

مدل های ظرفیت کوانتم و آماری مواد معلق در نانو اسکرول گرافن

به عنوان یکدسته از مواد شبه یک بعدی، نانو اسکرول گرافن توجه محققان را به خود جلب کرده است زیرا دارای خواص الکترونیکی منحصر به فرد می باشد از جمله قابلیت تحرک عامل. به علاوه، پیکربندی ها برای گرافن نشان دهنده پایداری بیشتر در خصوص انرژی برخلاف پیکربندی های صفحه ای نظیر نانو ریبون، نانو لوله و کرافن دو لایه ای است. با استفاده از رویکرد تحلیلی، این مقاله مدل تراکم حالت، غلظت حامل و ظرفیت کوانتم را برای نانواسکرول را ارایه می کند. مدل داس برای محاسبه غلظت حامل و مدل ظرفیت کوانتم استفاده شد. به علاوه، ظرفیت کوانتم و غلظت حامل برای رژیم های انحطاط و غیر انحطاط مدل سازی شده و اثر پارامتر های ساختاری و عدد کایرال بر روی تراکم حالت و غلظت حامل بررسی شد. سپس، اثر دما بر روی ظرفیت کوانتم نیز مطالعه شد

1- مقدمه

این مسئله به خوبی شناخته شده است که مواد مبتنی بر گرافن انتقال الکتریکی بهتری را دارند. تولید ابزار های الکترونیکی در ابعاد بسیار کوچک کم تر از 100 نانومتر به دلیل پیشرفت های مدرن در ساخت رسانا های اندازه اتم امکان پذیر بوده است. تا کنون، اکثربیت مطالعات انجام شده بر CNT و GNR تاکید داشته اند. این مسئله مشخص است که نانواسکرول های گرافن در واقع نانوریبون های گرافن کوچکی هستند که به صورت مارپیچی درآمده اند(3-4). مکانیسم های تشکیل CNG به شدت مشابه با مکانیسم های مربوط به گرافن بزرگ و نانو اسکرول های نیتریدی می باشند. سطوح دارای هم پوشانی لایه ها در GNS ها قادر به بهبود پایداری ساختاری می باشند. نانواسکرول های گرافن مواد مناسبی برای نسل آینده ابزار های نانو الکترونیکی نظیر کانال و ارتباطات درونی در EET و MOSFET(6-7) می باشند. ضمن تشریح ساختار نانو اسکرول ها، میکروسکوپ الکترونیکی و انکسار را می توان به صورت رویکرد های بسیار کارامد در نظر گرفت(8-9). CNG ها را می توان به عنوان حامل های انتقال الکترونی مورد استفاده قرار داد. امروزه، نانوکربن های شبه تک بعدی یعنی نانول ها، نانو واير ها، نانو بلت ها و نانواسکرول ها با استفاده از روش های هیدروترمال یا بازجذب بخار شمیایی پلاسما سنتز شده اند.

استفاده از محلول الكل ایزوتروب برای تا کردن گرافن تک لایه ای بر روی سوبسترا های سیلیسیم اکسید/سیلیسیم به عنوان روش ساده برای ساخت نانو اسکرول های کربن با کیفیت در نظر گرفته شده است. به علاوه این روش قادر به رنگ امیزی با تراکم جریان $5 \times 10^7 \text{ A/cm}^2$ است. از این روی یک کاندید مناسب برای معابر نانوساختار است. س دیگر دسته مهم از نانوساختار هاف نانوله های نیترید برون و نانو اسکرول های نیترید برون می باشند. اگرچه تعداد زیادی از کار های ازمایشی و نظری برای BNNT کزارش شده است، BNS تا کتون مورد بررسی قرار نگرفته است. در اصل، اخیرا روش های ازمایشی برای تولید CNS هایی استفاده می شود. به طور مشابه با CNS ها، تشکیل BNS با افزایش انرژی الاستیگ ناشی از خمش لایه BN و کاهش انرژی ازاد تولید شده با انرژی وان در والسی مناطق هم پوشانی لایه همراه است. این نشان می دهد که اثرات متقابل وان در والسی برای BNS مناسب تر از مورد CNS است. شکل 1 یک نانو اسکرول گرافن را با طول L نشان می دهد

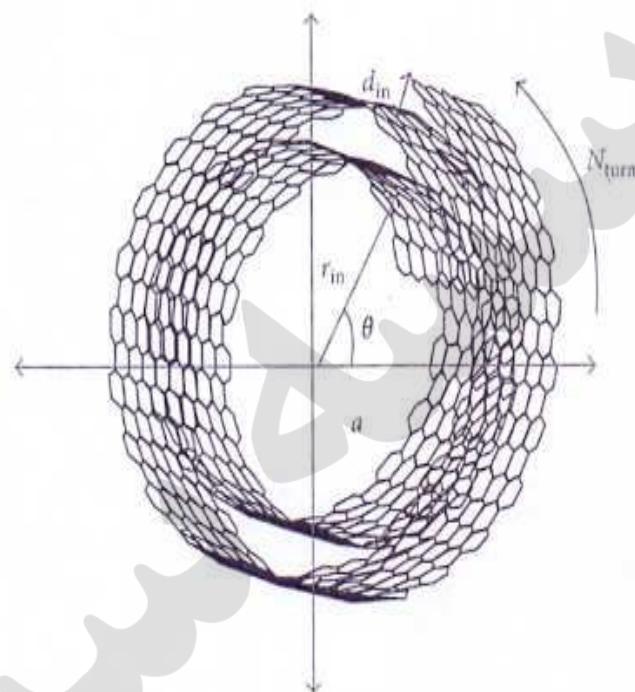
$$L = \int_a^b \sqrt{r^2 + \left(\frac{dr}{d\theta}\right)^2} d\theta, \quad (1)$$

که تنا زاویه قائمه از A تا B می باشد و $r = a + b\theta$ می باشد. با استفاده از تحلیل پیوندی نزدیک ترین همسایه، رابطه انتشار انرژی و رسانش نانو اسکرول گرافن را می توان به دستاورد. وابستگی باند گپ انرژی بر روی ساختار هندسی و تعداد کلاریته تایید شده است. از این روی باند کپ یا فاصله باند قابل کنترل در GNS به عنوان مهم ترین موضوع مطالعاتی اینده است. تحقیقات فعلی به مدل سازی نراکم حالت، علظت حامل و ظرفیت کوانتمو بر اساس انتشار انرژی سهمی می پردازد. هم چنین توزیع ماسکسول بولتزمن نیز در نظر گرفته شده است. به علاوه وابستگی آماری حامل به طول بردار چیزال و اسپیرال نشان داده شده است و اثرات پدیده اکلترو اکتواسیون بر روی مدل ظرفیت کوانتمو در نظر گرفته شده است.

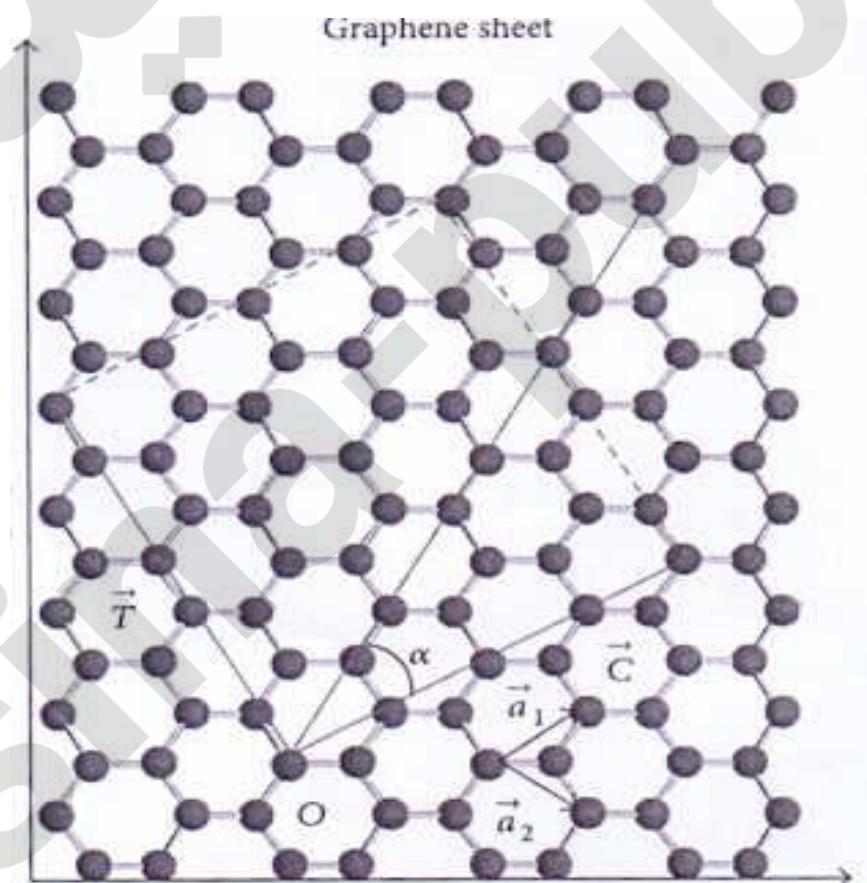
2- مدل تحلیلی خازن کوانتمو برای ZNGS

به عنوان پارامتر های الکترونیکی اصلی، علظت حامل و ظرفیت کوانتمو در دست یابی به اطلاعات فیزیکی ضمن تایید ابزار های الکترونیک نظیر ویژگی های FET و MOSEFT کمک می کند. مطالعات مختلف در خصوص

موضوع خواص گرافن نظیر آماره های حامل، رسانایی، تحرک و ظرفیت از طریق شبیه سازی پویایی دینامیک صورت گرفته است.



شکل ۱: مدل شماتیک نانوسکرول گرافن



شکل 2: نمایی از صفحه گرافن تاخورده در CNS

شبکه گرافن در شکل 2 نشان دهنده روش لایه گرافن با تشکیل GNS می باشند که در آن الفا نشان دهنده زاویه اسکرول مرتبط با محور است. بردار کایرال تعیین کننده جهت $\vec{c} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$ می باشد که $a_1(\sqrt{3}a_{cc}((\sqrt{3}/2)\hat{i}+0.5\hat{j}))$, $a_2(\sqrt{3}a_{cc}((\sqrt{3}/2)\hat{i}-0.5\hat{j}))$ و اعداد صحیح N و M تعداد مراحل در امتداد دو بردار می باشند به این ترتیب \vec{c} در امتداد محور ایکس قرار داشته و یک نانواسکرول زیگزاگ در صورتی وجود دارد که در امتداد محور نانواسکرول باشد. از این روی شرایط مرزی $\vec{k} \cdot \vec{c} = L$ به صورت زیر تعیین می شود

$$E_Z(\vec{k}) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{3k_t a_{cc}}{2}\right) \cos\left(\frac{L}{2n}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{L}{2n}\right)}, \quad (2)$$

که K را می توان به صورت $\vec{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j}$, بدست اورد و k_t به دامنه در امتداد محور نانو اسکرول و دامنه kt

$a_{cc} = 1.42 \text{ \AA}$ فاصله پیوندی کربن-کربن در طول اتم می باشد و $(-2\pi/3a_{cc} \leq k_t \leq 2\pi/3a_{cc})$,

کربن-کربن می باشد و به صورت انرژی هم پوشانی C-C نزدیک ترین همسایه است. و N نشان دهنده عدد

کایرال است. شکل 3 ساختار باند انرژی ZGNS $E_Z(\vec{k})$ کایرال می باشد. از

این روی در شروع برای مدل سازی ظرفیت کوانتوم، ما با مدل سازی DOS شروع می کنیم:

$$DOS = \frac{\Delta n_i}{L \Delta E}, \quad (3)$$

$$= \pm \frac{2m^*(E - E_c)^{-1/2}}{3\hbar^2 \pi \sqrt{t}},$$

$$m^* = \frac{4n^2 \hbar^2}{9a_{cc}^2 t (L^2 + 4n^2)}, \quad (4)$$

که m می تواند به صورت وزن الکترونی کارامد در ZGNS باشد و به صورت انرژی هم پوشانی C-C نزدیک ترین

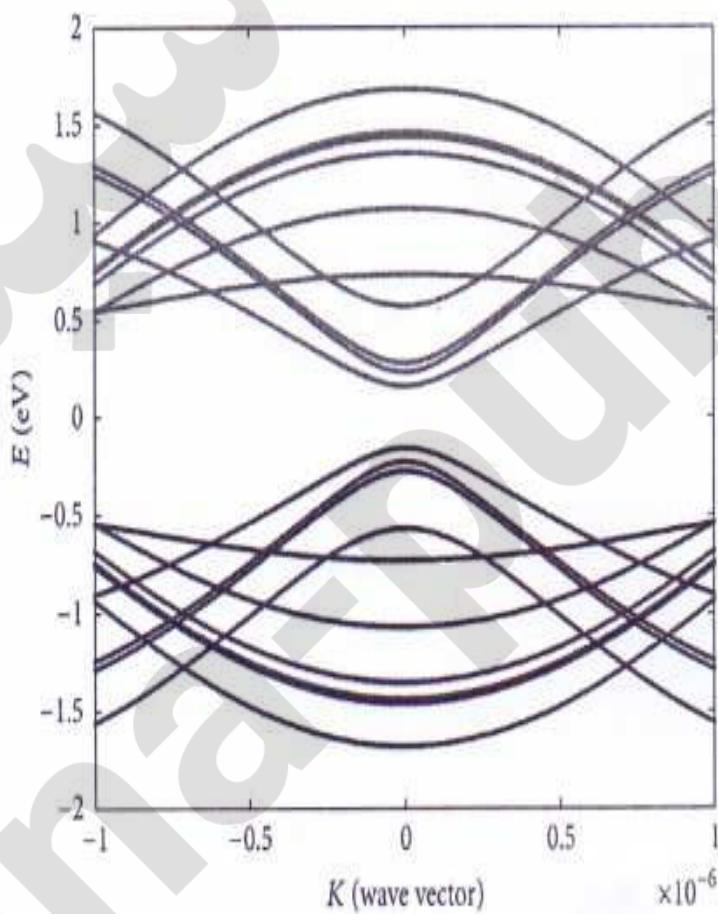
همسایه است و EC انرژی باند رسانش به صورت $E_c = 0.5t + (3L^2)/(2n^2)$ باشد. در عمل، با استفاده از

تابع توزیع فرمی دیراک در برابر انرژی، مجموع تمرکز حامل در باند نیاز است.

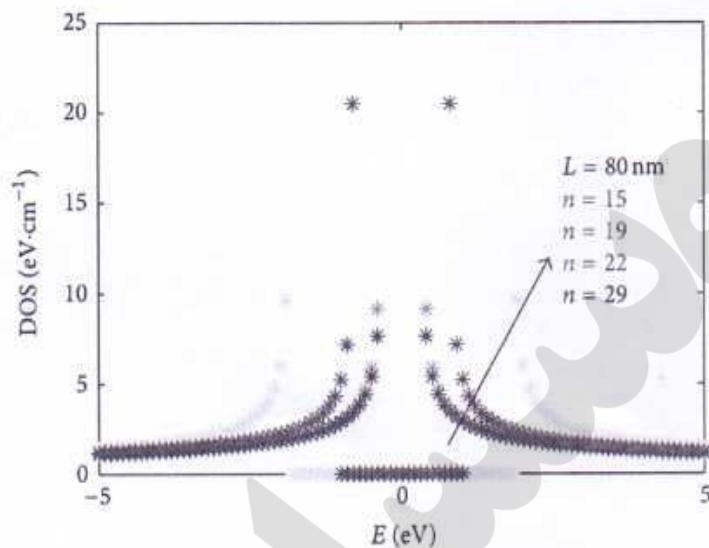
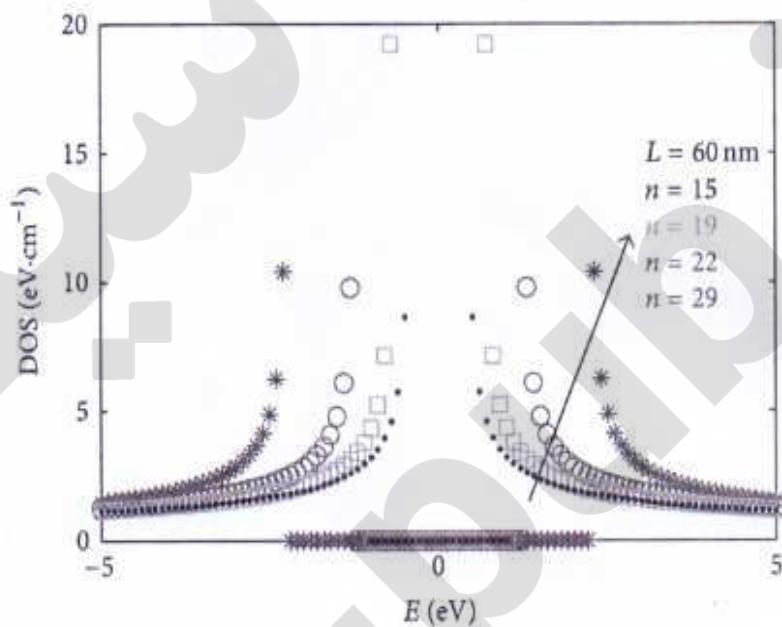
$$n_i = \int \text{DoS}(E) f(E) dE, \quad (5)$$

که $f(E) = 1/(1 + e^{(E-E_F)/K_B T})$ به صورت تابع توزیع فرمی دیراک است که احتمال اشغال به صورت حالت را در سطح انرژی می‌دهد. در این تابع E_F به صورت انرژی فرمی است و K_B نشان دهنده ثابت بولتزمن بوده و T دمای مطلق است. با استفاده از DOS ارایه شده با $x = (E - E_c)/K_B T$ ، غلظت حامل به صورت زیر است

$$n_i = \frac{2m^*}{3\hbar^2\pi} \sqrt{\frac{K_B T}{t}} \int_0^{+\infty} \frac{(x)^{-1/2}}{1 + \exp(x - \eta_F)} dx. \quad (6)$$



شکل 3: ساختار باند انرژی در برابر ZNGS نزدیک به نقطه دیراک

شکل ۴: DOS در برابر E شکل ۵: DOS در برابر E برای مقادیر کایرال

با حل انتگرال داریم

$$n_i = \frac{2m^* K_B T}{3t\pi\hbar^2} F_0(\eta_F) + \sqrt{\frac{2m^* K_B T k^2}{9t\pi\hbar^2}} F_{(-1/2)}(\eta_F), \quad (7)$$

که $F_{(-1/2)}(\eta_F)$ و $F_0(\eta_F)$ به ترتیب انتگرال های فرمی- دیارک با مرتبه 0 و 1- است. به علاوه با استفاده از

معادله انتشار انرژی K به صورت زیر بدست می اید

$$k = \pm \frac{1}{3} \sqrt{\frac{m^*(E - E_c)}{\hbar^2 t}}. \quad (8)$$

غلظت حامل به صورت تابعی از n برای مقادیر متنوع L می باشد و در شکل 6 نشان داده شده است و این نشان می دهد که با افزایش L ، افزایش n رخ خواهد داد. وابستگی باند گپ انرژی بر روی ساختار هندسی و تعداد کلاریته تایید شده است. از این روی باند کپ یا فاصله باند قابل کنترل در GNS به عنوان مهم ترین موضوع مطالعاتی اینده است. تحقیقات فعلی به مدل سازی نراکم حالت، غلظت حامل و ظرفیت کوانتوم بر اساس انتشار انرژی سهمی می پردازد. هم چنین توزیع ماکسول بولتزمن نیز در نظر گرفته شده است. به علاوه وابستگی آماری حامل به طول بردار چیزال و اسپیرال نشان داده شده است و اثرات پدیده الکترو اکتواسیون بر روی مدل ظرفیت کوانتوم در نظر گرفته شده است. با اجرای این حد ها، غلظت حامل در رژیم های مختلف می توان داشت

$$\begin{aligned} n_{\text{edge}} &= \frac{2\eta_F m^* K_B T}{3t\pi\hbar^2} + \frac{k}{t\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\eta_F m^* K_B T}{3}}, \\ n_{\text{non-edge}} &= \frac{2m^* K_B T}{3t\pi\hbar^2} \exp(\eta_F) + \sqrt{\frac{2m^* K_B T k^2}{9t\pi\hbar^2} \exp(\eta_F)}. \end{aligned} \quad (9)$$

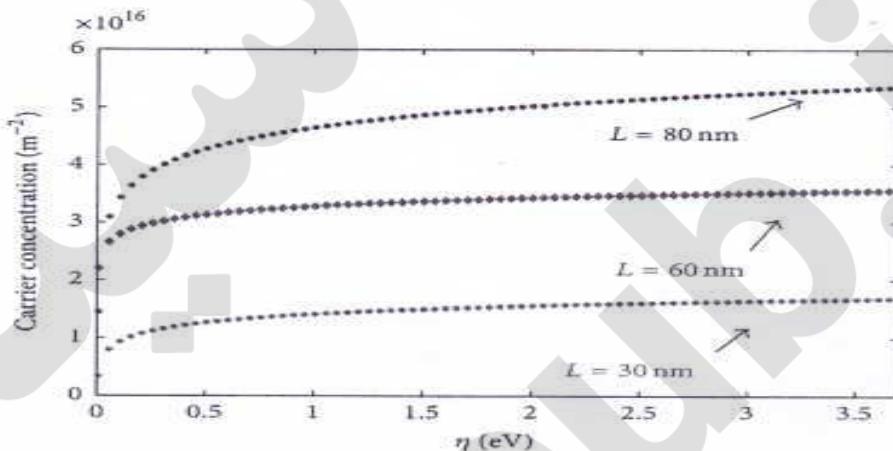
شکل 7 غلظت حامل را با توجه به n برای رژیم های منحص و غیر منحص نشان می دهد. که m می تواند به صورت وزن الکترونی کارامد در ZGNS باشد و به صورت انرژی هم پوشانی C-C نزدیک ترین همسایه است و EC انرژی باند رسانش به صورت $E_c = 0.5t + (3L^2)/(2n^2)$ باشد. در عمل، با استفاده از تابع توزیع فرمی دیراک در برابر انرژی، مجموع تمرکز حامل در باند نیاز است. معادله کلی برای ظرفیت کوانتوم یک بعدی به صورت زیر بدست می اید

$$C_q = \frac{\partial Q}{\partial V} = \frac{e^2 \partial n_i}{\partial E} = \frac{e^2}{K_B T} \frac{\partial n_i}{\partial x}, \quad (10)$$

که n_i غلظت حامل را نشان داده و V بیانگر ولتاژ اعمال شده به CNS می باشد و از این روی E به صورت بزرگی بار الکترون است واز این روی می توان ظرفیت کوانتوم را به صورت زیر ساده سازی کرد

$$C_q = \frac{2e^2 m^*}{3\pi\hbar^2} \sqrt{\frac{1}{t \cdot K_B T}} \left(\frac{(x)^{-1/2}}{1 + \exp(x - \eta_F)} \right). \quad (11)$$

این حالت ها در دمای اتاق بررسی شده اند. و بخش تمایی برای کنار گذاشتن 1 از مخرج لازم است.



شکل 6: غلظت حامل با توجه به n برای مقادیر مختلف L

از این روی، ظرفیت کوانتوم در رژیم غیر منحاط را می توان به صورت زیر بدست اورد

$$C_{q,d} = \frac{2e^2 m^*}{3\pi\hbar^2} \cdot (x)^{-1/2} \sqrt{\frac{1}{t \cdot K_B T}} \exp(x - \eta), \quad (12)$$

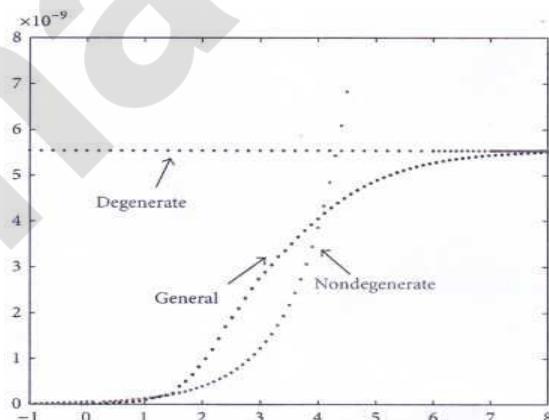
از سوی دیگر، بخش نمایی در واقع در رژیم منحاط به دلیل احتمال پر کردن جالت ها در سطح فرمی که تقریبا 1 است استفاده می شود و این نشان می دهد که هیچ حالت قابل قبولی درون باند برای وجود ندارد. در نتیجه، ظرفیت درون رژیم منحاط می تواند به صورت زیر بدست بیاید

$$C_{q_s} = \frac{2e^2 m^*}{3\pi\hbar^2} \sqrt{\frac{1}{t \cdot K_B T}} \cdot (x)^{-1/2}. \quad (13)$$

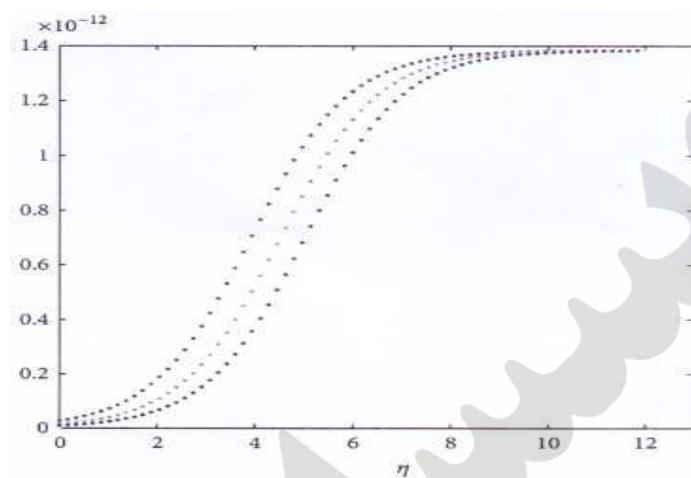
ظرفیت کوانتوم در برابر N برای حالت کلی و رژیم های منحطر و غیر منحطر شکل 8 نشان داده شده اند و این نشان می دهد که رژیم غیر منحطر تحت تاثیر تغییرات N نیست و در حالی که تمایل دارد تا یک مقدار ثابت را داشته باشد. بر عکس این افزایش نمایی را در رژیم غیر منحطر با تغییر N نشان می دهد. ظرفیت کوانتوم به طور کلی نشان دهنده شدت بیش از 1.5 است. غالبیت کوانتوم را می توان در سطوح غلظت متفاوت توجیه کرد. در بخش اخیر، اثر دما بر روی ظرفیت کوانتوم بررسی شده و از این روی ظرفیت کوانتوم با افزایش دما در N تعیین شده است. از این روی افزایش زیادی در غلظت الکترون برای افزایش دما وجود دارد. در رژیم غیر منحطر، ظرفیت کوانتوم تحت تاثیر دما قرار دارد. شکل 9 وابستگی ظرفیت کوانتوم را به حالت و تغییرات دمایی N نشان می دهد.

نتیجه گیری

می توان گفت که نانوسکرول گرافن با خواص انتشار میدانی و ریخت شناسی نواری را می توان در نانو الکترونیک CNS به عنوان حامل انتقال الکترون مورد استقاده قرار داد. مدل های تحلیلی مختلف برای خواص الکترونی ارایه شده است نظیر غلظت حامل و تراکم حالت. به علاوه تحقیقات نشان داده است که عدد کایرال و پارامتر های ساختاری نانو اسکرول نظیر طول نانو اسکرول بر تراکم وضعیت و غلظت حامل اثر دارد. این نتایج با نتایج مربوط به نانولوله کربن و گرافن هم خوانی دارد. اثرات دمایی بر روی خازن کوانتوم نشان می دهد که ظرفیت کوانتوم سریعا به مقدار N پایین می رسد.



شکل 8: ظرفیت کوانتم برای هر دو رژیم منحظر و غیر منحظر بر اساس ظرفیت کوانتم



شکل 9: اثر دما بر روی ظرفیت کوانتم در حالت کلی در برابر N برای ZNGS

