوندی در جریان درین- سورس مختلف بین ۳۰ تا ۲۳۰ نانوآمپر[۱۶]. ۲۸
شکل ۳-۱. طرحی از رویکرد خودسازگار برای شبیه‌سازی افزاره..... ۳۱
شکل ۳-۲. الف)ساختار ترانزیستور اثر میدانی نانولوله کربنی متداول و نحوه مش‌بندی آن ب)پوسته استوانه‌ای مورد استفاده برای گسسته‌سازی در نقطه (i, j) و سطح مقطع دو بعدی متناظر با آن، نقطه مورد نظر بصورت پررنگ در شکل نشان داده شده است..... ۳۲
شکل ۳-۳. فلوچارت حل معادله پواسن. ۳۶
شکل ۳-۴. مشخصات المان مورد استفاده برای گسسته‌سازی معادله پواسن در سطح نانولوله..... ۴۰
شکل ۳-۵. ساختار یک ترانزیستور و پارامترهای بکار رفته در فرمول‌بندی تابع گرین غیر تعادلی حالت بالستیک. ۴۰
شکل ۳-۶. ساختار یک نانولوله زیگزاگ (n, 0)، برای محاسبه همیلتونی در فضای حقیقی. محور z جهت طولی نانولوله و محور c محیط نانولوله را نشان می‌دهد [۱۸]. ۴۴
شکل ۳-۷. ساختار یک نانولوله زیگزاگ (n, 0)، برای محاسبه همیلتونی در فضای مد. محور z جهت طولی نانولوله، محور c جهت محیطی نانولوله و k_c بردار موج مدهای مختلف را نشان می‌دهد. دایره‌ها معرف حلقه‌های A و مثلثها معرف حلقه‌های B هستند. شبکه نانولوله در فضای حقیقی به n شبکه یک بعدی در فضای مد تبدیل می‌شود که هر گره در شبکه یک بعدی معادل یک حلقه در شبکه نانولوله اصلی است..... ۴۸
شکل ۳-۸. فلوچارت رویکرد تابع گرین غیر تعادلی برای بدست آوردن الف) توزیع بار و ب) جریان..... ۵۱
شکل ۳-۹. نحوه محاسبه خود-انرژی برای یک اتصال نانولوله‌ای زیگزاگ (n, 0). دایره‌ها معرف حلقه‌های A و مثلثها معرف حلقه‌های B هستند و g_i ها تابع گرین سطحی برای حلقه iام را نشان می‌دهند..... ۵۲
شکل ۳-۱۰. چگالی جریان در طول افزاره با تغییر ماتریس خود-انرژی برهم کنش حاملها. با ماتریس مناسب منحنی آبی (خط) و با ماتریس نامناسب منحنی قرمز (خط چین) بدست می آید. ۵۴
شکل ۴-۱. نوار انرژی و چگالی الکترون ساختار الف) DLD-MOSCNT و ب)LDDS-MOSCNT..... ۶۱
شکل ۴-۲. سطح مقطع دو بعدی افزاره پیشنهادی..... ۶۲
شکل ۴-۳. ساختار شبکه شش ضلعی نانولوله کربنی با سه پارامتر کوپلینگ متفاوت الف) فضای حقیقی ب) فضای مد..... ۶۳
شکل ۴-۴. نانولوله کربنی تحت کرنش، الف) فشردگی، ب) کششی، ج) پیچشی. ۶۴
شکل ۴-۵. منحنی نوار انرژی نانولوله کربنی (۱۶و۰) تحت کرنش طولی از ۲-٪ تا ۲٪ ۶۵
شکل ۴-۶. نمودار نوار انرژی و چگالی الکترون ساختار پیشنهادی با (۱۶و۰) تحت کرنش طولی، الف) ۲-٪، ب) ۲٪ و ج) بدون کرنش. ۶۶

شکل ۴-۷. نمودار نوار انرژی نانولوله کربنی (۱۷و۰) تحت کرنش طولی از ۲-٪ تا ۲٪ ۶۷
شکل ۴-۸. نمودار نوار انرژی و چگالی الکترون ساختار پیشنهادی با (۱۷و۰) تحت کرنش طولی، الف) ۲-٪، ب) ۲٪ و ج) بدون کرنش. ۶۸
شکل ۴-۹. مشخصه جریان درین بر حسب ولتاژ گیت در ولتاژ درین ۰/۴ ولت، الف) کایرالیتی (۱۶و۰) و (۱۳و۰)، ب) کایرالیتی (۱۷و۰) و (۱۴و۰). ۶۹
شکل ۴-۱۰. نمودار نوار هدایت ترانزیستوری با کایرالیتی الف) (۱۶و۰) و ب) (۱۷و۰). ۷۰
شکل ۴-۱۱. نمودار نوار انرژی (خط سفید) و چگالی بار (رنگی) تحت کرنش پیچشی الف) کایرالیتی (۱۶و۰) و $\gamma=1^{O}$ ، ب) کابرالیتی (۱۶و۰) و $\gamma=5^{O}$ ، ج) کایرالیتی (۱۷و۰) و $\gamma=1^{O}$ و د) کایرالیتی (۱۷و۰) و $\gamma=5^{O}$. ۷۱
شکل ۴-۱۲. مشخصه جریان درین بر حسب ولتاژ گیت تحت کرنش پیچشی الف) کایرالیتی (۱۶و۰) و ب) کایرالیتی (۱۷و۰). ۷۱
شکل ۵-۱. سطح مقطع دو بعدی ساختار نور گسیلی مبتنی بر ترانزیستورنانولوله کربنی pin..... ۷۳
شکل ۵-۲. نمودار نوار انرژی افزاره در دو بایاس ۰ ولت (خط) و ۰/۴ ولت (نقطه چین). ۷۴
شکل ۵-۳. منحنی نوار انرژی و چگالی الکترون برای ساختار pin در ولتاژ درین و گیت الف) صفر ولت ب) ۰/۴ ولت. ۷۵
شکل ۵-۴. منحنی تغییرات ضریب بازترکیب دو مولکولی بر حسب ولتاز گیت افزاره ای با طول کانال ۲۰ نانومتر و ولتاژ آستانه ۰,۲۵ ولت. ۷۵
شکل ۵-۵. نرخ بازترکیب نوری بر حسب طول افزاره در الف) ولتاژ درین ۰/۴ ولت و تغییر ولتاژ گیت، ب) ولتاژ گیت ۰/۴ ولت و تغییر ولتاژ درین. ۷۶
شکل ۵-۶. طیف نورگسیلی افزاره، الف) تغییرات ولتاژ درین در V_{GS}=0.4V ، ب) تغییرات ولتاژ گیت در V_{DS}=0.4V. ۷۸
شکل ۵-۷. مقایسه نرخ بازترکیب افزاره pin با دو طول کانال مختلف در دو محدوده بالستیک و غیربالستیک، همانطور که منحنی ها نشان میدهند، پیک هر ساختار در وسط کانال رخ می دهد. ۷۹
شکل ۵-۸. مشخصه جریان بر حسب ولتاژ درین برای طول کانال ۲۰ نانومتر در دو محدوده بالستیک (خط) و غیر بالستیک (خط چین). ۸۰
شکل ۵-۹. منحنی نوار انرژی و چگالی الکترون برای ساختار pin تحت کرنش طولی. الف) ۲٪ ب) ۲-٪ ۸۲
شکل ۵-۱۰. مشخصه نرخ بازترکیب نوری ساختار pin تحت کرنش طولی از ۲-٪ تا ۲٪ ۸۲
شکل ۵-۱۱. طیف نورگسیلی ساختار pin تحت کرنش طولی از ۲-٪ تا ۲٪ ۸۳
شکل ۵-۱۲. منحنی نوار انرژی و چگالی الکترون برای ساختار pin تحت کرنش پیچشی. الف) ۱ درجه ب) ۳ درجه. ۸۴
شکل ۵-۱۳. مشخصه نرخ بازترکیب نوری ساختار pin تحت کرنش پیچشی از ۰ تا ۵ درجه. ۸۵
شکل ۵-۱۴. طیف نورگسیلی ساختار pin تحت کرنش پیچشی از ۰ تا ۵ درجه. ۸۵

فصل ۱- مقدمه ای بر نانولوله های کربنی و کاربرد آن ها

۱-۱- مقدمه

با پیشرفت روزافزون تکنولوژی ساخت ادوات الکترونیکی و ادوات نوری و رسیدن به ابعاد نانومتری در این عرصه، همچنین با کاهش ابعاد جهت مجتمع سازی بالاتر و عملکرد بهتر افزاره، مصرف توان کمتر و نیز پیچیده تر شدن توابع، نیاز به استفاده از ماده‌ای با خصوصیات فیزیکی و شیمیایی مناسب در ابعاد نانو متری هر روز بیشتر می گردد که در این میان نانولوله‌های کربنی جایگزین مناسبی هستند. اغلب قطعات ساخته شده با نانولوله‌های کربنی مبتنی بر ساختار ترانزیستوری شبه فلز- اکسید- نیمه‌هادی یا ترانزیستورهای سد شاتکی می‌باشند که در هر دو از نانولوله‌ها به عنوان کانال ترانزیستور استفاده می‌شود. در ترانزیستورهای با کاربرد نوری که هدف داشتن همزمان الکترون و حفره به میزان بالا است، ترانزیستوری با رفتار دو قطبی یکسان قوی می خواهیم که در آن میزان مشارکت الکترون و حفره برابر باشد. اما، از آنجاییکه حضور دو سد شاتکی برابر عملکرد افزاره را محدود می کند، ترانزیستور اهمی با ساختار pn یا pin ساخته شد. در این میان شبیه سازی هریک از این ساختارها نقش کلیدی در فهم و بهبود عملکرد افزاره بازی می کند. در مقالاتی که تا کنون ارائه شده، جهت شبیه سازی قطعات ماکروسکوپی از کوپل معادلات پواسون-پیوستگی استفاده شده است که قابلیت بررسی کوانتومی مشخصات افزاره را ندارد.

اولین نانولوله‌های کربنی چند جداره[1] توسط آقای ایجیما در سال ۱۹۹۱ بطور اتفاقی در فرآیند تخلیه قوس الکتریکی ساخته شدند. دو سال بعد، دونالد بتون ساخت اولین نانولوله‌های تک جداره[2] را گزارش کرد.

---

[1] Multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs)

[2] Single-walled carbon nanotubes (SWNTs)

نانولوله‌های کربنی دارای خواص مکانیکی، الکتریکی، حرارتی، اپتوالکترونیک، نوری و ساختاریِ یکتایی هستند. برای مثال از خواص مکانیکی فوق العاده نانولوله‌ها برای ساخت کامپوزیت‌های قوی استفاده می‌شود. از خاصیت گسیل میدان آنها برای ساخت نمایشگرهای تخت و ساطع کننده نور مادون قرمز، از خاصیت انتقال بالستیک حامل‌ها در نانولوله‌های تک جداره برای ساخت ترانزیستورهای مبتنی بر نانولوله‌های کربنی، از خاصیت بازدهی فتوولتائیک آن برای ساخت آشکارساز فوتونی و در نهایت از حساسیت خواص الکتریکی آنها به برهم کنش با محیط برای تولید سنسورهای شیمیایی استفاده می‌شود. طبق قانون مور هر ۱۸ ماه طول کانال نصف می شود ولی این کاهش حجم مشکلاتی مثل نیاز به دقت بالا، گرمای تلف شده بیشتر و معادلات پیچیده‌تر دارد. پس صنعت به سمت قطعات نانو رفت که در این راستا نانولوله‌های کربنی نقش موثری را ایفا کردند. در حال حاضر، کاربردهای جدید نانولوله‌ها در حال ظهور است و می‌توان گفت کشف نانولوله های کربنی تحولی در ادوات و قطعات کاربردی ایجاد کرده است و شاید بتوان نانولوله های کربنی را نقطه عطفی در کاربردهای علمی قرن بیست و یکم دانست[۱].

۱-۲- معرفی نانولوله های کربنی

نانولوله‌های کربنی دارای ساختار آلوتروپیک[۳] (چند شکلی) هستند. شکل استوانه‌ای و خواص شگفت انگیزشان، آنها را برای به کار گیری در بسیاری از کاربردهای نانوفناوری، الکترونیک، نوری و حوزه های دیگر علم مواد مناسب ساخته است. نانولوله‌های کربنی استحکامی خارق العاده و خواص الکتریکی منحصر به فردی دارند و نیز هادی خوبی برای حرارت اند. نانولوله‌های کربنی عضوی از خانواده فلورین ها اند که باکی‌بالها را نیز شامل می شوند. فلورین‌ها خوشه بزرگی از اتم‌های کربن هستند که به صورت یک قفسِ بسته اند و از ویژگی-

[3] Allotropic form

های خاصی برخوردارند که پیش از این در هیچ ترکیب دیگری یافت نشده بود. بنابراین، فلورین‌ها به طور کلی خانواده‌ای جالب توجه از ترکیب ها را تشکیل می دهند که در فناوری های آینده کاربرد وسیعی خواهند داشت.

ساختارهای عجیب و زیادی از فلورین ها شامل: کروی منظم، مخروطی، لوله ای و همچنین اشکال پیچیده و عجیب دیگر وجود دارد. ساختار باکی بال به شکل کره و نانولوله به شکل استوانه است (که معمولاً یک یا هردو سر آن با درپوش نیم کروی از ساختار باکی بال پوشیده شده است). نام نانولوله از اندازه اش گرفته شده، زیرا قطر آن در ابعاد نانومتر است. این در حالی است که طول آن می تواند به بلندی چند میلی متر برسد. طول بلند چند میکرونی و قطر کوچک چند نانومتری آن ها، نسبت طول به قطر بسیار بزرگی را نتیجه می دهد. پس می-توان نانولوله را به صورت فلورین‌های تک بعدی در نظر گرفت. به این ترتیب انتظار می‌رود که این مواد از خواص الکترونیکی، مکانیکی و مولکولی ویژه‌ای برخوردار باشند.

نانولوله ها به دو دسته نانولوله‌های تک جداره و نانولوله‌های چند جداره تقسیم می شوند. نانولوله‌های تک جداره را می‌توان به صورت ورقه‌های بلند گرافن در نظر گرفت که به شکل استوانه پیچیده شده‌اند. نسبت طول به قطر نانولوله ها حدود ۱۰۰۰ است و همانگونه که ذکر شد می‌توان آن ها را به صورت ساختارهای تقریباً یک بعدی در نظر گرفت [۲]. نانولوله‌ها از پیوندهای مشابه گرافن تشکیل شده‌اند، پس این ساختار می‌تواند از پیوندهای موجود در الماس قوی‌تر باشد و استحکام منحصر به فردی به مولکول‌های نانولوله بدهد. نانولوله‌ها معمولاً تحت نیروهای زیاد به شکل ریسمان به هم می‌چسبند و تحت فشار زیاد می توانند به هم متصل شوند و امکان تولید سیم‌هایی با طول نامحدود و بسیار مستحکم را فراهم کنند.

۱-۳- انواع نانولوله های کربنی

۱-۳-۱- نانولوله کربنی تک جداره

یک نانولوله تک جداره از دو قسمت بدنه و در پوش با خواص متفاوت فیزیکی و شیمیایی تشکیل شده است. ساختار درپوش مشابه یک فلورین کوچک شبه C_{60} است. اتم‌های کربن که به شکل پنج ضلعی یا شش ضلعی در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند، ساختار در پوش را می سازند. ترکیب یک پنج ضلعی و پنج عدد شش ضلعی در اطراف آن قوس لازم برای شکل گیری یک در پوش را بوجود می‌آورد. البته گاهی بسته به نوع کاربرد، نانولوله-های سر باز هم تولید می‌شوند. قسمت دیگر نانولوله کربنی تک جداره، بدنه استوانه‌ای شکل آن است که از صفحه‌ای گرافنی با اندازه معلوم که در جهت مشخصی پیچیده شده، به دست می آید. این بخش استوانه‌ای تک جداره در شکل ۱-۱ نشان داده شده است. از آنجا که باید حاصل این پیچش تقارن استوانه‌ای داشته باشد، برای بدست آوردن استوانه‌ای بسته، فقط می‌توان صفحات را در جهاتی خاص پیچاند.

شکل ۱-۱. نانولوله تک جداره.

دو اتم از صفحه گرافن انتخاب می‌شوند، که یکی به عنوان مبدا در نظر گرفته می‌شود، سپس صفحه را می‌پیچانیم تا اتم دوم روی اتم مبدا منطبق گردد. برداری که از اتم مبدا به جهت اتم دیگر اشاره می‌کند، بردار کایرال[۴] نامیده می شود که طول آن برابر محیط نانولوله می‌باشد. محور نانولوله عمود بر بردار کایرال است.

[4] Chiral vector