دانشکده فنی و مهندسی

گروه مهندسی برق

پایان نامه کارشناسی

گرایش: الکترونیک

عنوان:

مطالعه عددی خواص الکترونیکی ساختارهای در مقیاس نانو

استاد راهنما: دکترسیروس طوفان

نگارش: فرزاد خوئینی

تابستان 91

چکیده

در سال‌های اخیر توجه به علم نانو و قطعات دارای ابعاد نانو در اولویت‌های پژوهشی جهان قرار گرفته است. از سیستم‌های کوانتومی در ابعاد نانو مانند نانولوله‌ها، گرافن، حلقه‌های کوانتومی، نقاط کوانتومی و ... می‌توان در ساخت ادوات نانو در الکترونیک و اسپنترونیک استفاده نمود. نکته کلیدی در ساخت ادوات نانو، استفده از اثر تداخل کوانتومی می‌باشد.

در این نگارش ابتدا در فصل اول مروری بر قوانین مکانیک کوانتومی و پدیده‌های حاکم در آن خواهیم داشت. در فصل دوم وارد مبحث ترابرد الکترونی در ساختارهای دارای ابعاد نانومتر شده و در انتهای آن با استفاده از دو رهیافت "ماتریس انتقال" و "تابع گرین" به نحوه محاسبه مشخصه جریان – ولتاژ در این سیستم‌ها می‌پردازیم. در فصل آخر نیز با استفاده از روش‌های بیان شده بوسیله یک حلقه نانومتری دوتایی که به دو الکترود فلزی متصل است، یک دریچه منطقی NOR طراحی می‌نمائیم.

فهرست مطالب

فصل اول: مقدمه ای بر مکانیک کوانتومی

1-1- مقدمه‌ای بر مکانیک کوانتومی 1

1-2- احتمال و اصل عدم قطعیت 2

1-3- معادله موج شرودینگر 5

1-4- مسئله چاه پتانسیل 8

1-5- تونل زنی 11

فصل دوم: تعادل و ترابرد

2-1- حفره‌ها و الکترون‌ها 13

2-2- توزیع فرمی‌دیراک 16

2-3- ترابرد 21

2-4- بررسی نانولوله‌های کربنی 22

2-5- پدیده تونل زنی 28

2-6- رسانش لاندائور- بوتیکر 33

2-7- رهیافت‌های محاسبه جریان الکتریکی 41

فصل سوم: طراحی دریچه NOR با ورودی ایزوله با استفاده از حلقه‌های نانومتری

3-1- چکیده 51

3-2- توصیف مدل و نتایج عددی 51

منابع و مراجع 56

فصل اول: مقدمه‌ای بر مکانیک کوانتمی

۱-۱- مقدمه

اصول مکانیک کوانتومی تقریباً بطور همزمان (اواخر ۱۹۲۰) از دو دیدگاه متفاوت ارائه شد. یک رویکرد، ارائه شده از سوی هایزنبرگ[۱]، از ریاضی ماتریس‌ها بهره گرفته و مکانیک ماتریسی[۲] نامیده می‌شود. بطور مستقل شرودینگر[۳] رویکرد دیگری با استفاده از یک معادله موج معرفی کرد که امروزه، مکانیک موجی[۴] نامیده می‌شود. این دو فرمول بندی ریاضی کاملاً متفاوت به‌نظر می‌رسند. با این‌حال، بررسی‌های دقیق‌تر نشان می‌دهد که فراتر از شکل ظاهری، اصول اساسی هر دو رویکرد یکسان است. می‌توان نشان داد که به عنوان مثال، نتایج مکانیک ماتریسی بعد از عملیات ریاضی به نتایج حاصل از مکانیک موجی منتهی می‌شود. ما در اینجا بحث را بر روی مکانیک موجی متمرکز خواهیم کرد زیرا پاسخ یک سری مسائل ساده را می‌توان با بحث ریاضی کمتری از طریق آن بدست آورد.

---

۱ – Heisenberg

۲ - Matrix Mechanics

۳ - Schrodinger

۴ - Wave mechanics

۱-۲- احتمال واصل عدم قطعیت[۱]

توصیف کاملاً دقیق رویدادهای دربرگیرنده ذرات در مقیاس اتمی کاری غیرممکن است. به‌جای آن، باید از مقادیر متوسط (مقادیر انتظاری[۲]) موقعیت، اندازه حرکت و انرژی یک ذره مانند الکترون سخن بگوییم. باید توجه داشت که عدم قطعیت ظاهر شده در محاسبات کوانتمی دلیل بر وجود نقص در نظریه نیست. در حقیقت، قدرت اصلی نظریه در توصیف طبیعت احتمالی رخدادهای شامل اتم‌ها و الکترون‌ها است. مقدار این عدم قطعیت ذاتی توسط اصل عدم قطعیت هایزنبرگ بیان شده است:

در هرگونه سنجش موقعیت و اندازه حرکت یک ذره، عدم قطعیت‌های دو کمیت سنجیده شده توسط رابطهٔ:

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \hbar \qquad (۱-۱)$$

با یکدیگر مرتبط خواهند بود.

به‌طور مشابه، عدم قطعیت‌ها در یک سنجش انرژی با عدم قطعیت زمان انجام سنجش توسط رابطه:

$$(\Delta E)(\Delta t) \geq \hbar \qquad (۱-۲)$$

به هم مربوط می‌شوند.

این محدودیت‌ها نشان می‌دهند که سنجش هم‌زمان موقعیت و اندازه حرکت، یا انرژی و زمان بطور ذاتی دارای دقت کافی نخواهند بود. البته ثابت پلانک عددی نسبتاً کوچک است

---

۱ - Uncertainty Principle

۲ - Expectation values

$(6.63\times10^{-34}\,J-s)$ و ما در مورد مثلاً یک کامیون با این عدم دقت در اندازه‌گیری p_x, x مواجه نخواهیم بود. حال آنکه سنجش موقعیت یک الکترون و سرعت آن به سختی توسط اصل عدم قطعیت محدود می‌شود.

یکی از تعابیر اصل عدم قطعیت اینست که نمی‌توانیم، بعنوان مثال، با اطمینان از موقعیت یک الکترون سخن بگوییم، بلکه باید در پی احتمال یافتن الکترون در یک موقعیت معین باشیم. بنابراین یکی از نتایج مهم مکانیک کوانتمی اینست که میتوان یک تابع چگالی احتمال[۱] برای ذره‌ای در یک محیط معین بدست آورده و از آن برای تعیین مقادیر انتظاری کمیات مهم مانند موقعیت، اندازه حرکت و انرژی استفاده کرد. ما با روشهای محاسبه احتمالات گسسته (تک مقداری) از آزمونهای معمولی آشنا هستیم. مثلاً واضح است که احتمال بیرون کشیدن یک ورق از بین یک دسته ورق بازی $\frac{۱}{۵۲}$ و احتمال آمدن یک روی سکه $\frac{۱}{۲}$ است. با این وجود، با روشهای پیش‌بینی وقتیکه احتمال تعریف میشود که مثلاً احتمال یافتن ذره‌ای را در یک حجم خاص ذره در محدودهٔ از x تا x+dx برابر با P(x)dx است. چون ذره به هر حال در نقطه‌ای قرار دارد، این تعریف لازم میدارد که در صورت انتخاب صحیح تابع P(x):

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x)dx = 1 \qquad (۳-۱)$$

در معادله (۵) تابع P(x) بهنجار[۲] شده است. (به عبارت دیگر، انتگرال مساوی واحد است).

برای تعیین مقدار متوسط تابعی از x، تنها لازمست مقدار تابع را در هر افزایش dx در احتمال یافتن ذره در این فاصله ضرب کرده و روی تمام xها مجموع بگیریم. پس مقدار متوسط f(x) عبارتست از:

---

۱ - Probability density function

۲ - Normalized

$$< f(x) >= \int_{-\infty}^{\infty} f(x)P(x)dx \qquad (۴-۱)$$

اگر تابع چگالی احتمال بهنجار نشده باشد، معادله فوق باید چنین نوشته شود:

$$< f(x) >= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)P(x)dx}{\int_{-\infty}^{\infty} P(x)dx} \qquad (۵-۱)$$

۱-۳- معادلهٔ موج شرودینگر

راه‌های متعددی برای بدست آوردن معادله موج از طریق اعمال مفاهیم کوانتمی به معادلات مختلف مکانیک کلاسیک وجود دارد. یکی از ساده‌ترین روش‌ها، در نظر گرفتن چند فرضیهٔ اساسی، بدست آوردن معادلات موج از آن‌ها، و اتکا به دقت نتایج بعنوان تحقیق درستی فرضیه‌هاست. در متون پیشرفته‌تر این فرضیه‌ها با جزئیات متقاعد کننده‌تری مورد استفاده قرار گرفته‌اند.

فرضیه‌های اساسی[۱]

۱- هر ذره در یک سیستم فیزیکی توسط یک تابع موج $\psi(x,y,z,t)$ مشخص میشود. این تابع و مشتق فضایی آن $(\frac{\partial\Psi}{\partial x}+\frac{\partial\Psi}{\partial y}+\frac{\partial\Psi}{\partial z})$ پیوسته، معین و تک مقدار[۲] هستند.

۲- در موقع کار با کمیات کوانتمی از قبیل انرژی E و اندازه حرکت P باید آنها را به عملگرهای[۳] مکانیک کوانتمی ربط دهیم که چنین تعریف می‌شوند:

---

۱ - Basic Postulates

۲ - Single- Valued

۳ - Operator

منابع و مراجع

[۱] فیزیک الکترونیک، بن.جی.استریتمن ، ترجمه غلامحسن روئین تن ، سعید صمدی، انتشارات دانشگاه علم و صنعت

[2] Dirac, Paul A. M. (1926). "On the Theory of Quantum Mechanics". Proceedings of the Royal Society, Series A 112 (762): 661-77.Bibcode doi:10.1098/rspa.1926.0133.

[3] Dirac, Paul A. M. (1967). Principles of Quantum Mechanics (revised 4th ed.). London: Oxford University Press. pp. 210–1. ISBN 978-0-19-852011-5.

[4] E.N.Economou, Greens Functions in Quantum Physics, Springer, Germany, 84 (2006)

[5] R. Saito, G. Dresselhaus,M.S. Dresselhaus Physical properties of carbon nanotubes, Imperial College Press, London, 44 (1998)

[6] P. S. Davids, Phys. Rev. B 52, 4146 (1995)

[7] F. Duan and J. Guojun, Introduction to condensed matter Physics, World scientific, 220 (2005)

[8] M. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer and S. Pinhas, Phys. Rev. B 31, 6207 (1985)

[9] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Cambridge University Press, Cambridge, (1997)

[10] M.Mardani, A.A.Shokri, K.Esfarjani, Physica E 28 150, (2005)

[11] A.A. Shokri, M. Mardaani, K. Esfarjani, Physica E 27, 325 (2005)

[12] M. P. L. Sancho, J. M. L. Sancho, and J. Rubio, J. Phys. F: Met. Phys. 14, 1205 (1984)

[13] M. B. Nardelli, Phys. Rev. B 60,7828 (1999)

[14] Y. Imry and R. Landaure, Rev. Mod. Phys. 71,S306(1999)

[15] D. S. Fisher and P. A. Lee, Phys. Rev. B 23, 6851(1981)

[16] Y. Meir and N. S. Wingreen, Phys. Rev. Lett. 68, 2512 (1992)

[۱۷] خوئینی فرزاد، خوئینی فرهاد، حلقه کوانتومی دوتایی به عنوان دریچه NOR، شانزدهمین گردهمایی فیزیک ماده چگال، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، ۶ و ۷ خرداد ۱۳۸۹