بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه پیام نور

دانشکده علوم

مرکز شیراز

پایان نامه

برای دریافت مدرک کارشناسی ارشد

رشته‌فیزیک حالت جامد

عنوان پایان نامه:

مطالعه انرژی بستگی در نانو ساختارهای نیمه‌رسانا

مرضیه اسماعیل‌دخت

استاد راهنما : دکتر رضا خرداد

استاد مشاور: دکتر عبدالرسول قرائتی

مهر۱۳۹۰

جمهوری اسلامی ایران
وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

دانشگاه پیام نور استان فارس
باسمه تعالی

تاریخ : .....
شماره : .....
پیوست : .....

صورتجلسه دفاع از پایان‌نامه دوره کارشناسی ارشد

جلسه دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد **خانم مرضیه اسمعیل‌دخت** دانشجوی رشته **فیزیک گرایش حالت جامد** به شماره دانشجویی **۸۷۰۰۰۳۸۳۰** با عنوان:

" مطالعه انرژی بستگی در نانو ساختارهای نیمرسانا"

با حضور هیات داوران در روز **چهارشنبه** مورخ **۱۳۹۰/۷/۲۷** ساعت **۸:۳۰ صبح** در محل ساختمان **غدیر دانشگاه پیام نور شیراز** برگزار شد و هیأت داوران پس از بررسی، پایان‌نامه مذکور را شایسته نمره به عدد ..۱۹..به حروف..نوزده..با درجه..عالی..تشخیص داد.

ردیف	نام و نام خانوادگی	هیات داوران	مرتبه دانشگاهی	دانشگاه	امضاء
۱	دکتر رضا خرداد	راهنما	استادیار	یاسوج	
۲	دکتر عبدالرسول قرائتی جهرمی	مشاور	دانشیار	پیام نور شیراز	
۳	دکتر محمود مرادی	داور	استاد	شیراز	
۴	دکتر بهمن یوسفی	نماینده تحصیلات تکمیلی	استاد	پیام نور شیراز	

رئیس اداره تحصیلات تکمیلی
دانشگاه پیام نور مرکز شیراز
معاونت آموزشی و تحصیلات تکمیلی

شیراز- شهرک گلستان، بلوار دهخدا
قبل از نمایشگاه بین المللی
تلفن : ۳-۶۲۲۲۲۲۰-۰۷۱۱
دورنگار: ۶۲۲۲۲۴۹-۰۷۱۱
صندوق پستی :۱۳۶۸ - ۷۱۹۵۵
www.spnu.ac.ir
Email : admin@spnu.ac.ir

گواهی اصالت نشر و حقوق مادی و معنوی اثر

اینجانب مرضیه اسماعیل‌دخت دانشجوی ورودی سال ۱۳۸۷ مقطع کارشناسی ارشد رشته فیزیک، گواهی می‌نمایم چنانچه در پایان‌نامه خود از فکر، ایده و نوشته دیگری بهره گرفته‌ام با نقل قول مستقیم، یا غیر مستقیم، منبع و ماخذ آن را نیز در جای مناسب ذکر کرده‌ام. بدیهی است مسئولیت تمامی مطالبی که نقل قول دیگران، نباشد بر عهده‌ی خویش می‌دانم و جوابگوی آن خواهم بود. دانشجو تایید می‌نماید که مطالب مندرج در این پایان‌نامه نتیجه‌ی تحقیقات خودش می‌باشد و در صورت استفاده از نتایج دیگران، مرجع آن را ذکر نموده است.

نام و نام خانوادگی دانشجو: مرضیه اسماعیل دخت

تاریخ و امضاء

۹۱/۶/۲۸

اینجانب مرضیه اسماعیل‌دخت دادشجوی ورودی سال ۱۳۸۷ مقطع کارشناسی ارشد رشته فیزیک گواهی می‌نمایم چنانچه بر اساس مطالب پایان نامه خود اقدام به انتشار مقاله، کتاب و ... نمایم ضمن مطلع نمودن استاد راهنما، با نظر ایشان نسبت به نشر مقاله، کتاب و ... و به‌صورت مشترک و با ذکر نام استاد راهنما مبادرت نمایم.

نام و نام خانوادگی دانشجو : مرضیه اسماعیل دخت

تاریخ و امضاء

۹۱/۶/۲۸

کلیه حقوق مادی مترتب از نتایج مطالعات، آزمایشات و نوآوری ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه متعلق به دانشگاه پیام نور می باشد.

شهریور ۱۳۹۰

ج

تقدیم به فرزند صبورم

پارسا

سپاسگزاری

بر خود واجب می‌دانم که از استاد گرامی جناب آقای دکتر رضا خرداد که در انجام این تحقیق از لطف، صمیمیت و راهنمایی بی‌دریغ ایشان بهرمند گردیدم، نهایت سپاسگزاری را نموده و برای ایشان آرزوی طول عمر پر برکت و سراسر پیروزی نمایم.

همچنین از استاد گرامی جناب آقای دکتر عبدالرسول قرائتی که در طی دو سال از وجودشان بهره‌ی بسیار گرفتم، تشکر و قدردانی می‌نمایم و برای ایشان آرزوی توفیق روزافزون در راه پر خطیر هدایت دانشجویان می‌نمایم.

و بر دستان پارسای عزیزم که لحظه به لحظه، همراه و صبور مادر بود، بوسه می‌زنم.

چکیده

مطالعه‌ی انرژی بستگی نانوساختارهای نیمه‌رسانا

توسط: مرضیه اسماعیل‌دخت

در این پایان‌نامه ابتدا نانو ساختارها و کاربرد آنها را مورد بررسی قرار می‌دهیم و سپس ساختار نیمه-رساناها و خواصشان و تغییرات فیزیکی آنها را با افزودن ناخالصی به آنها مورد مطالعه قرار می‌دهیم. در ادامه انرژی بستگی انواع نانوساختارها از قبیل جعبه‌ی کوانتومی، نقطه‌ی کوانتومی کروی، سیم کوانتومی شیاری و نقطه‌ی کوانتومی استوانه‌ای را با ناخالصی هیدروژنی و با در نظر گرفتن جرم موثر ثابت و جرم موثر وابسته به مکان، محاسبه می‌کنیم. در ابتدای هر فصل، تابع موج و انرژی حالت پایه را برای نقاط کوانتومی کروی و استوانه‌ای و جعبه‌ی کوانتومی و سیم کوانتومی شیاری را به‌دست آورده و پس از آن با در نظر گرفتن جرم موثر ثابت و جرم موثر وابسته به مکان، انرژی بستگی را با استفاده از روش وردشی، محاسبه می‌کنیم. لازم به‌ذکر است که در همه‌ی موارد پتانسیل تحدید را مشخص می‌کنیم. نتایج نشان می‌دهند که انرژی بستگی همچنان‌که تابعی از اندازه‌ی نقطه و غلظت ناخالصی و ... است، تابعی از جرم موثر وابسته به مکان نیز می‌باشد.

کلید واژه: انرژی بستگی، نیمه‌رسانا، جرم موثر

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول آشنایی با نانوساختارها

۱-۱ مقدمه ۱

۱-۲ عناصر پایه در فناوری نانو ۲

۱-۳ گروه‌بندی مواد نانو ۳

۱-۳-۱ نانو مواد یک بعدی ۳

۱-۳-۲ نانو مواد دو بعدی ۴

۱-۳-۳ نانو مواد سه بعد ۵

فصل دوم آشنایی با ساختار نیمه‌رساناها

۲-۱ مقدمه ۸

۲-۲ ویژگی‌های نیمه‌رساناها ۸

۲-۳ انواع نیمه‌رساناها ۱۱

۲-۳-۱ نیمه‌رسانای ذاتی ۱۱

عنوان **صفحه**

۲-۳-۲ نیمه‌رسانای غیرذاتی ۱۱

۲-۴ ناخالصی در نیمه‌رساناها ۱۱

۲-۴-۱ نیمه‌رسانای نوع n ۱۲

۲-۴-۲ نیمه‌رسانای نوع p..... ۱۳

۲-۵ کاربردهای نیمه‌رساناها ۱۴

۲-۵-۱ ساخت ترانزیستورها ۱۴

۲-۵-۲ ساخت مدارهای جمعیIC.....۱۴

۲-۵-۳ ساخت دیود ۱۴

۲-۵-۴ ساخت سنسور نوری LED ۱۴

۲-۶ کشف خواص مغناطیسی جدید در نیمه‌رساناها.....۱۴

فصل سوم اثر جرم موثر وابسته به مکان بر انرژی بستگی در یک جعبه‌ی کوانتومی

۳-۱ مقدمه ۱۷

۳-۲ جرم موثر وابسته به مکان در جعبه‌ی کوانتومی ۱۸

عنوان **صفحه**

۳-۳ انرژی بستگی جعبه‌ی کوانتومی..... ۱۹

۳-۴ نتایج و نمودارها..... ۲۲

فصل چهارم اثر جرم موثر وابسته به مکان بر انرژی بستگی یک نقطه‌ی کوانتومی کروی

۴-۱ مقدمه..... ۲۷

۴-۲ هامیلتونی نقطه‌ی کوانتومی..... ۲۷

۴-۳ جرم موثر وابسته به مکان نقطه‌ی کوانتومی کروی ۲۸

۴-۴ سد پتانسیل نامتناهی ۲۹

۴-۵ سد پتانسیل متناهی..... ۳۱

۴-۶ محاسبه‌ی انرژی حالت پایه..... ۳۲

۴-۷ نتایج و نمودارها ۳۳

فصل پنجم انرژی بستگی سیم کوانتومی شیاری با تقریب جرم موثر

۵-۱ مقدمه..... ۳۷

۵-۲ هامیلتونی سیم کوانتومی شیاری ۳۸

عنوان **صفحه**

۵-۳ انرژی بستگی سیم کوانتومی شیاری..... ۴۲

۵-۴ نتایج و نمودارها ۴۶

فصل ششم انرژی بستگی نقطه‌ی کوانتومی استوانه‌ای با تقریب جرم موثر

۶-۱ مقدمه..... ۵۰

۶-۲ تابع موج و طیف انرژی ۵۱

۶-۳ انرژی بستگی نقطه‌ی کوانتومی استوانه‌ای ۵۴

۶-۴ نتایج و نمودارها..... ۵۵

فهرست اشکال

عنوان **صفحه**

شکل۳-۱ تغییرات انرژی بستگی بر حسب طول جعبه در پتانسیل متناهی با غلظت x=۰/۳ با درنظر گرفتن جرم موثر ثابت وجرم موثر وابسته به مکان ۲۳

شکل۳-۲ تغییرات انرژی بستگی بر حسب طول جعبه در پتانسیل متناهی با غلظت x=۰/۴ با دو جرم ثابت و جرم موثر وابسته به مکان.....۲۳

شکل۳-۳ تغییرات انرژی بستگی بر حسب طول جعبه در پتانسیل نامتناهی با غلظت x=۰/۳ با دو جرم موثر ثابت و جرم موثر وابسته به مکان.....۲۴

شکل۴-۱ تغییرات انرژی بستگی بر حسب شعاع نقطه‌ی کوانتومی با جرم ثابت و جرم‌های متغیر وابسته به مکان در پتانسیل نامتناهی و غلظت x=۰/۲ و ثابت دی‌الکتریک $\varepsilon = ۱۳/۱۳\,\varepsilon_0$.....۳۳

شکل۴-۲ تغییرات انرژی بستگی بر حسب شعاع نقطه با جرم موثر ثابت و جرم‌های موثر وابسته به مکان، با پتانسیل متناهی و ثابت دی‌الکتریک $\varepsilon = ۱۳/۱۳\,\varepsilon_0$ و غلظت ناخالصی x=۰/۲ ..... ۳۳

شکل۵-۱ تغییرات انرژی بستگی به‌صورت تابعی از عرض سیم در دو مدل نوار رسانش سهموی و غیر سهموی $\eta = ۰/۴$ و $b = ۴$ nm و $\theta = ۵۴/۷۵$ ۴۴

شکل۵-۲ تغییرات انرژی بستگی بر حسب عرض سیم، در دو مدل نوار رسانش سهموی

عنوان **صفحه**

و غیر سهموی، با $b = ۴$ nm و $\theta = ۵۴/۷۵$ و $\eta = ۰/۱$ ۴۵

شکل۵-۳ تغییرات انرژی بستگی بر حسب غلظت η با$b = ۳$nm و$b = ۸$nmدر دو مدل نوار رسانش سهموی و غیر سهموی..... ۴۵

شکل۶-۱ تغییرات انرژی بستگی بر حسب شعاع نقطه با پتانسیل نامتناهی و ناخالصی در مکان‌های ۱و۰/۵و ۰= r_0/R ۵۴

شکل۶-۲ نمودار تغییرات انرژی بستگی بر حسب شعاع نقطه‌ی کوانتومی استوانه‌ایبا پتانسیل متناهی و غلظت ناخالصی $\eta = ۰/۳$ ۵۴

شکل۶-۳ تغییرات انرژی بستگی بر حسب شعاع نقطه‌ی کوانتومی استوانه‌ای، با پتانسیل متناهی و با ناخالصی در مکان‌های ۱و۰/۵ و ۰= r_0/Rو غلظت $\eta = ۰/۳$ ۵۴

فهرست جداول

صفحه

جدول۵-۱ تغییرات جرم مؤثر با انرژی در نوار رسانش سهموی و غیر سهموی.....۴۲

فصل اول

آشنایی با نانو ساختارها

۱-۱ مقدمه

نانو[1] یک کلمه یونانی به معنای کوچک است و برای تعیین مقدار یک میلیاردیم یک یکای کمیت استفاده می‌شود. چون یک اتم تقریبا ۱۰ نانومتر است، این اصطلاح برای مطالعات عمومی روی ذرات اتمی ومولکولی به‌کار برده می‌شود.

برای اولین بار ریچارد فاینمن[2] برنده جایزه نوبل فیزیک، علم نانو را در یک سخنرانی تکان دهنده به نام " در پایین فضاهای زیادی وجود دارد " ، مطرح کرد. فاینمن اصرار داشت که دانشمندان ساخت وسایلی را که برای کار در مقیاس اتمی لازم است، شروع کنند. این موضوع مسکوت ماند تا اینکه اریک درکسلر[3] دانشجوی تحصیلات تکمیلی، ندای فاینمن را شنید و یک قالب کاری برای مطالعه وسایلی که توانایی حرکت دادن اشیاء مولکولی و مکان آنها را با دقت اتمی دارند، ایجاد کرد و بدین ترتیب اولین جرقه فناوری نانو در تاریخ زده شد. وی این واژه را به شکل عمیق‌تری در رساله دکترای خود مورد بررسی قرار داده و بعدها آنرا در کتابی تحت عنوان «نانو سیستم ها ماشین های مولکولی چگونگی ساخت و محاسبه آنها» توسعه داد[۱].

---

[1] Nano
[2] Richard Feynman
[3] Errick Derkessler

تفاوت اصلی فناوری نانو با فناوریهای دیگر در مقیاس مواد و ساختارهایی است که در این فناوری مورد استفاده قرار می‌گیرد. البته تنها کوچک بودن اندازه مد نظر نیست، بلکه زمانی که اندازه مواد در این مقیاس قرار می‌گیرد، خصوصیات ذاتی آنها از جمله رنگ، استحکام، مقاومت، خوردگی و ... تغییر می‌یابد. در حقیقت اگر بخواهیم تفاوت این فناوری را با فناوریهای دیگر به‌صورت قابل ارزیابی بیان نماییم، می‌توانیم وجود " عناصر پایه " را به عنوان یک معیار ذکر کنیم. عناصر پایه در حقیقت همان عناصر نانو مقیاسی هستند که خواص آنها در حالت نانو مقیاس با خواصشان در مقیاس بزرگتر فرق می‌کند.

۱-۲ عناصر پایه در فناوری نانو

اولین و مهمترین عنصر، نانو ذره است. منظور از نانو ذره، همان‌گونه که از نام آن مشخص است، ذراتی با ابعاد نانومتری در سه بعد می‌باشد. نانوذرات می‌توانند از مواد مختلفی تشکیل شوند، مانند نانوذرات فلزی، سرامیکی ...[۲]

دومین عنصر پایه نانو کپسول است. همان‌طوری که از اسم آن مشخص است، کپسول‌هایی هستند که قطر نانومتری دارند و می‌توان مواد مورد نظر را در آنها قرار داد و کپسوله کرد. سالهاست که نانوکپسول‌ها در طبیعت تولید می‌شوند. مولکولهایی موسوم به فسفولیپیدها که یک سر آنها آبگریز و سر دیگر آنها آبدوست است. وقتی در محیط آبی قرار می‌گیرند، خود به‌خود کپسولهایی را تشکیل می‌دهند که قسمتهای آبگریز مولکول، درون آنها واقع می‌شود واز تماس با آب محافظت می‌شود، حالت برعکس نیز قابل تصور است.

عنصر پایه بعدی نانو لوله کربن است. این عنصر پایه در سال ۱۹۹۱ در شرکت NEC کشف شد ودر حقیقت لوله‌هایی از جنس گرافیت می‌باشند. اگر صفحات گرافیت را پیچیده و به شکل لوله درآوریم، به نانولوله‌های کربن می‌رسیم. این نانولوله‌ها دارای اشکال مختلفی هستند و می‌توانند تک دیواره یا چند دیواره باشند. این لوله‌ها خواص بسیار جالبی دارند که منجر به ایجاد کاربردهای جالب توجهی از آنها می‌شود[۳].

در حقیقت کاربرد فناوری نانو از کاربرد عناصر پایه سرچشمه می‌گیرد. هر کدام از این عناصر پایه، ویژگی خاصی دارند که استفاده از آن‌ها در زمینه‌های مختلف موجب ایجاد خواص جالبی می‌گردد، مثلا می‌توان به داروسازی هدفمند و ساده، شناسایی زود هنگام و بی‌ضرر سلول‌های سرطانی و تجزیه آلاینده‌های محیط زیست اشاره کرد.

همچنین نانولوله‌های کربن دارای کاربردهای متنوعی می‌باشند که موارد زیر را می‌توان ذکر کرد[۴]:

الف) تصویر برداری زیستی دقیق

ب) شناسایی و جداسازی کاملا اختصاصی DNA

ج) ژن درمانی که از طریق انتقال ژن به درون سلول توسط نانولوله‌ها صورت می‌پذیرد

اینها تنها مواردی از کاربردهای بسیار وسیعی هستند که برای عناصر پایه قابل تصور می باشند.

۱–۳ گروه بندی مواد نانو

مواد نانو به سه گروه یک، دو و سه بعدی تقسیم بندی شده‌اند:

۱–۳–۱ نانومواد یک بعدی

این مواد شامل فیلم‌های بسیار نازک است و در ساخت ابزار الکتریکی و شیمیایی و مدارهای الکترونیکی ساده و مرکب کاربرد وسیعی دارند. لایه‌ها نیز در این گروه قرار می‌گیرند و یک بعدی هستند و در دو بعد دیگر توسعه می‌یابند مانند فیلم‌های نازک و پوششها. امروزه کنترل و ضخامت لایه‌ها تا اندازه یک اتم صورت می‌پذیرد و ساختار این لایه‌ها حتی در موارد بسیار پیچیده شناخته شده است. تک لایه‌ها که قطر آنها به اندازه یک مولکول و یا یک اتم است، در شیمی کاربرد وسیعی دارد. یکی از کاربردهای این لایه‌ها ساخت سطوحی است که خود را بازسازی کنند. برخی از قطعات کامپیوتر نیز در این گروه هستند.

۱–۳–۲ نانومواد دوبعدی

این گروه شامل موادی است که در دو بعد هستند و در یک بعد دیگر گسترش می‌یابند و شامل لوله-ها و سیم‌ها می‌شوند. به تازگی کاربرد نانومواد دو بعدی در تولید سیم و لوله‌ها افزایش یافته و توجه دانشمندان را به دلیل خواص ویژه‌ی مکانیکی و الکترونیکی به خود جلب کرده است. در زیر به چند نمونه ساخته شده در این گروه اشاره می‌شود :

الف) نانو لوله‌های کربن CNTS

ساختار مکانیکی این مواد مانند الماس بسیار سخت است، اما در محورهای خود نرم و تاشو هستند. همچنین این مواد رسانای الکتریکی بسیار عالی هستند. نانولوله‌های کربن مانند مولیبیدیم‌دی‌سولفات پس از لایه‌ها ساخته شده‌اند. این مواد دارای ویژگی‌های منحصر به فردی همچون مقاومت در برابر

ضربات امواج شوکها، واکنشهای کاتالیزوری و ظرفیت بالا در ذخیره هیدروژن و لیتیوم هستند. نانولوله‌های‌کربن با مواد پایه اکسیدی مانند اکسید تیتانیم، برای کاربردهای کاتالیزوری، کاتالیزورهای نوری و ذخیره انرژی به صورت تجاری، به بازار عرضه شده است[۵].

ب) نانو سیم‌ها

این سیم‌ها از قرار گرفتن ذرات بسیار ریز از مواد مختلف به صورت خطی ساخته می‌شوند. نانوسیمهای نیمه هادی از سیلیکون، نیترات گالیم و فسفات ایندیم ساخته شده و دارای قابلیت‌های بسیار خوب نوری، الکتریکی و مغناطیسی است و نوع سیلیکونی این سیم‌ها می‌تواند به‌خوبی در یک شعاع بسیار کوچک بدون آسیب‌رسانی به ساختار سیم خم شود. این سیم‌ها برای ثبت مغناطیسی اطلاعات در حافظه کامپیوترها، وسایل نانوالکترونیکی و نوری و اتصال مکانیکی ذرات کوانتومی به‌کار می‌روند[۵].

ج) بیوپلیمرها

انواع گوناگون بیوپلیمرها مانند مولکولهای DNA درخود سازی نانوسیم‌ها و در تولید مواد بسیار پیچیده به‌کار می‌روند. همچنین این مواد دارای قابلیتهای اتصال نانو و بیوتکنولوژی برای ساخت سنسور و موتورهای کوچک هستند.

۱-۳-۳ نانومواد سه بعدی

در این گروه، مواد دارای قطری کمتر از ۱۰۰ نانومتر هستند. نانومواد سه بعدی در اندازه‌های بزرگتر، ساختار متفاوتی داشته و طیف وسیعی از مواد را در جهان تشکیل می‌دهند و صدها سال است که به صورت طبیعی در زمین یافت می‌شوند.

مواد تولید شده از عوامل فتوشیمیایی، فعالیت‌های آتشفشان‌ها، مواد محترق از پختن غذا، مواد متصاعد از احتراق سوخت ماشینها و مواد آلاینده تولید شده در صنایع جزو این گروه از مواد هستند. این مواد به علت رفتار متفاوت در واکنشهای شیمیایی و بصری بسیار مورد توجه قرار دارند. برای مثال اکسید تیتانیوم و روی که به صورت شفاف و فرانما، جاذب و منعکس کننده نور ماورای بنفش در صفحات خورشیدی به‌کار می‌روند، در ابعاد نانو هستند. این مواد کاربردهای بسیار ویژه‌ای در ساخت رنگها و داروها (به ویژه داروهایی که تجویز آنها فقط برای یک عضو مشخص بدن و بدون تاثیر بر سایر اعضاست) دارند. مواد نانوی سه بعدی شامل مواد بسیاری می‌شود که به چند نمونه آنها اشاره می‌کنیم:

الف) کربن ۶۰[1]

در اوایل سال ۱۹۸۰ گروه جدیدی از ترکیبات کربنی به نام کربن ۶۰ ساخته شد. کربن ۶۰ کروی شکل، به قطر یک نانومتر و شامل ۶۰ اتم کربن است که به علت شباهت ساختار مولکولی آن با گنبدهای کروی ساخته شده توسط مهندس معماری به‌نام بوخ مینستر فولر[2]، به‌نام «فوله رنس» نامگذاری شد. در سال ۱۹۹۰ روشهای ساخت کوانتومهای کربن ۶۰ با مقاومت حرارتی میله‌های

[1] Fullerener
[2] Bukh Minsther Fuller