

مدل های ظرفیت کوانتوم و آماری مواد معلق در نانو اسکروول گرافن

به عنوان یکدسته از مواد شبه یک بعدی، نانو اسکروول 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، پیکر بندی ها برای گرافن نشان دهنده پایداری بیشتر در خصوص انرژی بر خلاف پیکر بندی های صفحه ای نظیر نانو ریبون، نانو لوله و گرافن دو لایه ای است. با استفاده از رویکرد تحلیلی، این مقاله مدل تراکم حالت، غلظت حامل و ظرفیت کوانتوم را برای نانواسکروول را ارائه می کند. مدل داس برای محاسبه غلظت حامل و مدل ظرفیت کوانتوم استفاده شد. به علاوه، ظرفیت کوانتوم 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 کوانتوم 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، اکثریت مطالعات انجام شده بر CNT و GNR تاکید داشته اند. این مسئله مشخص است که نانواسکروول های گرافن در واقع نانوریبون های گرافن کوچکی هستند که به صورت ماریچی درآمده اند (3-4). مکانیسم های تشکیل CNG به شدت مشابه با مکانیسم های مربوط به گرافن بزرگ و نانو اسکروول های نیتريدی می باشند. سطوح دارای هم پوشانی لایه ها در GNS ها قادر به بهبود پایداری ساختاری می باشند. نانواسکروول 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 اسکروول ها، میکروسکوپ الکترونیکی و انکسار را می توان به صورت رویکرد های بسیار کارآمد 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 نانولوله ها، نانو وایر ها، نانو بلت ها و نانواسکروول ها با استفاده از روش های هیدروترمال یا بازجذب بخار شیمیایی پلاسما سنتز شده اند.

استفاده از محلول الکل ایزوتروپ برای تا کردن گرافن تک لایه ای بر روی سوبسترا های سیلیسیم اکسید/ سیلیسیم به عنوان روش ساده برای ساخت نانو اسکروول های کربن با کیفیت در نظر گرفته شده است. به علاوه این روش قادر به رنگ آمیزی با تراکم جریان $5 \times 10^7 \text{ A/cm}^2$ است. از این روی یک کاندید مناسب برای معابر نانساختار است. س دیگر دسته مهم از نانساتار هاف نانوله های نیتريد برون و نانو اسکروول های نیتريد برون می باشند. اگرچه تعداد زیادی از کار های آزمایشی و نظری برای BNNT گزارش شده است، BNS تا کتون مورد بررسی قرار نگرفته است. در اصل، اخیرا روش های آزمایشی 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 آزاد 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 اسکروول گرافن را با طول L نشان می دهد

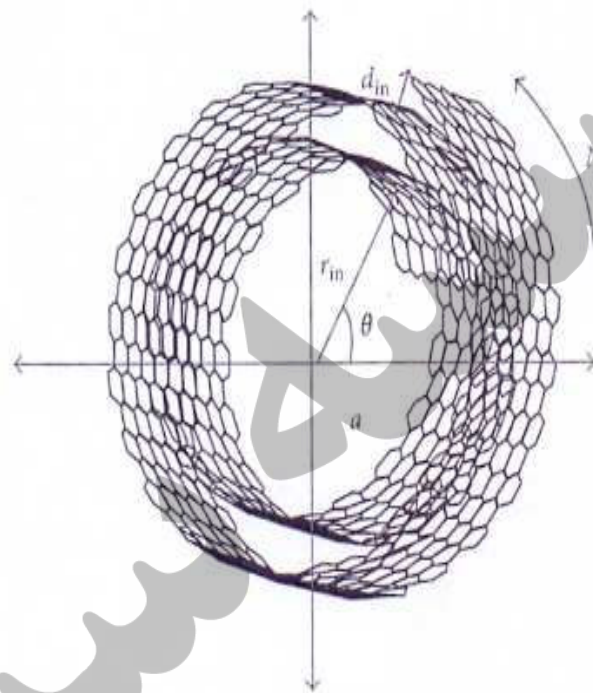
$$L = \int_a^b \sqrt{r^2 + \left(\frac{dr}{d\theta}\right)^2} d\theta, \quad (1)$$

که تتا 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 اسکروول 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 آینده 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 چیرال و اسپیرال نشان داده شده است و اثرات پدیده اکترو اکتواسیون بر روی مدل ظرفیت کوانتوم در نظر گرفته شده است.

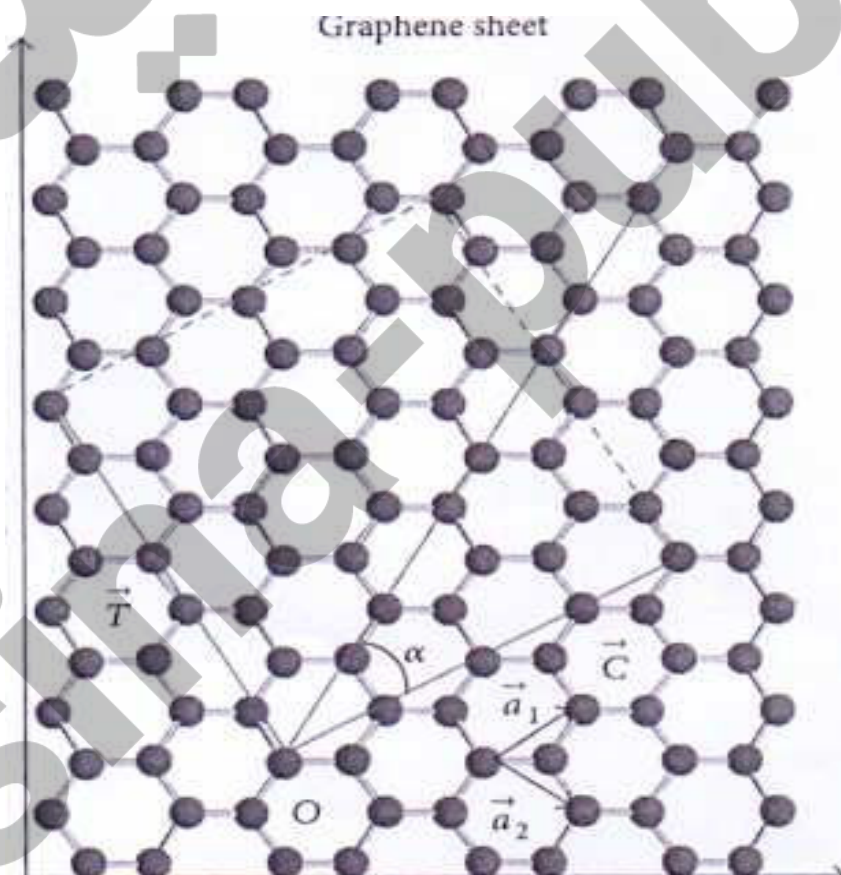
2- مدل تحلیلی خازن کوانتوم برای ZNGS

به عنوان پارامتر های الکترونیکی اصلی، غلظت حامل و ظرفیت کوانتوم 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 1: مدل شماتیک نانواسکرول گرافن



شکل 2: نمایی از صفحه گرافن تاخورد در CNS

شبکه گرافن در شکل 2 نشان دهنده روش لایه گرافن با تشکیل GNS می باشد 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

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

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

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

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 $E_Z(\vec{k})$ ZGNS نزدیک به نقطه دیراک با باند گپ $K=0$ 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 کارآمد در ZGNS باشد و به صورت انرژی هم پوشانی C-C نزدیک ترین

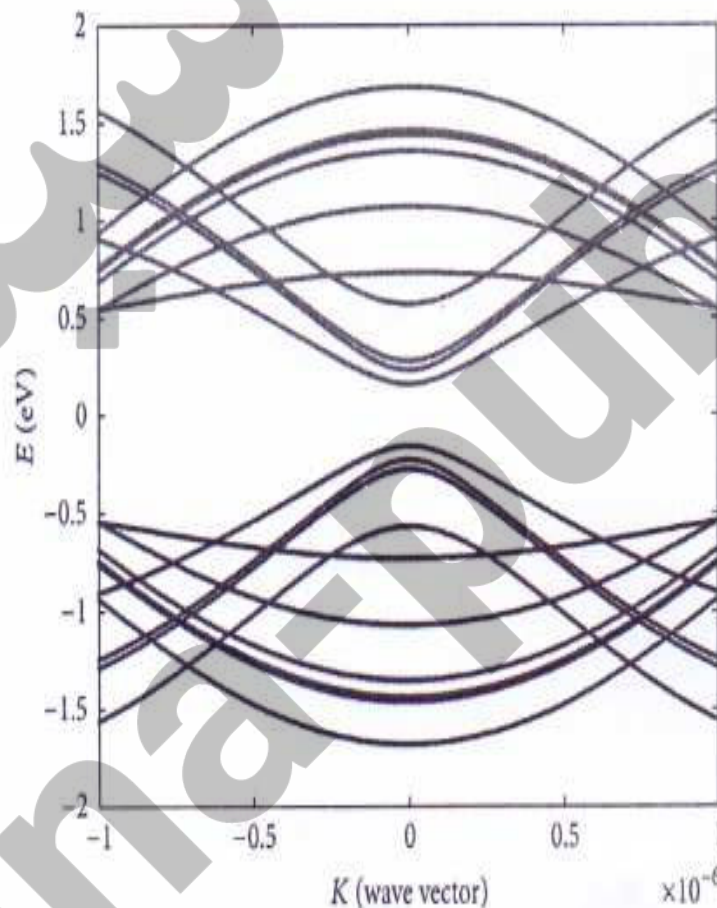
همسایه است و EC انرژی باند رسانش به صورت $E_c = 0.5t + (3L^2)/(2n^2)$ باشد. در عمل، با استفاده از

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

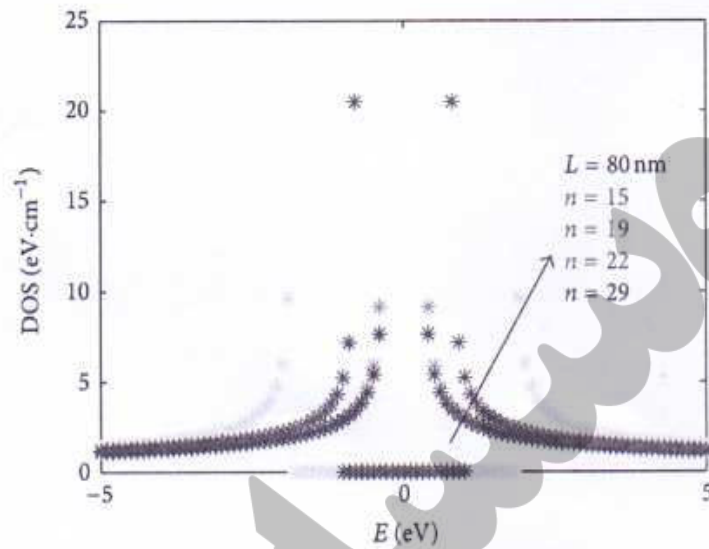
$$n_i = \int \text{DoS}(E) f(E) dE, \quad (5)$$

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 می دهد. 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 $\bar{x} = (\bar{E} - E_c)/K_B \bar{T}$ و $(E_F - E_c)/K_B T$ ، غلظت حامل به صورت زیر است

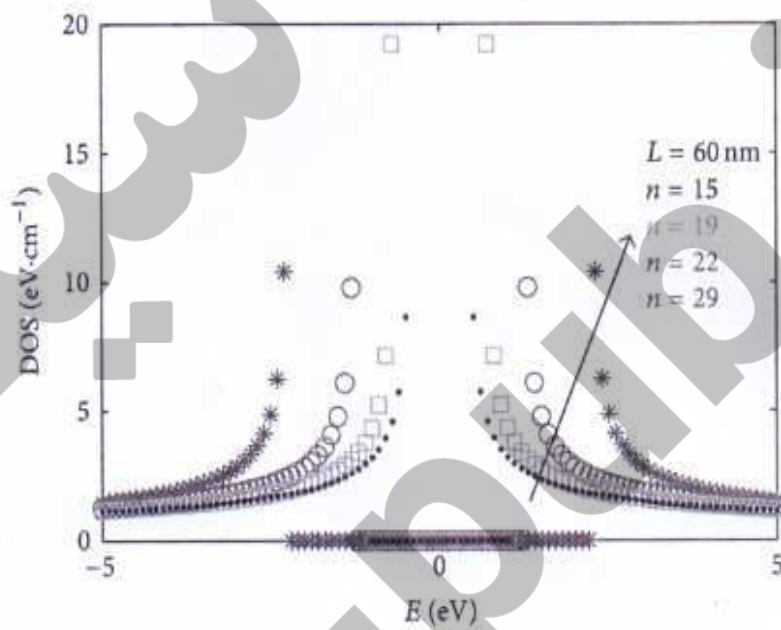
$$n_i = \frac{2m^*}{3\hbar^2\pi} \sqrt{\frac{K_B T}{t}} \int_0^{+\infty} \frac{(x)^{-1/2}}{1 + \exp(x - \eta_F)} dx. \quad (6)$$



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



شکل 4: DOS در برابر E



شکل 5: DOS در برابر E برای مقادیر کایرال

با حل انتگرال داریم

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

که $F_0(\eta_F)$ و $F_{(-1/2)}(\eta_F)$ 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 آید

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

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_i 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 آینده 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 چیرال و اسپیرال نشان داده شده است و اثرات پدیده اکترو 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

$$n_{idg} = \frac{2\eta_F m^* K_B T}{3t\pi\hbar^2} + \frac{k}{t\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\eta_F m^* K_B T}{3}} \quad (9)$$

$$n_{inon-dg} = \frac{2m^* K_B T}{3t\pi\hbar^2} \exp(\eta_F) + \sqrt{\frac{2m^* K_B T k^2}{9t\pi\hbar^2} \exp(\eta_F)}$$

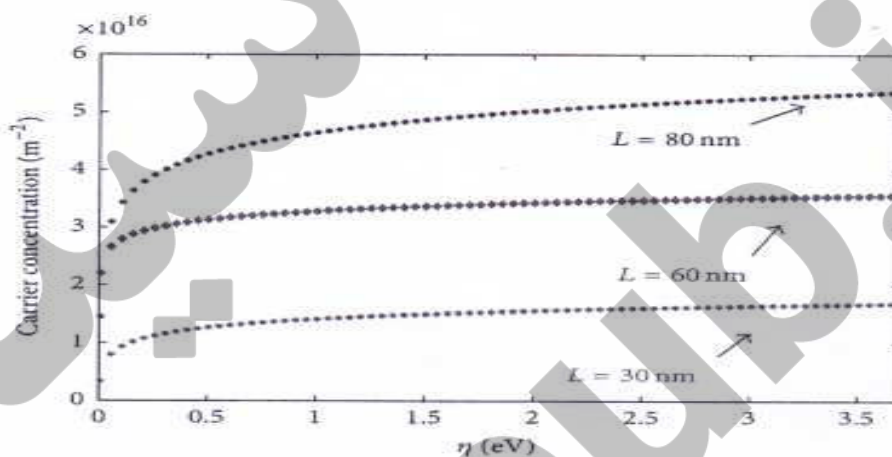
شکل 7 غلظت حامل را با توجه به n برای رژیم های منحنی و غیر منحنی نشان می دهد. که m می تواند به صورت وزن الکترونی کارآمد در ZGNS باشد و به صورت انرژی هم پوشانی C-C نزدیک ترین همسایه است و EC انرژی باند رسانش به صورت $E_c = 0.5t + (3L^4)/(2n^4)$ باشد. در عمل، با استفاده از تابع توزیع فرمی دیارک در برابر انرژی، مجموع تمرکز حامل در باند نیاز است. معادله کلی برای ظرفیت کوانتوم یک بعدی به صورت زیر بدست می آید

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

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

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

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 η برای مقادیر مختلف L

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

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

از سوی دیگر، بخش نمایی در واقع در رژیم منحنی به دلیل احتمال پر کردن حالت ها در سطح فرمی که تقریباً

1 است استفاده می شود و این نشان می دهد که هیچ حالت قابل قبولی درون باند برای $E - E_F \leq 3K_B T$ وجود

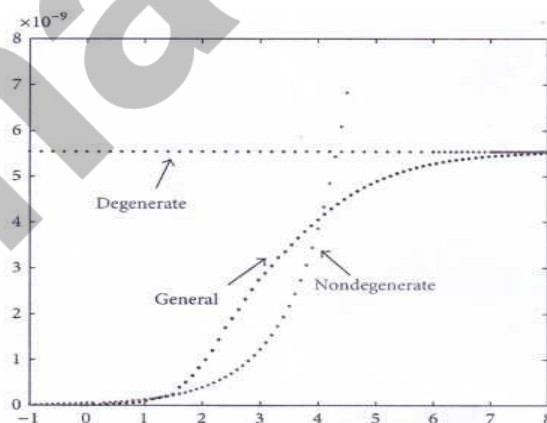
ندارد. در نتیجه، ظرفیت درون رژیم منحنی می تواند به صورت زیر بدست بیاید

$$C_{q4} = \frac{2e^2 m^*}{3\pi \hbar^2} \sqrt{\frac{1}{t \cdot K_B T}} \cdot (x)^{-1/2} \quad (13)$$

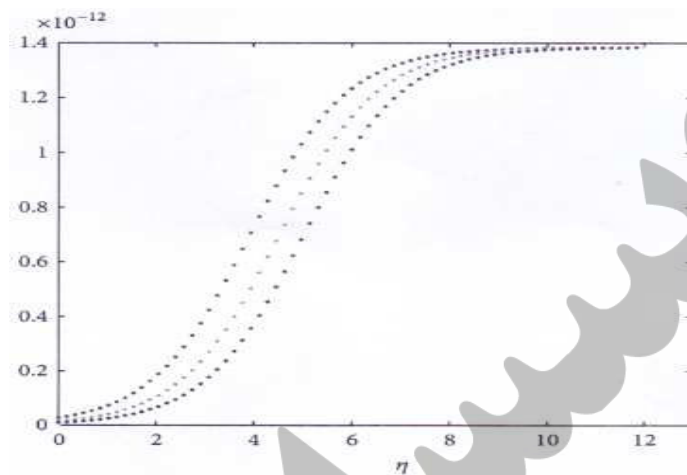
ظرفیت کوانتوم در برابر N برای حالت کلی و رژیم های منحنی و غیر منحنی شکل 8 نشان داده شده اند و این نشان می دهد که رژیم غیر منحنی تحت تاثیر تغییرات N نیست و در حالی که تمایل دارد تا یک مقدار ثابت را داشته باشد. بر عکس این افزایش نمایی را در رژیم غیر منحنی با تغییر n نشان می دهد. ظرفیت کوانتوم به طور کلی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

نتیجه گیری

می توان گفت که نانواسکرول گرافن با خواص انتشار میدانی و ریخت شناسی نواری را می توان در نانو الکترونیک آینده به عنوان حامل انتقال الکترون مورد استفاده قرار داد. مدل های تحلیلی مختلف برای خواص الکترونی CNS ارایه شده است نظیر غلظت حامل و تراکم حالت. به علاوه تحقیقات نشان داده است که عدد کایرال و پارامترهای 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 سریعاً به مقدار N پایین می رسد.



شکل 8: ظرفیت کوانتوم برای هر دو رژیم منحنی و غیر منحنی بر اساس ظرفیت کوانتوم



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