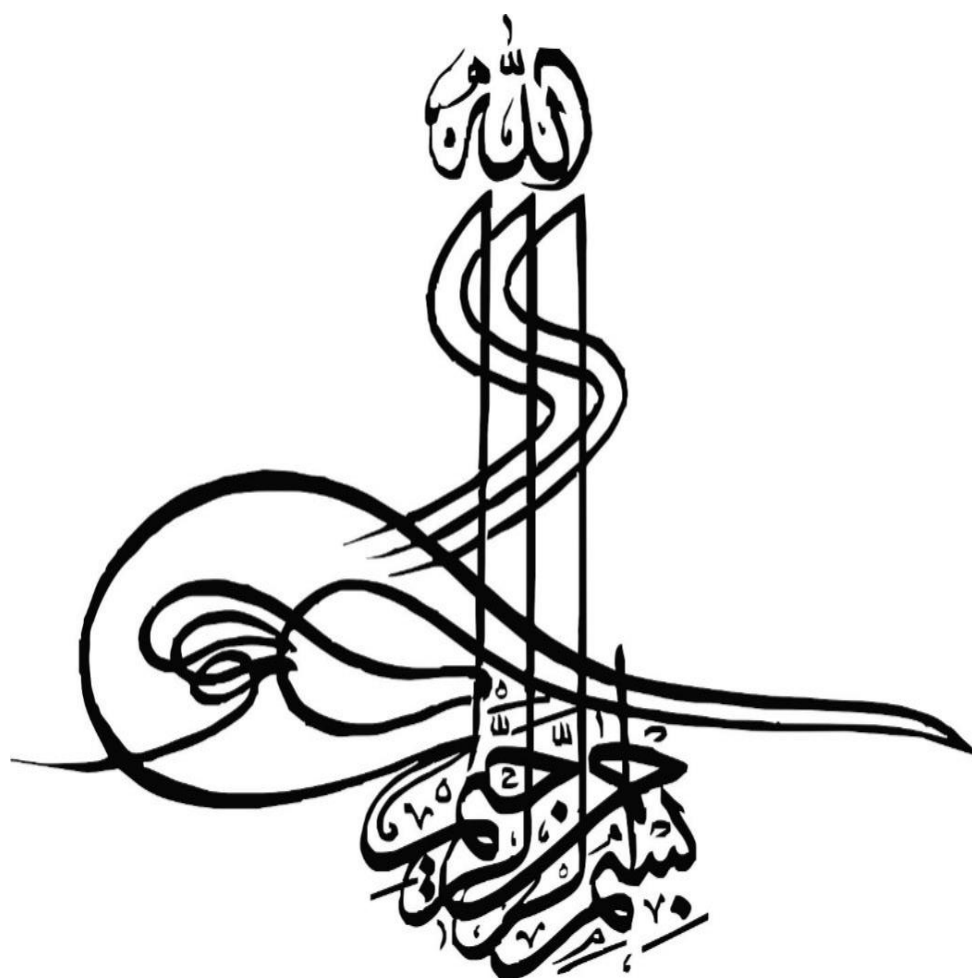






دانشکده علوم - گروه فیزیک  
پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد  
رشته فیزیک گرایش حالت جامد

## عنوان

مطالعه نظری نانو خازن ها بر پایه نانو پوسته ها

نگارش

سوناهمتی تبار لطفی زنجانی

اساتید راهنما

دکتر محمود رضایی رکن آبادی

دکتر محمد بهدانی

استاد مشاور

دکتر سپیده گل افروز شهری

بهمن ۱۳۹۶

## چکیده

این پژوهش به مطالعه نظری بر روی خازن‌هایی با صفحات ژرمن، گرافن و سیلیکن که با هیدروژن تبدیل به پولک (پوسته) با اندازه‌ی مشخص شده‌اند، پرداخته است. تمامی محاسبات با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) تحت کد سایستا انجام گرفته است. مطالعه بر روی خواص ساختاری، الکتریکی و تحلیل بار ذخیره شده روی صفحات خازن در حضور میدان الکتریکی خارجی بوده است. در نهایت ظرفیت نانوخازن‌های ژرمن-ژرمن، ژرمن-سیلیکن و ژرمن-گرافن و انرژی ذخیره شده در این خازن‌ها محاسبه گردیده است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد با اعمال میدان الکتریکی به‌طور عمود بر صفحات، تجمع بار الکتریکی روی صفحات نانوخازن بیشتر شده و همین باعث ایجاد گشتاور دوقطبی دائمی (پایدار) شده و با افزایش میدان الکتریکی، بار الکتریکی ذخیره شده در صفحات افزایش می‌یابد و در نتیجه انرژی ذخیره شده در هر لایه نیز افزایش می‌یابد. از طرفی دریافتیم ساختارهای مورد مطالعه دارای ظرفیت خازنی بالایی هستند و در میدان‌های بالاتر از حد مشخصی به حالت اشباع رسیده و ظرفیت خازن بعد از آن کاهش می‌یابد.

## سپاسگزاری

سپاس بی کران پروردگار یکتا را که هستی مان بخشید و به طریق علم و دانش رهنمونمان شد و به همنشینی رهروان علم و دانش مفتخرمان نمود و خوشه چینی از علم و معرفت را روزیمان ساخت.

تقدیم به پدر بزرگوار و مادر مهربانم، آن دو فرشته ای که از خواسته هایشان گذشتند، سختی ها را به جان خریدند و خود را سپر بلای مشکلات و ناملایمات کردند تا من به جایگاهی که اکنون در آن ایستاده ام برسم.

تقدیم به همسرم که سایه مهربانیش سایه سار زندگیم می باشد، او که اسوه صبر و تحمل بوده و مشکلات مسیر را برایم تسهیل نمود.

از اساتید با کمالات و شایسته، جناب آقای دکتر رضائی رکن آبادی و جناب آقای دکتر بهدانی که در کمال سعه صدر، با حسن خلق و فروتنی، از هیچ کمکی در این عرصه دریغ ننمودند و زحمت راهنمایی این رساله را بر عهده گرفتند و از استاد صبور و مهربانم، خانم دکتر گل افروز عزیز که زحمت مشاوره این رساله را در حالی متقبل شدند که بدون مساعدت ایشان، این پروژه به نتیجه مطلوب نمی رسید و از اساتید فرزانه و دلسوز، جناب آقای دکتر شاه طهماسبی و جناب آقای دکتر قربانی که زحمت داوری این رساله را متقبل شدند کمال تشکر و قدردانی را دارم.

## فهرست مطالب

### صفحه

### عنوان

#### فصل اول: معرفی نانو ساختارهای دو بعدی ژرمنن، سیلیکن، گرافن

|    |                                |
|----|--------------------------------|
| ۲  | مقدمه                          |
| ۴  | ۱-۱ گرافن                      |
| ۵  | ۱-۱-۱ خواص ساختاری گرافن       |
| ۶  | ۱-۱-۲ اوربیتال های اتمی گرافن  |
| ۷  | ۲-۱ سیلیکن                     |
| ۹  | ۱-۲-۱ ساختار هندسی سیلیکن      |
| ۱۰ | ۲-۲-۱ اوربیتال های اتمی سیلیکن |
| ۱۱ | ۳-۱ ژرمنن                      |
| ۱۱ | ۱-۳-۱ ساختار هندسی ژرمنن       |
| ۱۳ | ۲-۳-۱ اوربیتال های اتمی ژرمنن  |

#### فصل دوم: نانوخازن ها

|    |                         |
|----|-------------------------|
| ۱۹ | مقدمه                   |
| ۱۹ | ۱-۲ خازن                |
| ۱۹ | ۲-۲ انواع خازن          |
| ۲۱ | ۱-۲-۲ انواع ابر خازن ها |
| ۲۲ | ۳-۲ روش مدل سازی        |

#### فصل سوم: نظریه ی تابعی چگالی

|    |                               |
|----|-------------------------------|
| ۲۸ | مقدمه                         |
| ۲۹ | ۱-۳ بررسی سیستم های بس ذره ای |
| ۲۹ | ۱-۱-۳ تقریب بورن - اپنهایمر   |
| ۳۰ | ۲-۱-۳ تقریب هارتری            |
| ۳۱ | ۳-۱-۳ تقریب هارتری-فوک-اسلیتر |
| ۳۲ | ۲-۳ نظریه تابعی چگالی DFT     |
| ۳۲ | ۳-۳ قضایای هوهنبرگ - کوهن     |

|    |                                                     |
|----|-----------------------------------------------------|
| ۳۲ | ۳-۳-۱ نظریه اول: چگالی الکترونی به عنوان متغیر اصلی |
| ۳۳ | ۳-۳-۲ نظریه دوم: اصل تغییر                          |
| ۳۳ | ۳-۴ معادلات کوهن - شم                               |
| ۳۷ | ۳-۵ انواع تقریب‌های انرژی همبستگی = تبادلی          |
| ۳۷ | ۳-۵-۱ تقریب چگالی موضعی (LDA)                       |
| ۳۷ | ۳-۵-۲ تقریب چگالی اسپین الکترونی موضعی (LSDA)       |
| ۳۸ | ۳-۵-۳ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)                   |
| ۳۸ | ۳-۶ روش‌های حل معادلات کوهن - شم                    |
| ۳۹ | ۳-۷ روش شبه پتانسیل                                 |
| ۴۱ | ۳-۷-۱ انتخاب شعاع مغزه $r_c$                        |

#### فصل چهارم: محاسبه ظرفیت نانوخازن‌ها و تحلیل نتایج

|    |                                                                |
|----|----------------------------------------------------------------|
| ۴۶ | مقدمه                                                          |
| ۴۷ | ۴-۱ روش انجام محاسبات الکترونی:                                |
| ۵۰ | ۴-۲ نتایج و تحلیل نمودارها                                     |
| ۵۰ | ۴-۲-۱ اختلاف بار صفحات نانوخازن                                |
| ۵۳ | ۴-۲-۲ تغییرات بار هر صفحه از نانوخازن با افزایش میدان الکتریکی |
| ۵۴ | ۴-۲-۳ گشتاور دو قطبی                                           |
| ۵۶ | ۴-۲-۴ بار ذخیره شده در نانوخازن                                |
| ۵۷ | ۴-۲-۵ انرژی ذخیره شده در صفحات نانوخازن                        |
| ۵۸ | ۴-۲-۶ ظرفیت نانوخازن                                           |
| ۵۹ | ۴-۲-۷ چگالی حالت‌های کلی                                       |
| ۶۱ | ۴-۲-۸ تغییرات گاف انرژی                                        |
| ۶۲ | ۴-۲-۹ چگالی حالت‌های جزئی                                      |
| ۶۶ | نتیجه‌گیری                                                     |
| ۶۸ | پیشنهادهات:                                                    |

## فهرست شکل ها

| صفحه    | عنوان                                                                                                                                                                                 |
|---------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ۵.....  | شکل ۱- ۱ ساختار شبکه ای لانه زنبوری گرافن که دارای دو زیر شبکه مثلثی در هم تنیده A و B است [۱۷].....                                                                                  |
| ۶.....  | شکل ۱- ۲ ساختار بلوری لانه زنبوری گرافن. دایره های سفید (سیاه) بیانگر اتم های کربن در سایت های A (B) بوده است و لوزی سایه دار سلول واحد در بر دارنده ی دو اتم A و B می باشد [۲۱]..... |
| ۷.....  | شکل ۱- ۳ آرایش الکترون ها و اسپین آن ها در الف) اتم کربن ب) گرافن پ) نمایش اوربیتال های $sp^2$ [۲۲].....                                                                              |
| ۸.....  | شکل ۱- ۴ ساختار کریستالی سیلیکن و نمایش خمیدگی آن [۲۷].....                                                                                                                           |
| ۹.....  | شکل ۱- ۵ ساختار لانه زنبوری سیلیکن [۳۰].....                                                                                                                                          |
| ۱۲..... | شکل ۱- ۶ ژرمن لانه زنبوری دو بعدی الف) نمایشی از بالا ب) نمایشی از روبرو [۳۵].....                                                                                                    |
| ۴۸..... | شکل ۴- ۱ نانوخازن ژرمن-ژرمن الف) نمایشی از بالا ب) نمایشی از روبرو.....                                                                                                               |
| ۴۹..... | شکل ۴- ۲ نانوخازن ژرمن- سیلیکن الف) نمایشی از بالا ب) نمایشی از روبرو.....                                                                                                            |
| ۴۹..... | شکل ۴- ۳ نانوخازن با صفحات ژرمن-گرافن الف) نمایشی از بالا ب) نمایشی از روبرو.....                                                                                                     |
| ۵۴..... | شکل ۴- ۴ تغییرات بار هر صفحه نسبت به تغییرات میدان اعمالی.....                                                                                                                        |
| ۵۵..... | شکل ۴- ۵ تغییرات گشتاور دو قطبی با تغییرات میدان الکتریکی اعمالی.....                                                                                                                 |
| ۵۶..... | شکل ۴- ۶ بار ذخیره شده روی صفحات نانوخازن با اعمال میدان الکتریکی.....                                                                                                                |
| ۵۷..... | شکل ۴- ۷ انرژی ذخیره شده در نانوخازن با اعمال میدان الکتریکی خارجی.....                                                                                                               |
| ۵۹..... | شکل ۴- ۸ ظرفیت نانوخازن ها با اعمال میدان الکتریکی خارجی.....                                                                                                                         |
| ۶۰..... | شکل ۴- ۹ چگالی حالت های کلی صفحه ژرمن در نانوخازن ژرمن-ژرمن در عدم حضور میدان الکتریکی.....                                                                                           |
| ۶۰..... | شکل ۴- ۱۰ چگالی حالت های کلی صفحه سیلیکن در نانوخازن ژرمن-سیلیکن در عدم حضور میدان الکتریکی.....                                                                                      |
| ۶۱..... | شکل ۴- ۱۱ چگالی حالت های کلی صفحه گرافن در نانوخازن ژرمن-گرافن در عدم حضور میدان الکتریکی.....                                                                                        |
| ۶۲..... | شکل ۴- ۱۲ تغییرات گاف انرژی بر حسب میدان الکتریکی اعمالی.....                                                                                                                         |
| ۶۳..... | شکل ۴- ۱۳ چگالی حالت های جزئی صفحه بالایی نانوخازن ژرمن-ژرمن.....                                                                                                                     |
| ۶۴..... | شکل ۴- ۱۴ چگالی حالت های جزئی صفحه Si (بالایی) نانوخازن ژرمن-سیلیکن.....                                                                                                              |
| ۶۵..... | شکل ۴- ۱۵ چگالی حالت های جزئی صفحه C (بالایی) نانوخازن ژرمن-گرافن.....                                                                                                                |

## فهرست جدول ها

| عنوان                                                                                                   | صفحه |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|
| جدول ۱-۱ پارامترهای ژرمن.....                                                                           | ۱۲   |
| جدول ۴-۱ فواصل بین اتمی در نانو پوسته ژرمن.....                                                         | ۴۸   |
| جدول ۴-۲ فواصل بین اتمی در نانو پوسته سیلیکن.....                                                       | ۴۹   |
| جدول ۴-۳ فواصل بین اتمی در نانو پوسته گرافن.....                                                        | ۵۰   |
| جدول ۴-۴ میزان الکترون خواهی اتمهای هیدروژن، کربن، سیلیسیوم و ژرمانیوم.....                             | ۵۰   |
| جدول ۴-۵ تغییرات بار صفحات خازن ژرمن-ژرمن با اعمال میدان الکتریکی.....                                  | ۵۱   |
| جدول ۴-۶ تغییرات بار صفحات خازن ژرمن-سیلیکن با اعمال میدان الکتریکی.....                                | ۵۲   |
| جدول ۴-۷ تغییرات بار صفحات خازن ژرمن-گرافن با اعمال میدان الکتریکی.....                                 | ۵۲   |
| جدول ۴-۸ تغییرات میزان گشتاور دو قطبی نانوخازنهای ژرمن-ژرمن (سیلیکن، گرافن) با اعمال میدان الکتریکی.... | ۵۵   |
| جدول ۴-۹ تغییرات ظرفیت نانوخازنهای ژرمن-ژرمن (سیلیکن، گرافن) با اعمال میدان الکتریکی.....               | ۵۸   |

## فصل اول:

معرفی نانو ساختارهای دو بعدی ژرمنن، سیلیکن،  
گرافن

در دو دهه‌ی گذشته گرافن و گرافین با توجه به خواص قابل توجه و متعدد در زمینه‌های مختلف و کاربردهای آلوتروپ‌های دو بعدی کربن، محبوبیت زیادی به دست آورده است [۱]. تحقیقات اخیر در زمینه‌ی ساختارهای پیوندی<sup>۱</sup> متشکل از گرافن و دیگر مواد دوبعدی که تقارنی مشابه با گرافن دارند، نویدبخش فرصت‌های طلایی برای رسیدن به خواص الکترونیکی [۲] و اپتوالکترونیکی [۳] ویژه است.

ساختارهای پیوندی از روی هم قرار گرفتن دو صفحه‌ی دوبعدی مختلف به دست می‌آیند. صفحه بور نیتريد شش‌گوشه<sup>۲</sup> [۴]، صفحه آلومینیم نیتريد<sup>۳</sup> [۵] و صفحه گالیم نیتريد<sup>۴</sup> [۶] دارای تقارن مشابه گرافن هستند با این تفاوت که بلورهای دو بعدی با گاف نواری بزرگ می‌باشند. از آنجایی که بور نیتريد دارای ساختار و پارامترهای شبکه‌ی نزدیک به گرافن است می‌تواند به‌عنوان زیرلایه‌ای مناسب برای رشد گرافن مدنظر قرار گیرد. همچنین با توجه به شباهت هندسی ساختارهای آلومینوم نیتريد، گالیم نیتريد یا سیلیسیوم کربید<sup>۵</sup> با صفحه گرافن، می‌توان خواص جالب توجهی را انتظار داشت.

نتایج تحقیقات تجربی [۷] متعدد اخیر نشان داده است که گرافن روی زیرلایه‌ی فلزی به روش برآرای<sup>۶</sup> رشد می‌کند، اما با توجه به خواص نویدبخش و امیدوارکننده گرافن، رشد آن روی یک زیرلایه با ساختار دو بعدی با گاف نواری معین [۸] مورد توجه است. برهم‌کنش گرافن نیمه فلز با زیر لایه منجر به القاء مقدار قابل توجهی از حامل‌های بار می‌شود، که با اعمال میدان خارجی و یا با تغییر فاصله‌ی بین لایه‌ها قابل تغییر است، این امر باعث ایجاد برخی پدیده‌های فصل مشترک<sup>۷</sup> از جمله دوقطبی فصل مشترک<sup>۸</sup> [۹]، بار انتقال یافته<sup>۹</sup> [۱۰]، حالات جایگزیده در ساختار نواری ناشی از لبه‌های آزاد<sup>۱۰</sup> [۱۱] می‌شود که نقش مهمی را در ابزار و تجهیزات الکتریکی بازی می‌کند، از جمله کاربردهای آن می‌توان به، به‌کارگیری آن‌ها در ترانزیستورها

<sup>۱</sup>heterosructure

<sup>۲</sup>BN

<sup>۳</sup>.AlN

<sup>۴</sup>.GaN

<sup>۵</sup> SiC

<sup>۶</sup>. epitaxially

<sup>۷</sup> interfacial

<sup>۸</sup> interface dipole

<sup>۹</sup> charge transfer

<sup>۱۰</sup> edge localized dangling bond states

وخازن‌ها اشاره نمود. علاوه بر این، چگالی بار نامتقارن در اطراف هر دو لایه، امکان بررسی خواص قطبشی و ماهیت فرو الکتریکی سیستم را افزایش می‌دهد [۱۰].

امکان تغییر و کنترل گاف نواری، توسعه تجهیزات الکتریکی جدید مبتنی بر گرافن را برای ما میسر خواهد ساخت. گاف نواری در گرافن را می‌توان به‌وسیله‌ی ایجاد محدودیت‌های کوانتومی<sup>۱</sup> (برش پوسته) یا آلایش<sup>۲</sup> ساختار با عناصر دیگر ایجاد نمود. علاوه بر این، گاف نواری با اعمال میدان الکتریکی خارجی نیز قابل کنترل می‌باشد [۹]. مواد پایه گرافنی به دلیل ساختار منحصر به فرد دو بعدی و خواص فیزیکی ذاتی مانند هدایت الکتریکی فوق‌العاده و مساحت سطح زیاد، پتانسیل زیادی برای کاربرد در ابرخازن‌ها دارد. برای طراحی نانوخوازن‌ها و ابرخازن‌ها از نانو ساختارهای دولایه‌ای و یا چندلایه‌ای، بخصوص گرافن و بورون نیتريد هگزاگونال (گرافن گونه) استفاده شده است [۱۲]. این ابرخازن ظرفیتی از مرتبه‌ی  $120 \text{ F/mg}$  از خود به نمایش گذاشته است. بسیاری از مطالعات نظری [۱۰] و عملی [۱۳، ۱۲] نشان می‌دهند که خازن‌های دولایه و چندلایه‌ی متشکل از صفحات گرافن و بورون نیتريد ظرفیت بالا و قابلیت ذخیره سازی انرژی قابل توجهی دارند.

علاوه بر این، تلاش تجربی موفقیت‌آمیزی جهت تأیید ظرفیت بالای نانوخوازن دارای صفحات گرافن-بورون نیتريد انجام شده است [۱۳]. این نکته قابل ذکر است که ضخامت و مساحت سطح نقش مهمی در نتایج محاسبات انجام شده روی نانوخوازن‌ها دارند.

اگرچه برهم‌کنش گرافن با دیگر ساختارهای دو بعدی و خواص خازنی آن‌ها [۱۰، ۹] بررسی شده است اما برهم‌کنش پوسته‌ی گرافن با ژرمن و ویژگی‌های آن به‌عنوان نانوخوازن تا امروز بررسی نشده است، بنابراین مطالعه برهم‌کنش پوسته‌ی ژرمن با پوسته‌ی گرافن (سیلیکن) و امکان استفاده از آن به عنوان نانوخوازن ارزشمند خواهد بود.

بدین منظور ابتدا به معرفی ساختارهای ژرمن، سیلیکن و گرافن می‌پردازیم:

<sup>۱</sup> Introducing quantum confinement

<sup>۲</sup> doping

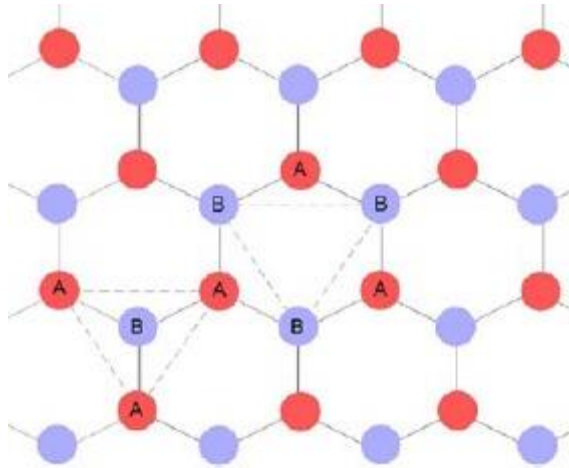
## ۱-۱ گرافن

مکانیک آماری از لحاظ ترمودینامیکی وجود بلورهای دو بعدی پایدار را تأیید نمی‌کند [۱۴]. بنابراین باور بر این بود که در طبیعت بلور دو بعدی از اتم‌های کربن نمی‌تواند پایدار باشد. برخلاف پیش‌بینی‌های نظری در سال ۲۰۰۴، اندره گیم<sup>۱</sup> و همکارانش دریافتند که گرافن در طبیعت وجود دارد و با کمک میکروسکوپ نیروی اتمی<sup>۲</sup>، تک لایه‌ی گرافیتی را نشان دادند [۱۵، ۱۴]. این موفقیت برای اولین بار به صورت جداسازی یک لایه‌ی منفرد از گرافیت انجام شد و در سال ۲۰۱۰ جایزه نوبل فیزیک را دریافت کردند. بعد از آن علاوه بر جوامع علمی، آزمایشگاه‌های تحقیقاتی-صنعتی نیز به‌طور گسترده به بررسی خواص و کاربردهای این ماده پرداختند. خواص الکترونی متفاوت گرافن، این ماده را از سایر مواد متمایز کرده است. در موارد معمول معادله شرودینگر بیان‌کننده دینامیک الکترون‌هاست؛ اما در گرافن، برای الکترون‌های با انرژی پایین، معادله شرودینگر به معادله دیراک تبدیل می‌شود. با اینکه الکترون‌ها در گرافن نسبیتی نیستند با این حال به‌طور مؤثری توسط معادله دیراک توصیف می‌شوند و در نتیجه هم چون فرمیون‌های دیراک رفتار می‌کنند. از آنجایی که در گرافن دو نظریه الکترومدینامیک کوانتومی و فیزیک ماده چگال به هم می‌رسند، محققان مجذوب خواص الکترونی گرافن شده‌اند [۱۶-۱۸]. سرعت فرمی الکترون‌ها، نزدیک به سرعت نور ( $V_F = c/300 = 10^6 \text{ m/s}$ ) است. ساختار گرافن، شبکه‌ای لانه‌زنبوری دو بعدی از اتم‌های کربن می‌باشد که شامل دو زیر شبکه است (شکل ۱-۱).

---

<sup>۱</sup> Andre Geim

<sup>۲</sup> AFM



شکل ۱-۱ ساختار شبکه‌ای لانه‌زنبوری گرافن که دارای دو زیر شبکه مثلثی درهم‌تنیده A و B است [۱۷].

گرافن نه تنها مطالعه فرمیون‌های دیراک را در قطعات حالت جامد میسر می‌سازد بلکه، ماده‌ی جدید کاربردی در نانو الکترونیک است [۱۹]. چرا که گرافن به دلیل پیوندهای بین‌اتمی قوی، عاری از ناکاملی‌های ساختاری است بنابراین دارای ساختار بلوری کاملی است. از طرفی چون بی‌نظمی خارجی در گرافن کوچک است، حامل‌های بار مسیرهای آزاد میانگین بزرگی خواهند داشت. تا جایی که تحرک الکترونی بیش از  $100000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  در دمای اتاق گزارش شده است [۱۸]. این ویژگی‌های الکترونی خاص و ویژه، گرافن را به گزینه مناسبی جهت ساخت قطعات الکترونیکی تبدیل نموده است.

گرافن نیم‌رسانایی با گاف نواری صفر می‌باشد که ترابرد الکترون‌ها و حفره‌ها را بدون نیاز به افزودن ناخالصی شیمیایی ممکن می‌سازد. در نقطه‌ی تماس بین نوارهای رسانش و ظرفیت، که نقطه دیراک نامیده می‌شود، چگال حالت‌ها صفر می‌شود ولی رسانش همچنان غیر صفر باقی می‌ماند.

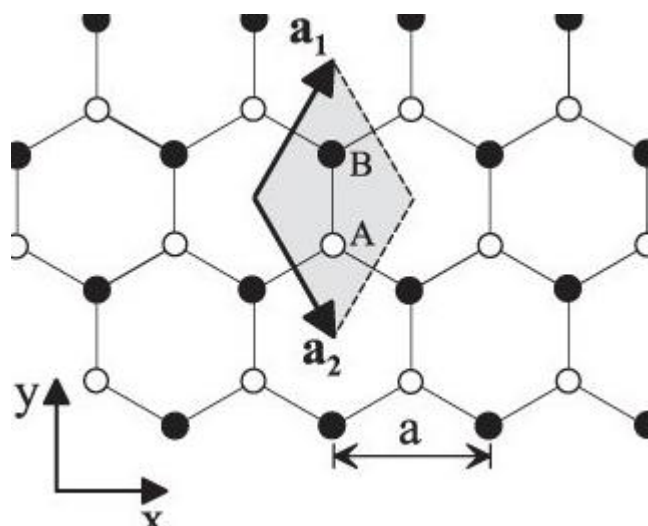
### ۱-۱-۱ خواص ساختاری گرافن

گرافن، تک لایه‌ای از گرافیت با شبکه دو بعدی لانه‌زنبوری است (شکل ۱-۱). دو بردار پایه شبکه به صورت زیر بیان می‌شود:

$$a_1 = a \left( \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad a_2 = a \left( \frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (1-1)$$

که  $a = |a_1| = |a_2| = 2.46 \text{ \AA}$  ثابت شبکه می‌باشد. ثابت شبکه فاصله بین سلول‌های واحد می‌باشد.

به طوری که فاصله‌ی بین اتم‌های کربن که طول پیوند کربن-کربن می‌باشد طبق رابطه  $a_{cc} = a/\sqrt{3} = 1.42 \text{ \AA}$  با ثابت شبکه ارتباط دارد. لازم به ذکر است که ساختار لانه‌زنبوری یک شبکه براوه نیست چرا که موقعیت اتم‌های A, B همسان نیستند. زیرا در یک شبکه براوه همه اتم‌ها از یک نوع و همه نقاط شبکه معادل هستند [۲۰]. می‌توان گفت که موقعیت‌های اتمی A (و یا موقعیت‌های اتمی B) یک شبکه براوه هگزاگونال را تشکیل می‌دهند لذا از آن‌ها به عنوان "زیر شبکه A" (و یا زیر شبکه B) نام برده می‌شود شکل (۱-۲).

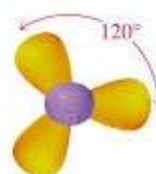
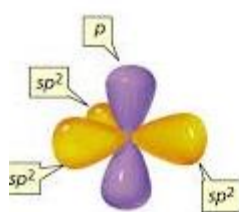


شکل ۱-۲ ساختار بلوری لانه‌زنبوری گرافن. دایره‌های سفید(سیاه) بیانگر اتم‌های کربن در سایت‌های A (B) بوده است و لوزی سایه‌دار سلول واحد دربردارنده‌ی دو اتم A و B می‌باشد [۲۱].

### ۱-۲ اوربیتال‌های اتمی گرافن

هر اتم کربن شش الکترون دارد که دو تا از آن‌ها الکترون‌های مغزه و چهار تای آن‌ها الکترون‌های ظرفیت می‌باشد که در اوربیتال‌های  $2s$ ،  $2p_x$ ،  $2p_y$ ،  $2p_z$  جای می‌گیرند. هیبریداسیون اوربیتال‌ها در گرافن از نوع  $sp^2$  می‌باشد، بدین معنی که دو تا از اوربیتال‌های  $2p$  یعنی  $2p_x$ ،  $2p_y$ ، که در صفحه گرافن قرار دارند با اوربیتال  $2s$  ترکیب می‌شوند و سه اوربیتال هیبریدی  $sp^2$  را تشکیل می‌دهند، این اوربیتال‌های هیبریدی در صفحه گرافن بوده و نسبت به یکدیگر تحت زاویه  $120^\circ$  درجه جهت‌گیری می‌کنند. پیوند بین اوربیتال‌های هیبریدی  $sp^2$  اتم‌های کربن مجاور با یکدیگر از نوع  $\sigma$  می‌باشد که مسئول استحکام شبکه

است. اوربیتال باقی مانده  $2p_z$  هر اتم عمود بر صفحه‌ی گرافن بوده و وقتی در کنار اوربیتال‌های  $2p_z$  اتم‌های مجاور قرار می‌گیرد پیوند  $\pi$  تشکیل می‌دهد که مسئول خواص الکترونی گرافن است شکل (۱-۳).



(پ)

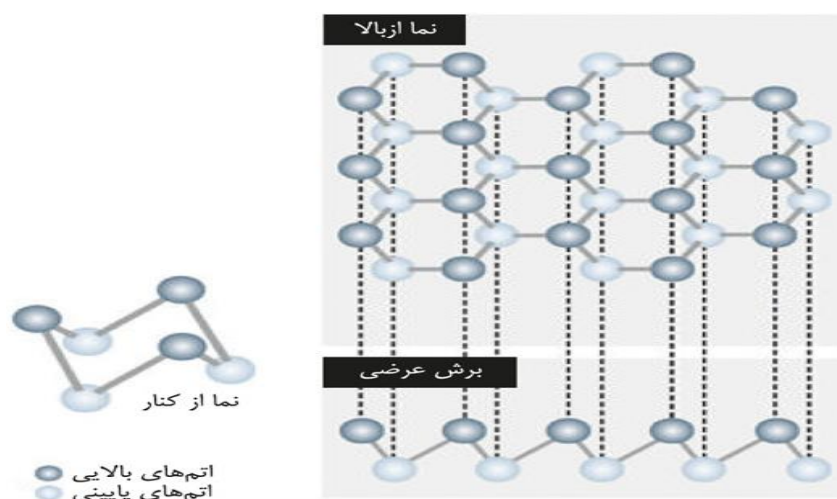
شکل ۱-۳ آرایش الکترون‌ها و اسپین آن‌ها در الف) اتم کربن ب) گرافن پ) نمایش اوربیتال‌های  $sp^2$  [۲۲].

## ۲-۱ سیلیکن

سیلیسیوم به عنوان یک ماده بسیار کاربردی در صنعت نیمه‌رساناها شناخته می‌شود. بعد از بررسی‌های انجام گرفته روی گرافیت توجه خاصی به عناصر گروه چهارم شد. اگر یک لایه از سیلیسیوم روی سطح نقره لایه نشانی گردد، این ماده سیلیکن نام می‌گیرد. ۶ سال بعد از موفقیت‌های چشمگیر در زمینه گرافن علاقه‌ی زیادی به بررسی سیلیکن ایجاد شد [۲۳]. در فعالیت‌های تجربی پیرامون ساخت و سنتز سیلیکن تاکنون صفحات آزاد و مستقل سیلیکن مشاهده نشده و تنها می‌توان این ماده را بر روی بسترهای فلزی همچون نقره رشد داد، که اولین بار در سال ۲۰۱۰ به روش CVD<sup>۱</sup> انجام شد [۲۴]. مشکل اصلی این‌گونه بسترها رسانا بودن آن‌ها است زیرا خواص الکتریکی سیلیکن را پنهان می‌سازد و داده‌های تجربی با پیش‌بینی‌های نظری هم‌خوانی لازم را ندارد چرا که بستری همچون نقره مخروط دیراک یافته شده در

<sup>۱</sup> Chemical vapor deposition

سیلیکن را خراب می‌کند. یک بستر عایق یا نیمه‌رسانا خواص آن را حفظ می‌کند که تاکنون یافت نشده است. لیو<sup>۱</sup> و همکارانش با استفاده از محاسبات اصول اولیه نشان دادند که تک لایه هگزagonal بورون نیتريد و سیلیسیم کرید، خواص الکتریکی سیلیکن را حفظ می‌کند. امروزه مطالعات متعددی بر روی ساختار الکترونی سیلیکن و نانو نوارهای سیلیکن انجام گرفته است، تنظیم گاف انرژی آن، که برای کاربردهای الکترونی مهم می‌باشد، توسط دروموند<sup>۲</sup> و همکارانش مورد بررسی قرار گرفت [۲۵]. همچنین چن<sup>۳</sup> و همکارانش نشان دادند، سیلیکن تک لایه رشد داده شده روی بستر Ag(۱۱۱) در دمای K ۳۵-۴۰ به ابررسانا تبدیل می‌شود [۲۶]. در حالی که تصور می‌شود سیلیکن از نظر ساختاری کاملاً مشابه گرافن است اما تفاوت‌های فراوانی بین این دو ماده دیده می‌شود. ساختار بلوری شش‌وجهی مشابه بوده اما سیلیکن برخلاف گرافن تخت نبوده و خمیدگی در آن دیده می‌شود. این خمیدگی در شکل ۱-۴ نشان داده شده است.



شکل ۱-۴ ساختار کریستالی سیلیکن و نمایش خمیدگی آن [۲۷].

در اینجا برخلاف گرافن زیر شبکه‌ها در یک صفحه قرار ندارند و انتقال پیدا کرده‌اند به گونه‌ایی که هر کدام، یک صفحه تشکیل می‌دهند. پارامتر خمیدگی  $h$  دارای مقدار  $0.46 \text{ \AA}$  است [۲۸]. خمیدگی پارامتر ساختاری

<sup>۱</sup> Liu

<sup>۲</sup> Drummond

<sup>۳</sup> Chen

مهمی است که سیلیکن را از گرافن جدا می‌کند. خمیدگی خواص الکترونی بیشتری را در ساختار الکترونی سیلیکن معرفی می‌کند. از جمله اینکه تنظیم گاف انرژی با میدان الکتریکی را میسر می‌سازد. نیمه فلز سیلیکن از عنصر سیلیسیم (Si) گروه چهارم جدول تناوبی عناصر تشکیل شده است که آرایش اسپکتروسکوپی آن به شرح زیر است:

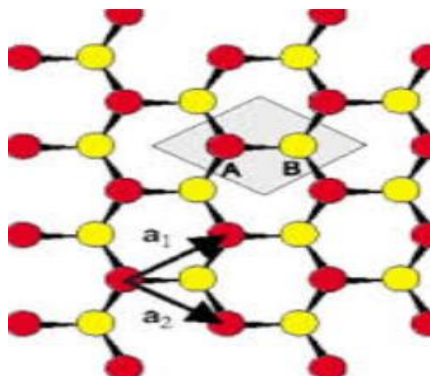
$$\text{Si} = \frac{1s^2 2s^2 2p^6}{\text{الکترون های ظرفیت الکترون های مغزه}} \frac{3s^2 3p^2}{\text{الکترون های ظرفیت الکترون های مغزه}}$$

تأثیر الکترون های مغزه استتار پتانسیل هسته می‌باشد.

در سیلیکن نیز مخروط دیراک وجود دارد که منجر به هدایت الکتریکی قابل مقایسه با گرافن می‌شود [۲۹]. یکی از محدودیت های بزرگ گرافن، فقدان گاف انرژی است که کاربرد آن در دستگاه های الکترونیکی را محدود می‌کند. اما فقدان گاف ناشی از در نظر نگرفتن جفت شدگی اسپین-مدار است، زیرا در نظر گرفتن آن باعث ایجاد گاف انرژی ناچیزی در گرافن می‌شود اما در سیلیکن، برهم کنش اسپین-مدار قوی تر از گرافن است، لذا منجر به ایجاد گاف انرژی بین نوارهای ظرفیت و رسانش می‌شود. این گاف انرژی توسط میدان الکتریکی قابل کنترل است که این مزیتی برای سیلیکن محسوب می‌شود.

### ۱-۲-۱ ساختار هندسی سیلیکن

شکل ۱-۵ ساختار هندسی سیلیکن را نمایش می‌دهد که تا حد زیادی شبیه گرافن است. سیلیکن نیز یک ساختار شبکه ای براوه نیست و به دو زیر شبکه تجزیه می‌شود.



شکل ۱-۵ ساختار لانه زنبوری سیلیکن [۳۰].

با تعریف بردارهای پایه می توان به وسیله بردار انتقال  $\vec{R}$  از اتم A به اتم B رفت. به عبارتی اتم های A و B در صفحه سیلیکن شبکه ای با ثابت شبکه  $3/86 \text{ \AA}$  را ایجاد می کنند [۳۱]. بردارهای پایه به صورت زیر است:

$$a_1 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad a_2 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right) \quad (2-1)$$

در این روابط  $a$  ثابت شبکه است که برابر است با :

$$a = \sqrt{3}a_{si-si}$$

که  $a_{si-si}$  طول پیوند سیلیکن - سیلیکن برابر  $2/28 \text{ \AA}$  است.

### ۲-۲-۱ اوربیتال های اتمی سیلیکن

در پاسخ به این سؤال که چرا سیلیکن ساختار خمیده دارد می توان گفت در ساختار شش ضلعی کربن، ساختار هندسی تخت با پیوندهای قوی  $\pi$  از طریق اوربیتال های عمودی  $P_z$  و پیوند  $\sigma$  با اوربیتال های هیبرید شده  $sp^2$  نگه داری می شود اما در ساختار شش ضلعی عناصری فراتر از کربن پیوندهای  $\pi - \pi$  به علت افزایش طول پیوند ضعیف می شوند و ساختار با جمع و خمیده شدن پایدار می شود جایی که اوربیتال های هیبرید شده  $sp^2$  کمی به فرم اوربیتال های هیبرید شده  $sp^3$  تبدیل می شود [۳۲].

اگر فرض کنیم سیلیکن ساختاری تخت دارد لوب های هر اتم بر صفحه سیلیکن عمود هستند و پیوند  $\pi$  با نزدیک ترین همسایه شکل می گیرد یعنی همچون گرافن هیبریدشدگی  $sp^2$  دارد و نزدیک ترین همسایه ها جفت شدگی قوی دارند و الکترون می تواند به راحتی به اتم دیگر تونل بزند ولی در سیلیکن خمیده لوب های هر اتم بر صفحه سیلیکن عمود نیست یعنی لوب های اتم های همسایه در جهت های مقابل قرار گرفته اند. بنابراین پیوند  $\pi$  فقط می تواند با دومین همسایه نزدیک شکل گیرد، اوربیتال های  $sp^2$  با  $sp^3$  ترکیب می شوند و  $sp^3$  به  $sp^2$  اولویت دارد و یک هیبریدشدگی  $sp^2-sp^3$  دوگانه به وجود می آید که باعث ضعیف شدن پیوند  $\pi$  و در نهایت ساختار خمیده سیلیکن می گردد [۳۳].

### ۳-۱ ژرمن

امروزه برای بهبود عملکرد ترانزیستورها پژوهش‌ها به سمت بررسی ژرمانیوم جهت یافته است. چرا که ممکن است ترانزیستورهای مبتنی بر آن در سرعت بالا و با توان مصرفی کم عمل کنند. همچنین ممکن است در آینده از فناوری نیم‌رساناهای غیر سیلیکونی استفاده شود. به‌عنوان یک تک لایه اتمی استخراج شده از ژرمانیوم صفحه ژرمن ساخته شده است که دارای خاصیت نیمه فلزی است [۳۴]. از آنجا که فلزات و نیمه فلزات سرعت کلیدزنی پایینی دارند، در حالت عادی نمی‌توان از آن‌ها در ترانزیستورهای اثر میدان  $EFT^1$  استفاده کرد. ایجاد یک گاف نواری قابل تنظیم بدون کاهش سرعت حامل‌ها می‌تواند راه استفاده از مواد دارای خاصیت مخروط دیراک را در نانو الکترونیک به سرعت هموار کند. در سال ۲۰۱۴ برای نخستین بار گزارش ساخت ژرمن روی بستر  $Pt(111)$  ارائه شد [۳۴]. به‌طور هم‌زمان ژرمن روی بسترهایی از جنس فلز و غیرفلز هم چون  $Au(111)$ ،  $MoS_2$  و  $ZnSe$  لایه‌نشانی گردید [۳۵].

در اینجا نیز باید گفت که ژرمن دارای ساختار لانه‌زنبوری است و بر خلاف گرافن، همچون سیلیکن دارای اندکی خمیدگی می‌باشد. آرایش اسپکتروسکوپی ژرمانیوم به شرح زیر است:

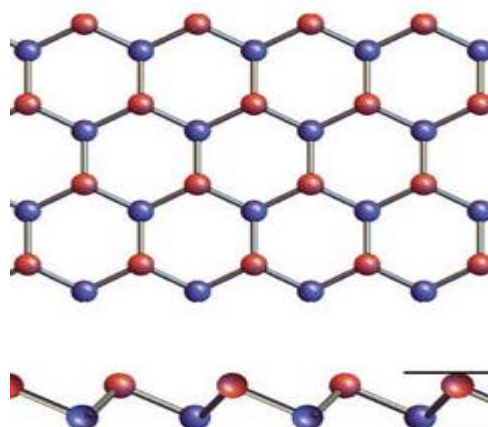
$$Ge = \frac{1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3d^{10} 4p^6}{\text{الکترون های مغزه}} \frac{4s^2 4p^2}{\text{الکترون های ظرفیت}}$$

که تأثیر اصلی الکترون‌های مغزه استتار پتانسیل هسته است.

### ۱-۳-۱ ساختار هندسی ژرمن

شکل ۱-۶ شکل هندسی ژرمن است که با استفاده از نرم‌افزار *Xcrysden* رسم گردیده است.

<sup>1</sup>Field-effect transistor



شکل ۱-۶ ژرمن لانه زنبوری دو بعدی (الف) نمایی از بالا (ب) نمایی از روبرو [۳۵].

پارامترهای ژرمن در جدول ۱-۱ بیان گردیده است:

جدول ۱-۱ پارامترهای ژرمن

| $a (\text{\AA})$ | $h(\text{\AA})$ | $d (\text{\AA})$ |
|------------------|-----------------|------------------|
| ۴/۰۴             | ۰/۷۱۲           | ۲/۴۴             |

$a$  ثابت شبکه،  $h$  پارامتر خمیدگی و  $d$  طول پیوند یا همان فاصله تا نزدیک‌ترین همسایه است. همان‌طور که در جدول ۱-۱ مشخص است طول پیوند در مقایسه با گرافن و سیلیکن بیشتر است چرا که شعاع اتمی ژرمانیوم از کربن و سیلیسیوم بزرگ‌تر است.

با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین مدار، گاف کوچکی در نقطه دیراک باز می‌شود. اما باز کردن گاف نواری تنظیم‌پذیر بدون از دست دادن تحرک حامل‌ها یکی از اساسی‌ترین مسائل پیش روی پژوهشگران بوده و به همین منظور چندین روش ارائه گردیده است. به‌عنوان مثال وقتی اتم‌های فلزات قلیایی و یا عناصر گروه چهارم جدول تناوبی روی ژرمن جذب شوند یک گاف نواری در نقطه دیراک باز شده که با کنترل اتم‌های جذبی و میزان پوشش آن‌ها، اندازه این گاف قابل تنظیم است [۳۶-۳۸].

وقتی میدان الکتریکی به ژرمن اعمال می‌شود، اتم‌ها آرایش قبلی خود را از دست داده، تقارن بین لایه‌ها شکسته می‌شود و خمیدگی ساختار آن تغییر می‌کند. به علت خمیده بودن ساختار ژرمن، وقتی این میدان