

علم النانو وتقنياته

Nanoscience and Technology

الموضوع

بحث حول

الفيزياء التطبيقية لأنابيب النانو الكربونية

Applied Physics of Carbon Nanotubes

S.V. Rotkin

ترجمة

المركز العلمي للترجمة

www.trgma.com



المقدمة

كان (ساميو لايجيما) أول من رأى الأنابيب النانوية في متعددة الطبقات في 1991. في المجهر الالكتروني. وبعد عامين قام مع (دونالد بيثيون) بصنع أول أنبوب أحادي الجدار (SWNT) ومنذ ذلك الوقت والتطور جار في فهم نوعي أنابيب الكربون وفهم خصائصها. التي ستقدم مستقبلا إنتاجية كبيرة في الناحية الصناعية. وهذا التطور سيؤدي قريبا إلى إنتاج عينة متجانسة من أنابيب الكربون النانوية بأقطار صغيرة ولن يكون بعيدا خاصة في الأنابيب الأحادية.

ويحاول العلماء في إمكانية تداخل الأنابيب النانوية. ويجري صنع أنابيب نقية ذات علاقات كيميائية أو كيميائية حيوية. ولأنها توصف بقدرتها على احتواء الذرات والجزيئات مثل (PEAPDS) والتفاعلات الكيميائية لذلك هي ذات أهمية كبيرة. ومع هذا التطور كان هناك سباق في محاولة فهم خصائصها الأمر الذي لا يستبعد إمكانية وجود أنابيب مميزة ذات خصائص ميكانيكية وكهربائية وحرارية وبصرية. ويبحث العلماء على إيجاد طائفة من التطبيقات التكنولوجية للاستفادة من هذه الخصائص. فعلى سبيل المثال فان الخواص الميكانيكية المميزة تدخل في صنع بعض المركبات القوية. ويمكن توظيفها في صنع لوحات تحكم أجهزة النقل الالكتروني مثل ترانزستور (SWNT) التي أثبتت تفوقها على أجهزة السليكون.

إن استخدام الأنابيب النانوية يزداد يوما عن يوم. وليس بعيدا أن نقول أنها ستصبح إحدى المواد الأساسية في القرن الحادي والعشرين.

وهذا الكتاب وضعه مجموعه من الخبراء لاستعراض ما هو جديد في هذا العلم. وفي فصل "النظرية والنموذج" يناقش فيه المؤلف الظواهر الكلاسيكية والكمية لمختلف الأجهزة ذات أنابيب أحادية الجدار. وتحليل صفات التيار والجهد الكهربائي في قنوات الأنابيب الأحادية وفي عمل ترانزستور تأثير المجال (FET) واستمداد التحليل من الطابع الهندسي و على السعة الكمية للأنابيب الأحادية. والبحث في نتائج التغيرات في التركيب الالكتروني في التفاعل (نقل الشحنة) بين الأنابيب الأحادية. والنتيجة كانت هي فصل التماثل المحوري للأنابيب الأحادية.

وقال انه سيبحث في إمكانية هندسية لعمل (فجوة - مجال) (BAND – GAB) عن طريق مجال كهربائي خارجي. و وجد انه قادر على عمل فجوة-مجال في مواد الأنابيب و قادر أيضا على سد الفجوات في أنابيب أشباه الموصلات. كأفكار لأجهزة الكترونية جديدة أصبحت موجودة حاليا.

وسنعرض بالتفصيل التشابه والاختلاف في التركيب الالكتروني للأنابيب الأحادية والثنائية الكثافة.. وبعض نتائج مقارنة نظرية (الشد - الربط) (TIGHT – BANDING) البسيطة ونظرية وصف الكثافة. وناقش امتصاص الأطياف البصرية في الأنابيب النانوية. ودراسة الأطياف الحمراء والرامان (RAMAN) و فونونات الأنابيب الأحادية. وأخيرا دراسة التفاعلات بين جدران الأنابيب الثنائية.

وفي فصل " التجميع و الوصف" يناقش به آخر التطورات في عملية التحكم في تجميع الأنابيب الأحادية. بينما يمكن أن ينتج خلط الأنابيب النانوية الغير متجانسة في عدة تطبيقات. مثل التطبيقات عالية التقنية الموجودة في الالكترونيات ذات الحاجة للسيطرة على الطول والاتجاه في الأنابيب الأحادية؟

وأظهر المؤلفون علاقة قوية بين حجم المواد المحفزة والقطر الناتج في الأنابيب الأحادية في زيادة التكثيف الكيميائي (CVD). ويؤيدون أن تحديد الاتجاه في الأنابيب يكون من تفاعل الغازات. وطرق الـ (CVD) تقوم على التدفق السريع للغازات وعلى التسخين السريع في تفاعل الغازات مع المواد المحفزة. وهذا الإصدار من الـ (CVD) يؤدي فقط إلى تكبير الاتجاه في هياكل الأنابيب الأحادية. لكنها تزيد من طول الأنابيب بضع سنتيمترات.

وبعد ذلك نوقش التركيب وخصائص الـ (PEAPDS) كالتالي تكونت من امتصاص التلألؤ من قبل الأنابيب النانوية. وخصائص البيانات الهيكلية والكهربائية لـ (PEAPDS) و انحراف الالكترونات. وإمكانية استخدام الأنابيب الأحادية كحاويات للتفاعلات الكيميائية. وكيفية استخدام القياسات الطيفية والامتصاص والتلألؤ والرامان لدراسة التفاعلات التساهمية ونقل الشحنات بين الأنابيب والجزيئات الصغيرة. ونوقشت أيضا أمثلة تتضمن التفاعلات المختارة بين مادة الأنابيب وجزيئات "الديزانيوم" على شكل رابطة كربونية أحادية واقتراها بجران الأنابيب الأحادية واختيار أجزاء موجبة الشحنة للأنابيب مع وجود الأكسجين.

وفي فصل " الطيف الضوئي " قام (سايمون) بالتركيز فيه على الأنابيب الثنائية. وناقش هيكل الأنابيب الكربونية باستخدام أطيف الرامان على أنها أساس العملية التي تقوم من خلالها إدراج C60 في الأنابيب الأحادية مثل الـ (PEAPDS) التي تتحول خلال الأنابيب الثنائية عبر تسليط حزمة الكترونات ذات طاقة عالية من أطيف الرامان لتدل على أن جدران الأنابيب الداخلية في الأنابيب الثنائية ذات هيكل تامة وتستخدم الشقوق لتفسير التفاعل بين الأنابيب.

وقدمت التفاصيل في انبعاث الأطيف من الأنابيب النانوية والتلألؤ الناشئ من المستويات المثارة في الأحادية بشكل أسهل من المستويات الأعلى على شكل رنين. وشرح أيضا التلألؤ على أنه حاصل بسبب إثارة المستويات أو حصول رنين في أطيف الرامان المنتشرة في الأنابيب الأحادية. ويمكن وصف احد تقرينات المستوى (n,m) لوصف هيكل الأنابيب. وأشار أيضا إلى نسب الطاقة وأنه ممكن أن تختلف عما هو متوقع للاكترون الواحد في نظرية الشد- الربط. ووجد أن البيئة المحيطة بالأنابيب يمكن أن تؤثر في قيمة الإثارة العظمى ودعم كلامه بكمية من الالكترونات المثارة.

أما في فصل " تطبيقات في أجهزة النقل و الالكترونات و الالكترونات البصرية والأجهزة الكهربائية" تمت مناقشة خصائص الهيكل الالكترونية و الكهربائية و بعض أجهزة التطبيق في الأنابيب الأحادية. وبشكل خاص على ترانزستورات تأثير المجال ذات الأنابيب الأحادية (SWNT FET) وعمل مفاتيح الأجهزة و خصائص النيوترونات و البروتونات من خلال المقارنة مع ترانزستور (MOSFET) في المعادن العادية. والدور الرئيسي لحواجز شوتكي (schottky) والتأثيرات البيئية على أداء الترانزستور. ثم مناقشة طبيعة المستويات المثارة في الأنابيب النانوية وخصائصها الكهروضوئية. والضوء المنبعث من الأنابيب الأحادية وأجهزة الكشف الضوئي. وشرح هيكل ترانزستور (SWNT FET).

ويقترح المؤلفان دمج تقنيات الالكترونات مع التقنيات الكهروضوئية في الأنابيب الأحادية. واقترح أيضا مناقشة التفاعلات في الأنابيب الأحادية مع أنظمة الحبود على أنها مهمة حيث تسمح بالتلاعب و فرز الأنابيب

الأحادية وأنها يمكن أن تستخدم كأساس للجزيئات الحيوية في أجهزة الاستشعار. واقترح مناقشة الحمض النووي DNA بالأنابيب الأحادية. وان هذه التفاعلات يمكن استخدامها في فصل المواد المعدنية.

ويقترح المؤلفون تقديم أدلة على أن تحديد نوع الأنابيب الأحادية يجب أن يعتمد على قطرها بطريقة ما. واقترحوا أيضا طرقا مختلفة في تحديد نوع الأنابيب عن خصائص بروتونية لها. وتوضيح استخدام الأنابيب في أجهزة الاستشعار الحيوية باستخدام بعض المواد مثل مادة (sytochrme carbon) على سبيل المثال.

وفي النهاية نوقشت مجموعة متنوعة من التجارب الكهربائية والميكانيكية على الأنابيب متعددة الطبقات (MWNTs) وأنابيب نتريد البورون (BNNT) وتشمل على القشرة الخارجية لها وتصغير الأنابيب المتعددة داخل المجهر الإلكتروني.

وأنهم استخدموا تصغيرا لـ (MWNTs) لدراسة قوة الاحتكاك على مستوى النانوي وحساب الاحتكاك الحركي والسكوني للعناصر المستخدمة. كما أنها تستخدم نفس العملية لحساب طول الأنابيب الكربونية حسب الظروف الموجودة فيها ووجدوا أن المقاومة تعتمد على طول الأنابيب.

وناقش (فيشر) المؤلفان عن الخصائص الميكانيكية للأنظمة النانوية المتغيرة التي تسمح بالتلاعب في الأنابيب والهياكل النانوية في الأبعاد الثلاثة. كما أنها وصفت الخصائص الميكانيكية مثل قدرتها على تحمل الشد للأحادية والمتعددة الطبقات وميكانيكية تشكيل لفائف (حلقات حلزونية) نانوية ونتائج اختبارات سحب أنابيب أحادية من مجموعة بوليمرات.

استهلال

منذ اكتشاف الأنابيب النانوية قبل 15 عام يقوم العلماء من شتى النواحي البحثية بالعمل على هذه التقنية. وقد لوحظ التقدم في مختلف مجالات العلوم مثل تطبيق هذه التقنية على مواد جديدة مبتكرة.

وفي الحقيقة ومنذ اليوم الأول لاكتشافها كان واضحا أن العلماء سيستخدمون الأنابيب الكربونية في دراسة الخصائص الكهربائية في تخزين صفائح كربونية لها خصائص فيزيائية وميكانيكية مهمة للغاية. لذلك في عام 1993 احتلت أنابيب الكربون موقعا مميذا عندما وصلت المجموعات البحثية من (NEC) و شركة (IBM) عندما اكتشفوا الأنابيب الأحادية والبحث عليها جار منذ ذلك الوقت للعثور على أساليب مختلفة لإنشاء هياكل لأنابيب تصلح لكافة الاستخدامات في أن واحد.

وقد وضعت مجموعة من الكتب في الآونة الأخيرة تتحدث بشكل رئيسي عن الأبحاث الجارية على الأنابيب الكربونية. وبعض مواضيع هذا الكتاب تتناول أهم التطبيقات والخصائص الفيزيائية والكيميائية للأنابيب. وبعضها الآخر هي أفكار نظرية يمكن تطبيقها في المستقبل. ومن الواضح أن أنابيب الكربون (وبالأخص الأنابيب النانوية الإلكترونية ذات الخصائص الإلكترونية المميزة) ستحل محل السليكون في الأجهزة المعلوماتية في

المستقبل. بالتالي فان دخولها في أجهزة المستقبل هي ثورة علمية ضخمة وستختفي حينها تقنيات السليكون التقليدية.

وفي بعض فصول هذا الكتاب تم تناول التحديات المرتبطة بأنابيب الكربون وتحديات إيجاد طرق محددة في تصنيع الأنابيب ذات خصائص مميزة. والطرق العملية في تصنيع أنابيب جيدة وتحديد مقاييس خصائص الأنابيب وطرق التعامل مع الأنظمة الالكترونية وخصائصها وكيفية استخدامها.

ومن الواضح أن المؤلفين قد قاموا بعمل ممتاز في مختلف المجالات ومختلف جهات النظر على أمل إفادة القارئ من أقسام الكتاب.

الجزء الأول: النظرية والنموذج

1. من النماذج الكمية إلى الانجازات الحديثة إلى التطبيقات الجديدة:

نظريات آلات الأنابيب النانوية:

أن التغيرات في الأنابيب النانوية أمر ظاهر. وعلى وجه التحديد أنظمة الحواجز (screening) ذات بعد واحد (1-D) فإنها تكفي عن كل الأجهزة التي تعتمد على تأثير المجال. الأمر الذي يؤدي إلى الاعتماد على الناحية الهندسية أكثر من غير عنصرين: لأجهزة المستخدمة في الحسابات النانوية لا بد أن تحتوي على عنصرين: السعة الهندسية (كلاسيكية) والحد الكمي. والحد الكمي مرتبط بكثافة الأوضاع في النظام النانوي. لكن إيجاد كثافة الأوضاع في ظل وجود مؤثرات خارجية أمر صعب. ولذلك سنضع في بعض أمثلتنا افتراضات على هذه المؤثرات.

يمكن استخدام المجال الكهربائي في عمل فجوة هندسية في الأنابيب النانوية. واقتراح مفهوم الترانزستور (FET) المعدني الموجود نظريا والهام في التطبيق.

1.1 مقدمة: النماذج الكلاسيكية بالمقارنة مع النماذج الكمية

إحدى التوقعات في تقنية النانو ما توقعه (فينمان) عام 1959 وهو إمكانية الوصول للخصائص الكمية للمادة. قد تؤدي لاستحداث أجهزة جديدة وتطبيقات جديدة غير موجودة على المستوى المايكروبي.

وفي هذه الوحدة سنستعرض بعض الأمثلة والظواهر والتقريبات بين الكلاسيكية والكمية باستخدام أحدث النتائج على نماذج الأجهزة المعتمدة على الأنابيب النانوية.

تمثل الأنابيب النانوية الآن طبقة جديدة من المواد الالكترونية. أن الخصائص الالكترونية تعتمد على تماثل الأنابيب النانوية وهذا أمر عادي. لكن في الأنابيب الأحادية يوجد معيارين أساسيين نوا طابع هندسي: تقوس



(انحناء) الشعاع R , و الزاوية اللولبية (مقياس كائيراليه لشبكات الأنابيب الأحادية) التي تحدد خصائص النقل والخصائص البصرية والخصائص الكيميائية إلى حد ما للأنابيب الأحادية.

ومن معرفة هذين المعيارين يمكننا تقسيم الأنابيب إلى عدة فئات متميزة. حيث أن ثلاث أرباع لها مجال فجوة محرم, الأمر الذي يجعلها أشباه موصلات. أن مجال الفجوات في أنابيب أشباه الموصلات يقع في منطقة الضوء المرئي (قرب IR والمرئي) حسب قيمة R . وأكدت التجارب على مجموعة من R أن طاقة الفجوة تتناسب طرديا مع مقدار تقوس الإشعاع $1/R$. وهذا دليل واضح على كمية بسيطة من التكميم الفراغي للإلكترون. وعند الدوران حول محيط الأنبوب فان الإلكترون يدخل في طور معين. وبعد عمل دورة كاملة فان الطور يصبح 2π وهذا ما يسمى شروط التكميم.

أن تكميم الطاقة يحدد الفرق بين التوصيل و مستويات التكافؤ, بالتالي يحدد الفجوة البصرية وبطريقة مشابهة حيث أن الحجم الذري (العدد الذري) لعنصر في الجدول الذري يحدد خصائص هذا العنصر. وانحناء الشعاع و الزاوية اللولبية في الأنابيب الأحادية يحددان الخصائص الالكترونية للمواد.

والثلث الباقي من الأنابيب الأحادية تكون ذات فجوات متقاربة تسمى (أشباه معادن). الفرق في حجم الفجوة بين النوعين يظهر في التربيع $1/R^2$, فالفجوات في أشباه المعادن تقاس بـ γ/R^2 حيث أن $\gamma \simeq 2.7 \text{ eV}$. وتعطي مقياسا للطاقة في الأنابيب النانوية. وهذا التربيع يقسم الأنابيب الأحادية (أشباه الموصلات) إلى قسمين فرعيين حسب مقدار كائيراليه لهما. وكل هذا يشكل الجدول الدوري للأنابيب النانوية.

والخاصية الأخرى الهامة تعتمد على أبعادها الثلاثة. فقد نظرنا سابقا إلى الانحناء و مقدار كائيراليه للأنابيب ولم نأخذ الطول بعين النظر. فمن النجاحات التي تحققت حديثا في صنع الأنابيب الكربونية هو إمكانية الدراسة العملية للأنابيب ذات طول بضع مئات الألواف من الميكرون, وانحناء. أي ما نسبته 1:100 000 فأكثر. وهذا بلا شك يظهر فقط في سلك له بعد واحد.

وعلى سبيل المثال: الحواجز الضعيفة فخصائصها في الأنابيب النانوية لها فوائد كبيرة في الاجهزة الالكترونية.

أن عمق النطاق الواسع في الهياكل الفيزيائية منخفضة الأبعاد لهل ارتباطات قوية بسبب الحواجز الضعيفة في التفاعل الكهربائي في انظمه الأبعاد المنخفضة. وبالفعل فان تخفيض النظام من البعد الثالث إلى الثاني يعطي سماحيه أفضل لفحص طول اكبر (أي في البعد الثاني في هذا المثال). وهذه النتائج تعطي دليلا آخر على هذه الحالة, فعندما يكون الطول اكبر من أي حجم انتقالي في سلك فان هذا التأثير الكلاسيكي سيعرض ليعبر عن نفسه فقط وكنتيجة لعدم الكلاسيكية في أداء الجهاز.

وفي الجزء التالي سنستعرض نوعين من أجسام البعد الواحد: الأسلاك النانويه شبه الموصلة (NWS) وأنابيب الكربون ذات الأسس المشتركة. لان خصائص الحواجز للأنظمة متشابهة جدا. ويمكن تطوير الأجهزة العالمية من الناحية النظرية تحت ظروف معينه.

أن التقريب الكمي ملائم أكثر في الأنظمة النانوية وأكثر تبسيطا, فالنماذج الكلاسيكية قد تكون مفيدة أيضا في فهم خصائص المواد وسلوك الأجهزة إذا كانت هذه النماذج مؤيده من النظريات المايكروية ولإعطاء مثال: نماذج

حزم أسلاك الأنابيب النانوية والأنظمة الكهروميكانيكية النانوية (NEMs) والتي تحتاج لمعرفة مدى مرونة المادة. وبشكل واضح في الكلاسيكية فان المرونة قد تتهاور في هذه المستويات. واستخدام ديناميكية الجزيئات الذرية لمحاكاة الاستجابة الميكانيكية تعطي وصفا لصلابة الأنابيب. ثم ستستخدم هذه الصلابة في نماذج مستويات التسلسل الكلاسيكي للأنظمة الكهروميكانيكية النانوية ومرافقه مع حسابات الأنظمة للمستويات الذرية الكمية مع نماذج مستويات التسلسل الكلاسيكي بتقريب تعدد المقاييس, وهذا ما سنقدمه الآن.

1.2 الشروط الكلاسيكية: أنظمة الحواجز الضعيفة في بعد واحد

إن العديد من أجهزة الأنابيب والأسلاك النانوية الالكترونية لها هندسية مشتركة في البعد الواحد للترانزستور (FET) من حيث توصيلات القنوات في البعد الواحد للأقطاب الكهربائية لمعدنين وفصلها بطبقة عازلة. والخاصية المهمة لكل هذه الأجهزة هي النسبة بين مقدار حجم النقل (قطر الأنبوب) وطول الحاجز في المادة. وهكذا فالكهرباء السكونية للنظام هي نفسها لأسلاك البعد الواحد. وقد تقبل بعض النماذج في حساب كثافة ناقل الشحنة وطريقة توزيعه في القنوات بشكل صحيح. وفي هذا الجزء سنتحدث عن محاكاة كثافة الشحنة في بعد واحد للترانزستور (FET) ودور الحواجز الضعيفة في بعد واحد.

في عملية عزل وتوضيح ضعف الحواجز لم نعالج نماذج النقل البلاستية في هذا القسم ز فالصورة البلاستية قد تكون واضحة جدا ما لم تكن عقد التحيز (bias) و/ أو بوابة الجهد منطبقان و تشتت الطول يصبح اقصر من طول القناة. وفي المقابل، فان نتائج هذا القسم قد تكون واجبة التطبيق لـ (NT FET) حيث أن لمعظمها طول تشتت قصير.

ومن المعروف أن حواجزه الضعيفة في الهندسة مهمة لخصائص الجهاز. فالنماذج الهندسية لـ (FET) في البعد الواحد سنعتبرها شاملة لحاصل ($x < -L/2$) والإزاحة ($x > L/2$) لتوصيل قنوات طولها (L) يفصل بينها طبقة رقيقة من عازل سمكه (d). وسنعتبر أن القنوات مطعمة (مضاف إليها شوائب) بشكل منظم وكثافة محددة لتلك الشوائب (N). جهد البوابة V_g يغير كثافة الشحنة في قنوات النقل في (FET) وسنوظف نماذج (الانسياب والاندماج) (drift-diffusion) نسبة التشتت للقنوات كافية لدعم توازن الشحنات الداخلية.

1.2.1 معادلة الانسياب والاندماج وشبه توازن كثافة الشحنة

علينا أن نقيس كل الجهود من منتصف السلك $x = 0$ وجهد المصدر والإزاحة $\pm Va/2$ في هذه الحالة يكون توزيع الجهد والشحنة على طول السلك ناتجا عن كلا الجهد (V_g) الزوجي و (V_d) الفردي على التوالي . فالاقترانات الزوجية والفردية ل (x) تحدد بالرموز السفلية (s) و (a): $(\phi_{s,a}(x))$ و $(n_{s,a}(x))$.

الجهد $\phi_{s,a}(x)$ يمكن أن يقسم إلى جزأين $\phi_{s,a}^0(x)$ الناتج من الأقطاب ومن معادلة لابلاس التي تحوي إلكترون غير مشحون و $\phi_{s,a}^1(x)$ الناتجة من شحنة في السلك $-en_{s,a}(x)$.



وسنفرض أن الشحنة لوحدة الأطوال موزعة على طول السلك، وقد يتجاوز طول (R) أحيانا، وفي هذا الحالة فإن العلاقة بين $n(x)$ and $\phi^1(x)$ تكون خطية تقريبا والتيار (j) يحوي مركبات الانسياب والاندماج التي يمكن وجودها في الأسلاك النانوية لأشبهه الموصلات مع حاملات شحنة غير مستتبطة (non-degenerate) كما يلي:

$$\frac{j}{e\mu} = n(x) \frac{d\phi^0}{dx} - \left[\frac{2e}{\varepsilon} \ln \left(\frac{l}{R} \right) n(x) + \frac{kT}{e} \right] \frac{dn}{dx} \quad <1.1>$$

حيث أن $\phi^0 = \phi_s^0 + \phi_a^0$ ، $n = n_s + n_a$ و μ هي الناقلية و ε هي السماحية الفراغية.

وفي الأنابيب النانوية ذات $N = 0$ والحاملات التي لها نفس الطاقة (degenerate) فإن (KT) سيستعاض عنها بتركيز طاقة فيرمي. ونتيجة لذلك فالحد داخل الأقواس في المعادلة 1.1 سيتغير إلى $en(x)C_t^{-1}$. حيث (C_t) هي السعة الكلية للأنابيب النانوية التي نحصل عليها من تجاوز التقريب الكلاسيكي. وفي هذا القسم سنعتبر (C_t) مقياسا للنماذج في مختلف المقاييس المتعددة (بالتفصيل في القسم التالي 1-3).

سنحل المعادلة التفاضلية 1.1 بالشروط الحدية التالية $n(\pm L/2) = n_c$ على اعتبار ان كثافة الشحنة ثابتة ومتصلة . دون الاعتماد على تطبيق الجهد . وهناك شرطان حديان يسمحان لنا بحساب قيمة التيار (j) . بفرض بعض الثوابت المعلومة.

في حالة $n_c = N$ الاومية (ohmic) غير موزعة للخصائص الكهربائية في السلك $n_c > N$ تصف الحالة التي تكون فيها حاملات الشحنة مدعومة من الأقطاب الكهربائية و هي الحالة الغالبة في الأنابيب النانوية، و $n_c < N$ تصف اتصال تشوتكي (schottky) في هذه الحالة (j) يحدد من مناطق اتصال مع اقل كثافة شحنة (n_c) و غير معتمدة كثيرا على (V_g) . هذا وصف كاف لنظرية الاندماج والانسحاق الكلاسيكية فيكون الموصل ناقلا ضعيفا (transconductance).

وهذه الحالة الوحيدة المهمة عندما تكون حاملات تشوتكي ملحوظة وتعتمد كثيرا على (V_g)

1.2.2 الموصلية الخطية والموصل الناقل

في المعادلة 1.1 يمكن عمل (linearized) ل (n_a) ثم مكاملتها بسهولة. لمعرفة $n_a(x)$ التي تعطينا تعبيراً ل (j) في الأسلاك (NW FET) $A \equiv (2e^2 N / \varepsilon kT) \ln(l/R) \gg 1$ كنتيجة لقانون كيرتشفوف الأول 1.2 وتكون المقاومة



$$R = \frac{2}{e\mu} \int_0^{L/2} \frac{dx}{n_s(x)} \quad <1.3 >$$

وهذا ليس غريبا في الشرط $A \gg 1$ والتي تكفي لرفض مركبة الاندماج للتيار ونفس المعادلة صالحة في الأنابيب (NT FET) حيث

$$n_s = -C_t \varphi_s \quad (1.4)$$

وهكذا فهذا الوصف يصلح لكلا الحالتين (الأنابيب و الأسلاك) في (V_d) , لوصف حالة (التيار و الجهد) $j(V_d)$ (IVC) يتطلب إيجاد الحل للمعادلة الغير خطية .

إن خصائص الأجهزة الخطية تعتمد على توازن كثافة الشحنة أو على الجهد $\phi^0(x)$, والنتائج الخاطئة في الدراسة لهذا السبب .ولان كل الأجهزة تعتمد على خصائص الهيكل الهندسية .

وفي هذا الفصل سنعتمد على الأبعاد الثلاثة (R,L,d) . ولحساب $\Phi(x,y)$ ولتبسيط نتائجنا سنفرض ان $d \ll L$ ومن ثم سنحل معادله لابلاس $\Delta\Phi = 0$

في حاله شبه محدودة $-L/2 < x < L/2; y > 0$ عند الشروط الحدية $\Phi(y=0) = V_g; \Phi(x = \pm L/2) = \pm V_d/2$ وعلى اعتبار ان $(y = d)$ سنجد $\phi_{s,a}^0(x)$ لكل $n_c \neq N$. والجهد الذي يحوي $\phi_c(x)$ يتناسب طرديا مع $(N - n_c)$ ويصف الجهد لشحنه موزعه بانتظام في السلك . وهذا الجهد مع الحدود التي تصف المركبتين الزوجية والفردية تعطى بالعلاقتين:

$$\phi_s^0(x) = \frac{8e(N - n_c)L}{\pi^2 \varepsilon R} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \{K_0 \left[\frac{\pi R}{L} (2n+1) \right] - K_0 \left[\frac{2\pi d}{L} (2n+1) \right]\}}{(2n+1)^2 K_1 \left[\frac{\pi R}{L} (2n+1) \right]} \quad (1.5)$$

$$\times \cos \left[\frac{\pi x(2n+1)}{L} \right] + \frac{4V_g}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)} \cos \left[\frac{\pi x(2n+1)}{L} \right] \exp \left[-\frac{\pi d(2n+1)}{L} \right];$$

$$\phi_a^0(x) = V_d \left[\frac{x}{L} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\pi n} \sin \left(\frac{2\pi x n}{L} \right) \exp \left(-\frac{2\pi d n}{L} \right) \right], \quad (1.6)$$

حيث K_0 and K_1 هي اقترانات بسل (Bessel) للأعداد التخيلية.

وفي الحالة الخطية $A \gg 1$ فان المعادلة 1,2 تحوي وصفا لموصلية القنوات اللاوحدية (dimensionless) : $\sigma = jL/(n_c e \mu V_d)$

$$\sigma = \left[2 \int_0^{1/2} \frac{dt}{1 + g\Psi(t)} \right]^{-1} \quad 1,7$$

حيث :

$$g = \frac{2\varepsilon V_g}{[\pi e n_c \ln(l/R)]} \quad 1,8$$

هي بوابه الجهد ل $n_c = N$

$$\Psi(t) = \sum_0^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)} \cos[\pi t(2n+1)] \exp[-\pi d(2n+1)/L] \quad 1,9$$

و $\sigma(g)$ تعتمد على جهد القطع $g_0 = -\Psi^{-1}(0)$, وأهميه σ عندما تكون قربه من جهد القطع وهنا يمكن حسابها . وتحسب عند $(x = 0)$ (عندما تكون كثافة الشحنة ذات قيمه صغرى) ومن ثم من خصائص $\Psi(t)$ عند (t) صغيره , أي يمكن

$$\Psi(t) \simeq \frac{\pi}{2} - \arctan[\exp(-\pi d/L)] - \frac{\pi^2 t^2}{2} \frac{\sinh(\pi d/L)}{\cosh^2(\pi d/L)} \quad 1,10$$

ومن تعويضها ومكاملتها في المعادلة 1,7 نحصل على

$$i = \frac{\sqrt{(g - g_0) \sinh(\pi d/L)}}{\sqrt{2} \cosh(\pi d/L)} \quad 1,11$$

وتكون بوابه جهد القطع هنا

$$g_0 = - \left\{ \frac{\pi}{2} - \arctan[\exp(\pi d/L)] \right\}^{-1} \quad 1,12$$



وهكذا فإن المصل الناقل di/dg عندما ($T = 0$) تقترب عند جهد القطع من $(g - g_0)^{-1/2}$ وتطبق في القنوات الكبيرة (NT FETs).

ونقول إن الأنظمة الغير كلاسيكية في المعادلة 1,11 غير متناقضة مع أجهزة (FET).

لكن من الناحية النظرية في حالة القنوات ذات الأبعاد الصغيرة تكون حالة خاصة ل (FET) في بعد واحد , وهي الحواجز الضعيفة لجهد كولوم التي تقترب نتائجها من الموصل الناقل (FET) في بعد واحد عند جهد القطع .

ال (IVCs) عند أجهزة طول أنبوبها $300 \mu\text{m}$ فقد كانت متوافقة مع التنبؤات في نماذجنا . والجذر التربيعي يعتمد على قيمة التيار في بوابه الجهد $11,1$ الذي اقترب من الموصل الناقل عند حد العتبة, وعند درجة حرارة محدودة قبل حصول الإثارة الحرارية . الأمر الذي يحتاج لوقف بوابة الجهد في حدود جهد أعلى من 10 فولت .

و إذا كانت $n_c \neq N$ فإن $\Psi(t)$ تحتوي ضمناً $\phi_c(x)$, ولا تحلل عند $x \rightarrow \pm L/2$, وبنفس الطريقة فإن $\phi_g(x)$ لها قيمة عظمى عند $(x = 0)$ وانه من الممكن عمل توزيع لها عند هذه النقطة، وهذا يتوافق مع القيمة g_0 ومعامل i لكنه لا يتغير مع الجذر التربيعي $i(g)$.

والمعادلات 1,2 و 1,7 ترفض تأثير الاندماجات التي تتساوى عند النهاية ($T = 0$) , ثم $n_s = 0$ لجميع النقاط عندما $\phi_s^0(x) < -C_t^{-1}n_c$. الجهد ϕ_s^0 وكثافة الشحنة تصل لأقل قيمة لها عند $(x = 0)$, وفي التوزيع الخطي يكون جهد القطع g_0 خاضعا للشرط $\phi_s^0(x) < -C_t^{-1}n_c$ وأقل (g) يكون التيار عندها $= 0$. ومن الواضح عند $T \neq 0$ يكون التيار الفعلي موجودا عندما $g < g_0$:

$$j \sim \exp(-\Delta/kT)$$

حيث

$$\Delta = e \left(-C_t^{-1}n_c - \phi_s^0(0) \right) \propto V_g \quad 1,13$$

عندما تكون $\phi_s^0(0)$ تعتمد خطيا على V_g فان طاقة التفعيل Δ تتناسب طرديا مع $g - g_0$. وهذا يعني ان القيمة المذكورة أعلاه di/dg تخليه و $i(g)$ الحقيقية لها بعض القيم العظمى تعتمد على الانخفاض لأقل (g) .

1 . 2 . 3 النتائج العددية ومناقشتها



عند حساب كثافة الشحنة بوحدة n_c والطول (L) والجهد en_c/ε والتيار $e^2 n_c^2 \mu / (L\varepsilon)$ فان المعادلة 1,1 تصبح بدون وحدة.

$$j = n(x) \frac{d\phi}{dx} - \left[2 \ln \left(\frac{l}{R} \right) n(x) + \tau \right] \frac{dn}{dx} \quad 1,14$$

حيث $\tau = \varepsilon kT / (e^2 n_c)$ تتناسب طرديا مع $N - n_c$. والجهد يحتوي على 3 أجزاء $\phi(x) = \phi_c(x) + \phi_g(x) + \phi_a(x)$ اقتران الشغل وجهد البوابة وجهد المصدر يتناسب طرديا مع V_g و V_d .

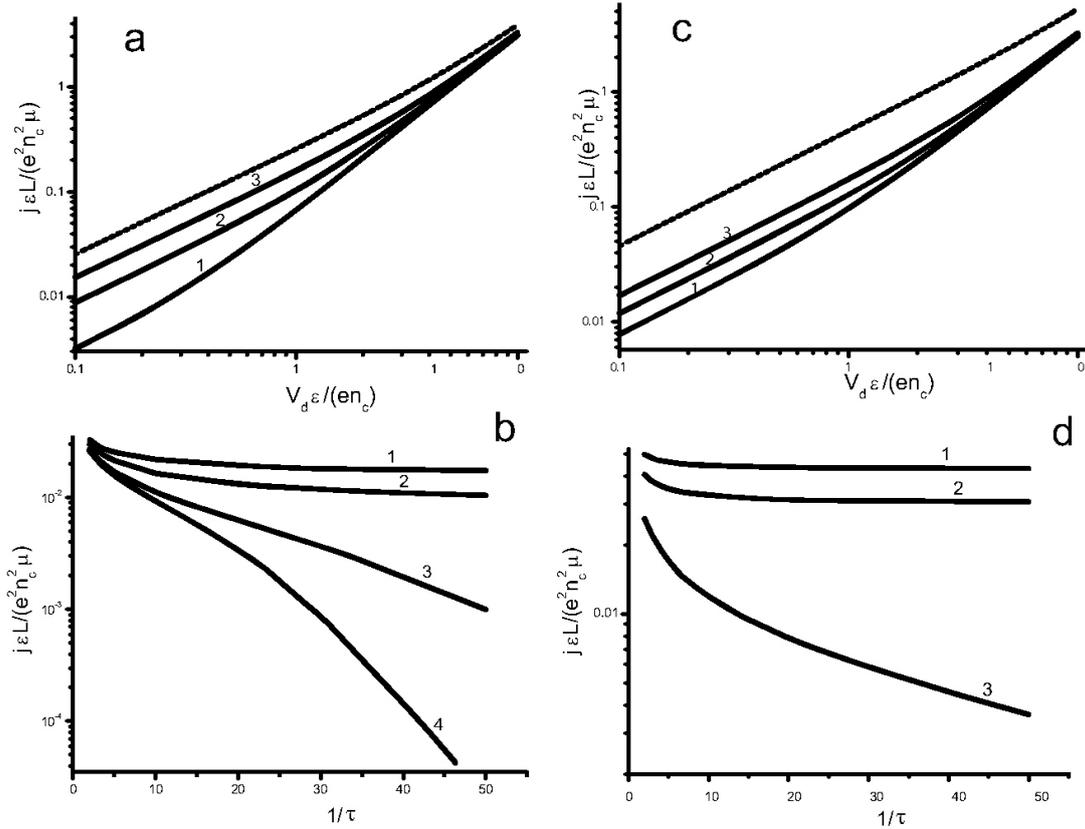
والتوزيع الجزئي لهذه المركبات يتناسب طريا مع الشكل الهندسي ومع المادة كما في 1.5 و 1.6 . وعدم وجود وحدة في المعادلة 1.1 للأنايبب النانوية يمكن اشتقاقه من المعادلة 1.14 باعتبار ان $\tau = 0$ والتعويض ب $2 \ln \left(\frac{l}{R} \right) \rightarrow \varepsilon C_t^{-1}$ والمعادلة 1.14 يجب ان يكون لها حل عند الشروط الحديه $n(\pm 1/2) = 1$

وسنأخذ الحسابات الرياضية لحالتين : الاتصال الاومي عندما $n_c = N$ والأسلاك النانوية الغير مطعمه (undoped) عندما (N=0) , و ل $n_c = N$ واختيار مقياس $d/L = 0.3$ فان جهد بوابه العتبة $V_{g0} \simeq -12.8$ كما يوضحه الشكل 1,1a الذي يظهر (IVCs) عند جهدين (بوحدة en_c/ε) : $V_g = -13.2$ (تحت العتبة) و $V_g = -12$ (فوق العتبة) , التي تعتبر خطيه ممتازة (superlinear) لان V_d الكبيرة تؤول لتوزيع حاملات الشحنة بشكل منتظم على طول القناة . وفي شروطنا عندما تكون قوة الاتصال مخزنه غي كثافة الشحنة عند النقاط العظمى , فان إعادة التوزيع ستزيد من القيم الصغرى ل (n) عند $(x = 0)$ وتزيد أيضا من الموصلية . فكل نتائج الخطية الممتازة هي مشاهدات تجريبية في (NW FETs) تختلف اختلافا كليا عن الخطية العادية (sublinear) و (IVC) التطبيقية ل (FETs) والقنوات البالسيتية القصيرة لهياكل الأنايبب .

وفوق جهد العتبة فان موصلية القنوات غالبا لا تعتمد على الحرارة , منحنيات ال (IVC) ل $(V_g = -12)$ (الشكل 1,1a) عند حرارة مختلفة لا تبعد عن خط التناظر , باعتبار $\tau = 0.2$ لأكثر من 10% .

و V_g تحت العتبة (الشكل 1,1a) تدل على علاقة قوية للحرارة مع التيار كما هو ظاهر عند $V_d = 0.1$ في (الشكل 1,1b) . ونرى المنحنيين العلويين فوق العتبة V_g ليس لهما علاقة ملحوظة مع الحرارة , بينما المنحنيين السفليين يعتمدان على نمو طاقه التفعيل مع $|V_g|$ عند تطبيقها مع 1,13 عند V_g كبيره . حيث ان حقن الاتصال (contact injection) يؤول لعمل كثافة شحنة موزعه بانتظام ل n_c , تختلف عن دمج منحنيات (IVC) وتلاشي الاعتماد على الحرارة .

وفي الحالة ($N = 0$) فإن المعادلة تؤول إلى الاتصال الأومي فقط من خلال وجود $d\phi_c(x)/dx$ في المعادلة 1,14 . وكما نرى في 1,5 , فإن هذا الاشتقاق له اتصال فردي من الحسابات الرياضية , وللتخلص من هذه الفردية سنستخدم العملية التالية : المحيط القريب للاتصال مع أول حد في الطرف الأيمن في 1,14 يؤول للمحدوده , لذلك يمكن تجاهل المحاور المستقلة على الطرف الأيسر والحدود المتبقية تكون من توزيع حاملات الشحنة الشبه متزنة مع ϕ_c الموجودة في ϕ_s^0 . وهذه الصيغة الرياضية تعطي وصفا لكثافة الشحنة في جوار منطقته الاتصال لتكون حلا ل 1,14 في المناطق البعيدة عن الاتصال . وفي الحالة $\phi_c(x) < 0$ سنأخذ اقل قيمة مطلقه لجهد القطع V_{g0} واقل موصل ناقل مع $n_c = N$.



المعادلة 1,12 تعطي $V_{g0} = -7.64$ (الشكل c,d 1,1) وبطريقه نوعيه هي نفسها في (الشكل a,b 1,1) لكن اعتمادها على V_g والحرارة اقل . والمنحنيات فوق العتبة في 1,1 c , $V_g = -6$, تعتمد جزئيا على الحرارة كما في الشكل 1,1a مع اختلاف في التيار بين ($I = 0.05$) و $\tau = 0.05$ لتصبح اقل من 5% .

1 . 3 الشروط الكمية I - السعة الكمية



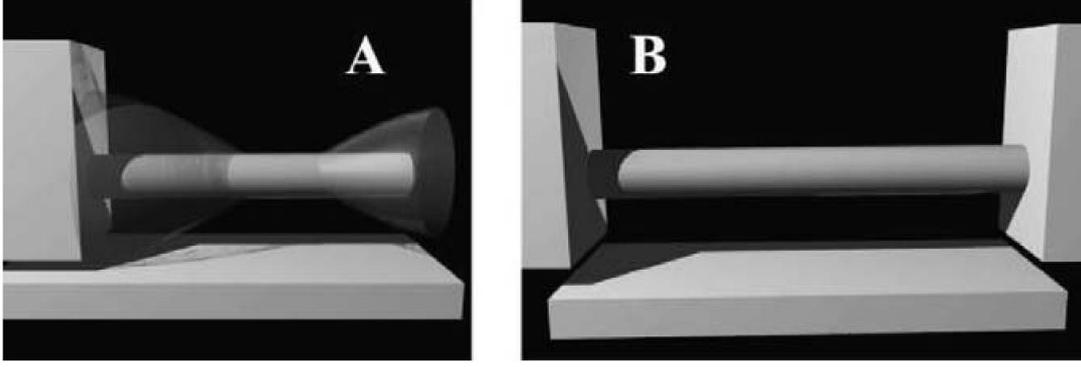
في هذا القسم سنأخذ السعة الكمية لـ (SWNT) والتي تعتمد على الترابط مع كثافة الأوضاع للأنظمة النانوية . تعتبر (Dos) في حالات المادة محدودة غالبا . وسنلاحظ حدودها في الحسابات الكهروستاتيكية لأنظمة الأبعاد الصغيرة (في هذه الحالة البعد الثاني) . وسنأخذ حسابات ميكانيكية كمية لحالتين مختلفتين لتشمل (Dos) مع (SWNT): الأنابيب النانوية في الفراغ (أو الهواء) والأنابيب النانوية على السطح بتجاهل تفاعلها مع الاستقطاب . وهذه الحسابات توصل النماذج للأجهزة الإلكترونية مع الأنابيب النانوية .

والحسابات لاتزان كثافة الشحنة لـ (SWNT) مع ثبات التغيرات الميكانيكية اللازمة لدعم النماذج في انظمه الأنابيب النانوية الكهروميكانيكية . من المعروف أن الحث يسمح بحساب الطاقة الكهروستاتيكية للأنابيب الكابولية النانوية (cantilever) التي تكتب في حدود توزيع السعة لتحديد القوى الكهروستاتيكية . بالإضافة إلى حث كثافة الشحنة وأخذ حث الجهد بعين الاعتبار ومعرفة مجال التعريف (band profile) وتعديل موصلية أجهزة الأنابيب النانوية الإلكترونية كما في القسم 1 . 1 . 2 .

السعة الذرية (atomistic) لـ (SWNT) لها شكلان: جزء هندسي نقي وجزء خاص بالأنبوب , وهذا طبيعي في الحد الثاني " السعة الكمية " كتعريف مماثل و متناسب مع انظمه غازات الإلكترون في البعد الثاني.

ولحساب السعة الكمية نحتاج لمعرفة شحنة سطح الأنبوب النانوي كاقتران لجهد تطبيقي ويمكن حسابه بعملية إحصائية والحصول على تقديرات جيدة لكثافة الشحنة مقارنة مع الميكانيكا الكمية الكاملة (الشكل 1,5). ان قطر الأنبوب النانوي له أهمية قليلة في النماذج , يضمن مجال الجهد الكهروستاتيكي $\varphi / \nabla \varphi \sim l_g$ ان تكون لـ φ مجال جهد كبير , ومعدل تأثير لـ φ على حركة الإلكترون في الميكانيكا الكمية , وهذا الاضطراب النظري يمكن ان يشمل تأثيرات الجهد في القواعد الإلكترونية في الأنابيب . ويمكن معاملة زيادة الجهد الخارجي عن طريق رفع الجهد الكهروكيميائي (لكل الكثرونات التكافؤ) لحساب توزيع الشحنة بالتقريب الإحصائي .

والتطبيقات الإحصائية الكهروستاتيكية لتوزيع الشحنة المتزنة ستناقش لاحقا وصف أجهزة حمل التيار . السبب في ان الظواهر الكلاسيكية تكون قليلة في الأشياء الصغيرة الكمية هو أولا: الإحصاء التقريبي يعطي نتائج صحيحة و (Dos) الصحيحة تطرح في معادله بولتزمان (Boltzman) . وهذه الـ (SWNT) يجب ان تحسب كميًا . ثانيا الهياكل الإلكترونية لـ (SWNT) مناقضة لحجوم المواد ولا يمكن تجاهل توزيع و تغير المجال الكهربائي الخارجي الرئيسي .

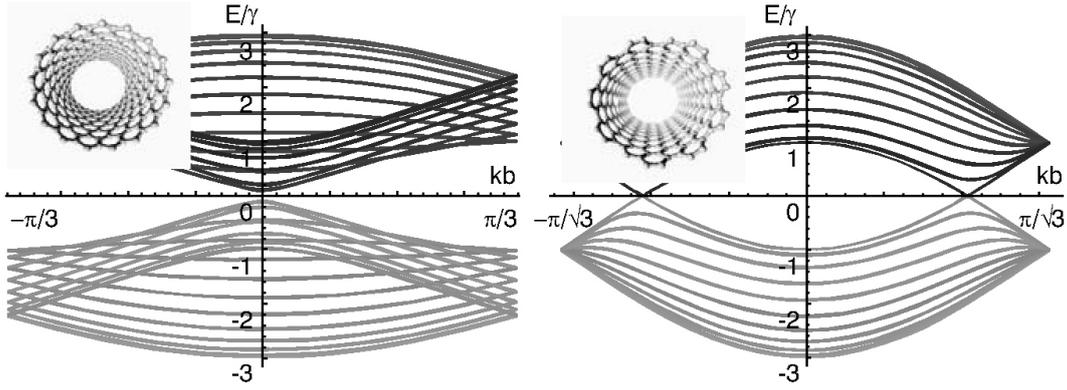


والقنوات في أجهزة الأنابيب تكون قربه جدا من التحقيق الكهربائي عن أي نظام آخر وهذا يعطي تبسيطا في الحصول على حلول لخصائص أجهزة النقل .

1 . 3 . 1 الأسلوب الإحصائي لحساب كثافة الشحنة في الفراغ لـ (SWNT)

كمثال على الأجهزة الكهروميكانيكية النانوية الخاصة " مفتاح (SWNT) " و سعته الكمية . يجب تعريف هندسية كابولي لمفتاح الأنابيب النانوية الكهروميكانيكية كما يلي: توصل (SWNT) بشكل مستقيم مع الأقطاب وتوضع فوق سطوح الأقطاب (الشكل a 1,2) . والزنبرك الهندسي لأجهزة (SWNT) كما يلي : تثبت الأنابيب النانوية بشكل مستقيم بين قطبي مادتين وفوق قطب بوابة الرجع (backgate) (الشكل b 1,2). اتجاه الأقطاب يحافظ على جهد ثابت مع بوابة الرجع, وهذا التصميم المثالي للانظمة الكهروميكانيكية.

وسناقش في المقدمة الاعتماد على تماثل الأنابيب. فيمكن الحصول على ثلاث حالات مختلفة 1- الكرسي الرئيسي ل (SWNT) (armchair) له علاقة مع نقطه فيرنى (الشكل 1,3 الأيمن) . في هذه الحالة تكون (SWNT) معدنية. 2- في الأنابيب المتعرجة اكاريليه (zigzag/ chiral) ذات أقطار محده وكاريليه ذات اتساع فجوة لا يساوي صفر (الشكل 1,3 الأيسر أنابيب شبه موصله) . 3- ثلث أنابيب التعرجات وكاريليه لها فجوة صغيرة جدا (أنابيب أشباه المعادن). وكل هذه الحالات تكافئ غالبا تطبيقات (NEMs) في حاله استنباط الحقن \ التطعيم (degenerate injection \ doping)



إذا كانت مستويات التطعيم ليست كبيرة جدا. وللتبسيط سنعتبرها نفس مادة الأنبوب. في حساب توزيع الشحنة في (SWNT) كاقتران لتأثير الجهد الكلي الذي يكون عبارة عن مجموع الجهود الكلية والحثية كما يلي

$$\varphi^{\text{act}} = \varphi^{\text{xt}} + \varphi^{\text{ind}} \quad 1,15$$

خلال النماذج الإحصائية الشحنة الحثية تكون مكاملة لـ (Dos) الأنابيب النانوية من مستوى الشحنة الداخلية المحايدة ($E = 0$) إلى الجهد الكهروكيميائي الداخلي (الشكل 1,4). الجهد الكهروكيميائي الداخلي (الذي يأتي من مستوى فيرمي عند درجة حرارة تساوي صفر) يسمح لجهد التأثير الداخلي لتوزيع النماذج الإحصائية. وحصل تقريب رائع في حالة الأنابيب النانوية المعدنية، وإذا كانت الأجهزة تعمل عند جهد قليل فان رفع مستويات فيرمي لأقل الحزم. عندما يكون التوزيع خطيا فان كثافة الأوضاع ثابتة (الشكل 1,4) وتساوي

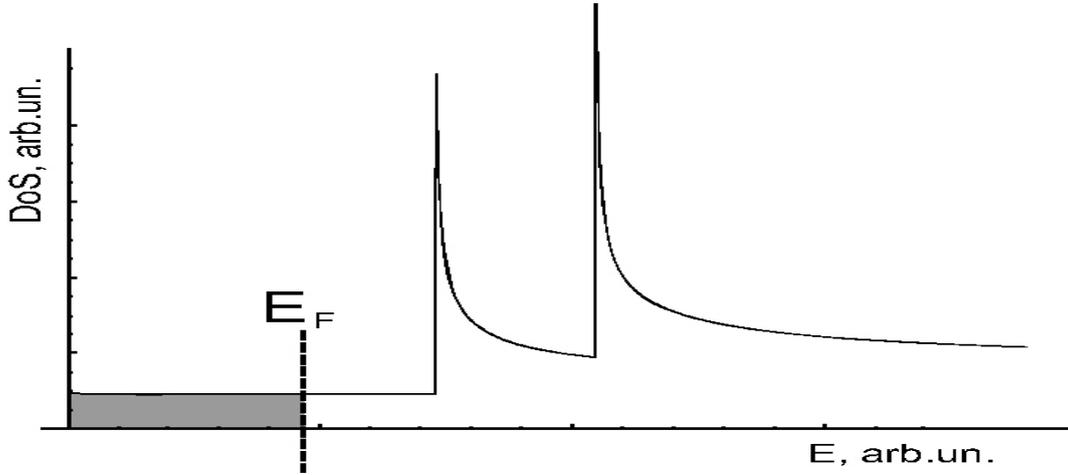
$$\nu_M = \frac{8}{3\pi b\gamma} \quad 1,16$$

هنا $b \simeq 1.4 \text{ \AA}$ وهي مسافة دون ذرية و $\gamma \simeq 2.7 \text{ eV}$.

كثافة الشحنة الحثية هي

$$\rho(z) = -e^2 \nu_M \varphi^{\text{act}}(z) \quad 1,17$$

بالرغم من ان المعادلة 1,17 تعطي قيمة دقيقة لكثافة شحنة في حالة فيرمي مع اقل حزمة في الأنابيب المعدنية . نلاحظ ان فريديه ال(Dos) متكاملة وهذا يعني ان التطبيقات الجزئية للتوزيعات الخطية تعتمد على كثافة الشحنة المؤثرة على الجهد عبر مجال طاقه فيرمي مع إمكانية استثناء منطقه صغيره في طرف الحزم .



وفي هذا القسم سنعتبر في المعادله 1,17 ان $\rho = -C_Q \varphi^{act}$, ويكون تحديد مجموعه $e^2 \nu_M$ مع توزيع السعه الكميّه . في حاله البعد الواحد يكون توزيع الشحنة بدون وحدة. ل (SWNT) مع حزم مهمله الكتله تكون

$$C_Q = \frac{8e^2}{3\pi b \gamma} \quad 1,18$$

ونلاحظ ان في البعد الواحد في 1,17 كان الاعتماد خطيا على كثافة الشحنة في الجهد , بينما في البعد الثاني كانت كثافة الشحنة تتناسب طرديا مع جهد لابلاس في معادله بويزون (Poisson)

$$\rho_{2D} \propto \nabla \varphi \quad 1,19$$

$$\rho_{3D} \propto \nabla^2 \varphi$$

1. 3. 2 : اقتران غرين في السعه الهندسيه

عند إيجاد حلول لكثافة الشحنة نحتاج للجهد الحثي الذي يمكن حسابه من معامل كولوم في اقتران غرين و $(G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))$:

$$\varphi^{ind}(\mathbf{r}) = 4\pi \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad 1,20$$



اقتران غرين في انظمه البعد الواحد يأخذ قيمة لوغاريتمية عند المسافات الكبيرة إلا إذا أخذنا بالاعتبار بعض الحواجز الخارجية. وفي حاله أجهزة الأنابيب النانوية تكون الحواجز قريبه من بوابات الاتصال. وتتضمن المعادلة كثافة الشحنة للأنابيب كما في (1,15 و 1,17 , 1,20)

وتكون

$$-\frac{\rho(\mathbf{r})}{e^2\nu_M} - 4\pi \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = \varphi^{xt}(\mathbf{r}) \quad 1,21$$

وهذه المعادلة قد تعكس التحليلات أحيانا . بشكل عام تسمح للحلول الرياضية ان يعبر عنها بمتسلسلات .

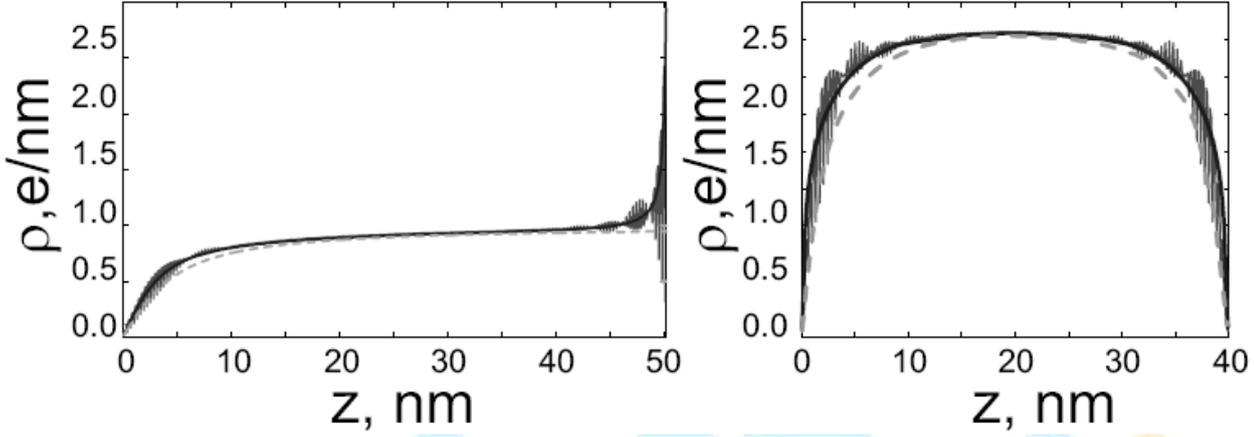
القيمة الرياضية لـ 1,21 يمكن تقسيمها إلى ثلاث أجزاء في الأنابيب: جزءان في مناطق الاتصال وجزء في المنطقة المركزية , والأجزاء الجانبية تكون قريبة من جهة الاتصال بطول مقداره (h) حيث ان (h) هي المسافة مع بوابه الحاجز . النسبة الجانبية لحالات (NEMs) والأجهزة الالكترونية كبيرة جدا. ومعناها ان طول الأنبوب (L) اكبر بكثير من (h). والمنطقة المركزية يكون اغلبها مغطى بأدوات الطول.

قيمه الكهروسكونية في المنطقة المركزية مجزأة وتعطي حلولا لـ 1,21 , لان الحاجز لتفاعل كولوم في بوابة الرجع وإزالة الاستقطاب لالكترونات التكافؤ تأخذ مجالا صغيرا في اقتران غرين وفي مسافات تتراوح بين (2-3h) من نقطه الاتصال وكثافة الشحنة يعبر عنها ب

$$\rho \simeq \rho_{\infty} = -\frac{\varphi^{xt}}{C_g^{-1} + C_Q^{-1}} \simeq -\varphi^{xt} C_g \left(1 - \frac{C_g}{C_Q}\right) = \rho_{cl} \left(1 - \frac{C_g}{C_Q}\right) \quad 1,22$$

حيث ρ_{∞} هي اتران كثافة الشحنة (SWNT) وتحسب عند الأقطاب لمسافة كبيرة جدا عن طول الحاجز (h) $\rho_{cl} = -C_g\varphi^{xt}$. هي كثافة الشحنة الكلاسيكية في اسطوانة معدنية لها نفس الشكل الهندسي . اما ل(SWNT) في الفراغ فان $C_g^{-1} = 2\log\left(\frac{2h}{R}\right) > 2\log 2 \sim 1.4$ والحد الكمي $C_Q^{-1} = 1/(e^2\nu_M) \sim 0.3$ وهو اصغر بكثير مما يسمح لنا بعمل توزيع السعه الكلية على متسلسلة في $C_g/C_Q \ll 1$.

المعادلة 1,22 توضح: 1- تصحيح الميكانيكا الكمية لكثافة الشحنة الكلاسيكية صغير على كل(SWNT) في الفراغ . و في التطبيقات الهندسية ل(NEMs) تتضمن 10% أو اقل. 2- التصحيح الكمي يتناسب عكسيا مع (Dos) وهذا غير موجود في الكلاسيكية ل (Dos) محدود في الثلاث أبعاد. 3- النسبة للسعه الكلاسيكية إلى السعه الكمية لا تعتمد على الشكل الهندسي. وهذا يعني أن الحد الكلاسيكي $2\varepsilon \ln(2h/R)$ يعتمد بشكل واضح على طول الحاجز.



الشكل 1.5 يوضح كثافة الشحنة النوعية للجهازين: الشكل على اليمين الخيط وعلى اليسار cantilever nems. المنحنى الرفيع المتذبذب هو نتيجة لحسابات ميكانيكا الكم. أما الخط السميك المتصل هو ناتج عن حل معادلتى Poisson و Boltzmann. أما الخط المتقطع فهو نتيجة لتحليلات الاحتمالية.

1.3.3 النتائج والمناقشة

دالة جرين Green's function اشتقت للعديد من الأجهزة و كذلك تم حساب ثابت كثافة الشحنة لهم باستخدام الطرق الإحصائية، التفاصيل متوفرة في [23,34]. تم مقارنة كثافة الشحنة الناتجة بتلك الطريقة مع النتائج التي حصلنا عليها باستخدام الحسابات المعتمدة على ميكانيكا الكم.

المعادلة الخاصة باتزان كثافة توزيع الشحنة متحقق في النانوتيوب الذي أصابه بعض التشوهات وكذلك في النانوتيوب المثالي. وفي حالة الانحناء الطفيف في النانوتيوب SWNT فإن المفضل هو استخدام المعادلة (1.22) حيث ان السعة لاسطوانة معدنية منحنية تكون $C_g^{-1}(h(z))$ ، بدلا من السعة اللوغرافية، والتي تكون متحقق فقط في الاسطوانة المثالية. نحن افترضنا ان الاضطرابات الميكانيكية ضعيفة حتى لا تؤدي إلى تغير



ملحوظ في الـ DoS. ولهذا فإن السعة الكمية للنانوتيوب SWNT المشوهة تبقى كما هي والسعة الكلية تعتمد على شكل التيوب من خلال التعبير الهندسي فقط.

$$C(z) \simeq \frac{1}{C_g^{-1}(h(z)) + C_Q^{-1}} \simeq C_g(z) \left(1 - \frac{C_g(z)}{C_Q}\right). \quad (1.23)$$

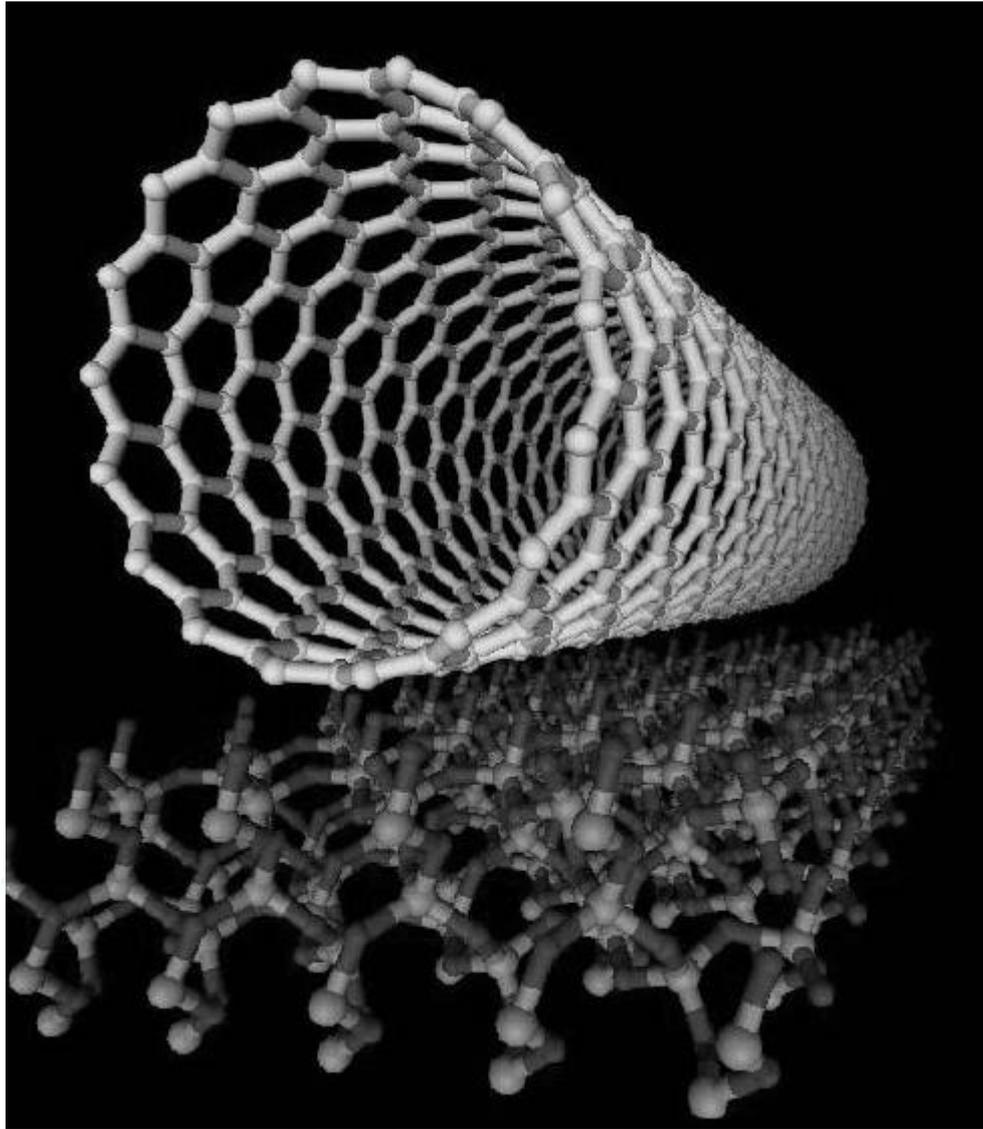
هذه الطريقة التحليلية تشكل حل مفيد جدا لحساب القوة الكهروستاتيكية في العديد من أجهزة NEMS.

الشروط الكمية كسر التماثل التلقائي

الآن يمكن ان نوضح باستخدام النظرية الكمية الميكروسكوبية للشحنة المنقلة بين SWNT والمادة الموصلة substrate. والقيمة المحددة للـ DoS الخاصة بـ SWNT عند مستويات فيرمي وجدت إنها تعطي نتائج تتوافق مع شروط ميكانيكا الكم وذلك طبقا للحسابات المتعلقة بكثافة الشحنة المستحثة، على سبيل المثال فإن السعة الكمية CQ quantum capacitance كما تم توضيحه في القسم السابقة. عند هذا الحد فإن CQ لم تحسب بشكل قاطع، ولكن في حدود القيم الإحصائية، حيث تم اشتقاقها من العلاقة المتوفرة للنانوتيوب DoS. الأكثر أهمية هو افتراض ان الـ DoS لا يعتمد على الجهد الخارجي (والمغيرات الخارجية الأخرى). لقد عرفنا مسبقا ان السعة الكلية لجهاز NT من الممكن ان تعتمد على الشكل الهندسي. هذا القسم يدرس اعتماد السعة الكمية CQ على استقطاب البيئة المحيطة.

الانفصال الطبقي في SWNT نتيجة لتفاعله مع مادة القاعدة Substrate

بصفة عامة، انتقال الشحنة أو (حقن الشحنة) من الممكن ان يكون له تأثير جوهري في تغير DoS ومن الممكن أيضا ان تعدل في الخصائص الالكترونية لمادة النانوتيوب. انتقال الشحنة يكون ناتجا عن اختلاف دالة الشغل بين النانوتيوب ومادة القاعدة substrate أو من تأثير جهد خارجي



الشكل 1.6 يوضح نانوتيوب متعرج على سطح اوكسيد السليكون SiO_2 المستخدم كقاعدة للنانوتيوب.

مطبق على كليهما (النانوتيوب والقاعدة). كثافة الشحنة السطحية على SWNT تحسب من خلال دالة الغلاف envelope function المكونة لـ TB.

ما هو تأثير انتقال الشحنة على التركيب الإلكتروني لـ SWNT؟ ان النتيجة الأهم هو الانفصال التلقائي للمتماثل المحوري للنظام. وبسبب هذا الانفصال فان تغير نوعي يحدث في الـ DoS: فتحل الروابط الجزئية $|m \pm \rangle$ (حيث m لا تساوي 0 و n). ولهذا تفسير فيزيائية - فالإلكترونات التي تمتلك استقطاب x و y لا تكون متكافئة حيث انجذابها لمادة القاعدة تصبح مختلفة. هذا التأثير يعود إلى التحلل في مستويات تأثير Stark باستخدام مجال خارجي مناسب. الفجوة بين الروابط الجديدة x و y تكون ثابتة في فراغ k (للمجال الخارجي



المنتظم على طول محور النانوتيوب)، وهذا التأثير يظهر بقوة عند أطراف حزم الفرعية. ونحن هنا نوضح هذا الانفصال من خلال الطريقة التحليلية.

إزالة الاستقطاب لكثافة الشحنة في SWNT وفي انفصال الطبقات الداخلية سوف يتم دراسته حسب التجهيزات الموضحة في الشكل 1.6: طبقة من SWNT مثبتة على طبقة عازلة كقاعدة substrate. هذه تعتبر التركيبة النموذجية لأجهزة تأثير المجال field effect. كما إننا درسنا أيضا استخدام قاعدة من مادة موصلة conductive substrate و طبقة عازلة رقيقة تفصل بين النانوتيوب وبين المادة الموصلة، والتي تشبه حالة الاتصال and/or في البواب المنطقية. لقد افترضنا ان النانوتيوب موصول بمستودع الكتروني، والذي من الممكن ان يكون القاعدة الموصلة نفسها. المجال الكهربائي الخارجي المستعرض ودالة الشغل بين النانوتيوب SWNT والقاعدة تسبب في وجود كثافة شحنة من الكترونات والفجوات في النانوتيوب. كثافة الشحنة الإضافية تستقطب القاعدة، وتسبب في تشويش التماثل المحوري للنانوتيب. سوف نقوم الآن بتوضيح ان تأثير المجال الكهربائي المنتظم يعتبر تأثيرا طفيفا إذا ما قورن بتأثير المجال الكهربائي الغير منتظم على كثافة الشحنة.

لحساب الانفصال والانزياح في مستويات الطاقة للالكترونات نحتاج الى ان نعرف عناصر المحددة الخاصة بإضطرابات الجهد بين الدوال الموجية المناظرة لها. في حالتنا هذه الاضطراب هو جهد كولوم الذي يصف التفاعل بين المجس الالكتروني و (1) كثافة الشحنة الإضافية على SWNT، و (2) كثافة الشحنة المستقطبة على سطح القاعدة³:

$$V = e \int_{-L/2}^{L/2} dZ \int_0^{2\pi} Rd\beta \left(\frac{\sigma}{\sqrt{(z-Z)^2 + (R \cos \alpha - R \cos \beta)^2 + (R \sin \alpha - R \sin \beta)^2}} + \frac{\sigma^*}{\sqrt{(z-Z)^2 + (R \cos \alpha - R \cos \beta)^2 + (R \sin \alpha + 2h - R \sin \beta)^2}} \right). \quad (1.24)$$

كلا من مجس الإلكترون وشحنة سطح النانوتيوب تم أخذهما على اسطوانة نصف قطرها R. وكلا من z و α هما إحداثيات الإلكترون في نظام الإحداثيات الاسطواني. و σ تمثل كثافة التوزيع السطحي والتي لا تعتمد على المحور Z (محور النانوتيوب) حيث إننا افترضنا ان كثافة الشحنة لا تتغير على المحور Z إلا انه من الممكن ان نطبق النظرية بسهولة على حالة التغير في كثافة الشحنة السطحية σ على امتداد محور النانوتيوب. كما إننا سوف نوضح لاحقا انه من الممكن إهمال اعتماد σ على الزاوية θ في نظرية الاستجابة الخطية linear



response theory. (في الترتيب العالي لنظرية الاضطراب فانه يجب الأخذ بعين الاعتبار الاستقطاب المباشر [41]. σ^* هي صورة كثافة الشحنة والتي تساوي σ للقاعدة المعدنية.

الحد الأول في المعادلة (1.24) هو حد Hartree للنانونيوب SWNT في الفراغ (أي بدون حقنه بالشحنات). والحد الثاني في المعادلة هو الطاقة الناتجة عن تفاعل الالكترونات في مع صورة الشحنة. الانفصال بين محور SWNT وسطح الموصل هو h . وفي حالة القاعدة المعدنية فان الانفصال يكون في حدود نصف قطر النانونيوب R ، بالإضافة إلى مسافة فاندرفال للجرافيت: أي $h \sim R + 0.34 \text{ nm}$.

عنصر المصفوفة لمؤثر كولوم (1.24) يحسب بواسطة الدالة الموجية لـ TB Hamiltonian. وقد استخدمنا الدوال الموجية بنفس الطريقة في [42]، في نموذج الطبقة الواحدة (أي فقط π electrons).

$$\langle z, R, \alpha | \psi_{m,k,\zeta} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \frac{\langle r - R_I | \varphi \rangle + \zeta c_{mk} \langle r - R_{II} | \varphi \rangle}{\sqrt{2}} e^{ikz} e^{i m \alpha}, \quad (1.25)$$

هنا المعامل المركب c_{mk} يجب ان نجده كـ eigenvectors لا TB Hamiltonian; المعامل m يدل على العزم الزاوي للإلكترون و k العزم الطولي، و $\zeta = \pm 1$ تعبر عن الحركة المغزلية. مركبات متجة الحركة المغزلية والتي تكون مشابهة للدوال الموجية للذرات، تعرف على أساس اعتبار ذرتين في وحدة الخلية ϕ/II . لنفترض إن الإلكترون محصور في حدود السطح الاسطواني. وهنا L هي طول الاسطوانة.

لنفترض أن الجهد منتظم في حدود الخلية (0.25nm). وهنا يمكن أن نهمل الانتقال الناتج عن الانقلاب في الحركة المغزلية. باستخدام العلاقة بين الـ normalization و

$$\langle m | V | n \rangle = - \frac{8\pi e R \sigma}{|m - n|} i^{m-n} \left(\frac{R}{2h} \right)^{|m-n|}, \quad m \neq n \quad (1.26)$$

$$\langle m | V | m \rangle = 4\pi e R \sigma \log \left(\frac{2h}{R} \right), \quad m = n \quad (1.27)$$



حيث σ كثافة الشحنة السطحية، ويجب أن تعرف لاحقاً بطريقة منفصلة. فإذا كانت σ غير معتمدة على محور النانوتيوب فإنها تصبح كثافة شحنة طولية أي في بعد واحد والتي استخدمت من قبل: $\rho = 2\pi R\sigma$.

المعادلتين (1.26) و (1.27) تم الحصول عليهما من تحليلات فوريير Fourier transformation للمعادلة (1.24) ومن وصف الانزياح في مستوى الطاقة عندما $m=n$ ومن الاندماج بين مختلف الطبقات عندما $m \neq n$. والأكثر أهمية هو عندما $n=-m$ حيث الاندماج بين حالات الانحلال للإلكترون في نفس الطبقة.

بحل المعادلة للتداخلات الطبقيّة للإلكترون فإننا حصلنا على انفصال في انفرادية Van Hove على حافة الطبقة (الشكل 1.7). والانفصال في الطاقة للطبقة الجديدة تعطى بالمعادلة

$$\delta E_m = \frac{8\pi e R \sigma}{m} \left(\frac{R}{2h} \right)^{2m} . \quad (1.28)$$

دعنا الآن نحسب كثافة الشحنة σ المستحثة أو المحقونة، والتي سوف تسمح لنا بتقدير قيمة الانفصال في الطاقة δE_m .

1.4.2 حقن الشحنة نتيجة انزياح مستوى فيرمي

المعادلتين (1.26) و (1.28) تستخدمان لإيجاد كثافة الشحنة σ ، والتي سوف يتم اشتقاقها في هذا الجزء من البحث. عندما لا تكون النانوتيوب SWNT في وعاء مفرغ من الهواء، فإنه يجب أن يؤخذ في عين الاعتبار فرق في دالة الشغل بين النانوتيوب وبين القاعدة الموصلة لها Substrate. كذلك يمكن تطبيق جهد كهربائي خارجي على طبقة القاعدة. الجهد الكلي يعمل على إزاحة مستوى فيرمي في الـ SWNT [22]. ونتيجة لذلك الشحنة الموجبة/السالبة تحقن في النانوتيوب.



$$\sigma = \frac{e}{2\pi R} \int [f(E - \mu(\sigma)) - f(E)] \nu(E) dE \simeq \frac{e}{2\pi R} \int_0^{\mu(\sigma)} \nu(E) dE, \quad (1.29)$$

هنا $\nu(E)$ هي دالة في بعد واحد فقط لـ DoS (مستقلة عن σ في نظرية الاستجابة الخطية linear response theory); $\mu = \Delta W - e\varphi^{xt} - e\varphi^{ind}(\sigma)$ هي الإزاحة الكلية للجهد الكهروكيميائي للنانوتيوب SWNT (بالنسبة للشحنة المتعادلة للمستوى $E=0$), والتي تعتمد على: فرق دالة الشغل ΔW , وعلى الجهد الخارجي φ^{xt} المطبق بين النانوتيوب و المستودع. وعلى الجهد φ^{ind} , الناتج عن كثافة الشحنة σ في النانوتيوب. وللحصول على الطرف الأيمن للمعادلة (1.29) قمنا نحن بتقريب توزيع فيرمي، $f(E)$ باستخدام دالة unit step (والتي تكون عندما $T \rightarrow 0$)

لقد قمنا باستخدام نفس الخطوات في المرجعين [22,43] لاشتقاق قيمة σ : قيمة الجهد حصلنا عليه من إجراء عملية التكامل لكثافة الشحنة على طول النانوتيوب SWNT. والمعادلة (1.29) ثابتة بالنسبة لـ σ وهي محلولة تحليليا إذا كان الجهد الكهروكيميائي تحت حافة الطبقة الفرعية الثانية. والشحنة هي ناتج ضرب الثابت DoS والجهد الكهروكيميائي μ . الحل للمعادلة (1.29) يكون على النحو التالي:

$$\sigma_A = \frac{\Delta W - e\varphi^{xt}}{2\pi R e \left(2 \log(2h/R) + C_Q^{-1} \right)}, \quad (1.30)$$

وللمواد شبه الموصلة SWNT والتي تكون قيمة DoS تتناسب مع

$$C_Q E \theta(E - \Delta) / \sqrt{E^2 - \Delta^2},$$

والشحنة تعطى على النحو التالي



$$\sigma_Z = \sigma_A \theta(\Delta W - e\varphi^{xt} - \Delta)$$

$$\times \frac{\sqrt{\left(\frac{\Delta}{\Delta W - e\varphi^{xt}}\right)^2 \left(4 \log^2(2h/R) - C_Q^{-2}\right) + C_Q^{-2} - 2 \log(2h/R)}}{2 \log(2h/R) - C_Q^{-1}} \quad (1.31)$$

حيث $\theta(x)$ هي دالة Heaviside unit step و Δ هي نصف فجوة الطاقة و C_Q هي السعة الكمية للنانوتيوب SWNT المعطى بالمعادلة (1.18).

من المعدلتين (1.28) و (1.30) نحن حصلنا على الانفصال في الطبقات الفرعية المتحللة $|\pm m\rangle$ للنانوتيوب المعدني SWNT (عندما يكون مستوى فيرمي متواجد في الطبقة الفرعية الأولى):

$$\delta E_m = \frac{4(\Delta W - e\varphi^{xt})}{m(2 \log(2h/R) + C_Q^{-1})} \left(\frac{R}{2h}\right)^{2m} \quad (1.32)$$

الانفصال يقل بدالة أسية مع m ، ولهذا فان تأثيره سوف يكون ملحوظا للطبقات الفرعية المتحللة الأقل. وبالتالي فانه باستخدام العوامل التالية: نصف قطر النانوتيوب SWNT $R \simeq 6.7 \text{ \AA}$ ، والمسافة إلى طبقة القاعدة المعدنية $h = 10.1 \text{ \AA}$ ، والسعة الكمية $C_Q^{-1} \simeq 0.31$ [22]، نحن حصلنا على تقريب عددي للانفصال في الطبقات الفرعية في SWNTs في المدى بين 4.9 إلى 5.05 eV [44,45]. وللنانوتيوب على طبقة قاعدة من الذهب نحن استخدمنا $\Delta W \sim 0.3 \text{ eV}$ كتقريب جيد. وفي حالة غياب الجهد الخارجي، فان فرق دالة الشغل تنتج فجوة طاقة مقدارها 46 meV تقريبا بين قمتي الانفصال لكثافة المستويات كما في الشكل 1.7، والتي تكون اكبر من kT عند درجة حرارة الغرفة. كما إننا أيضا حسبنا مشاركة كل الطبقات الفرعية، والتي تتراح كمجموعة ولكن تأثيرها على الانفصال يكون مهملاً. ونتيجة لذلك فان القمتين الجديتين في الشكل 1.7 تظهر غير متماثلة بالنسبة لأصل DoS.

الانفصال المزدوج في $\pm m$ يناظر تحلل مستويات الطاقة في تأثير ستارك Stark effect للنانوتيوب الموضوع في جهد متعدد القطبية لصورة الشحنة. الطبقة الدنيا لها تماثل x والطبقات العليا لها تماثل y وتكون الدالة الموجية المقابلة هي

$$1/\sqrt{2}(|+m\rangle - |-m\rangle)|x\rangle = 1/\sqrt{2}(|+m\rangle + |-m\rangle) \text{ and } |y\rangle =$$

نحن نتنبأ بتأثير مشابه في النانوتيوب المصنوع من أشباه الموصلات، وبالرغم من أن الجهد الخارجي الكلي يسبب في زيادة حقن كثافة الشحنة بأكثر من النصف . في هذا القسم قمنا بدراسة التأثير الخطي في الجهد الخارجي ولهذا فإن كل الرتب العالية في المعادلة (1.31) تم إهمالها.

1.4.3 تصحيح الاستقطاب القطبي

حقن الشحنة في النانوتيوب من الممكن أن نحصل عليه بسهولة من خلال تطبيق مجال كهربائي خارجة، وبالرغم من أن المجال الخارجي نفسه من الممكن أن يسبب في كسر تماثل التركيب الطبقي وهذا يؤدي إلى انفصال مداري $\pm m$ للنانوتيوب SWNT، وللمجال كهربائي منتظم فإن هذا لا يحدث بسبب التماثل. عناصر المحدودة لانفصال الطبقات الفرعية في مجال كهربائي منتظم \mathcal{E}_{xt} تساوي صفر بالتعادل:

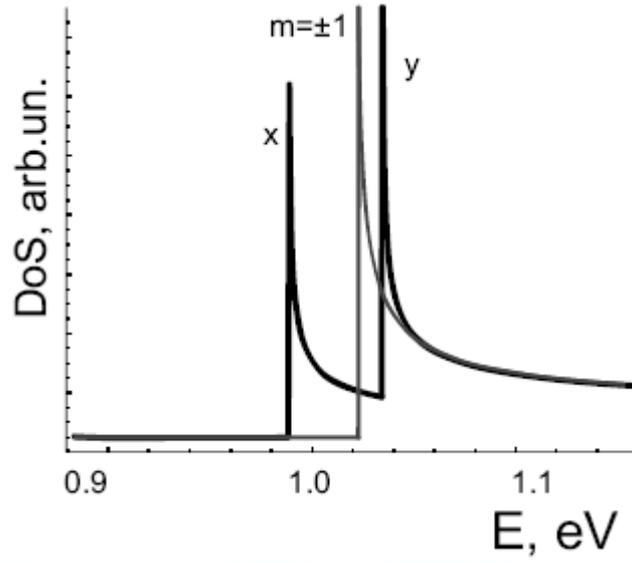
$$\langle m | e\mathcal{E}_{xt}y | -m \rangle = 0$$

في القسم 1.4.1 افترضنا ان كثافة الشحنة σ لا تعتمد على المحور الزاوي ϕ على امتداد محيط النانوتيوب. هذا يعتبر تقريب مناسب لان مركبات ثنائيات الأقطاب لـ σ صغيرة بالمقارنة مع ما هو معطى في المعادلة (1.30) و (1.31). دعنا نثبت هذه الفرضية لاستقطاب ثنائيات الأقطاب في النانوتيوب SWNT.

الجهد الخارجي الغير منتظم يسبب انحراف لكثافة الشحنة السطحية عن قيمة الاتزان والذي يعطى بالمعادلة التالية

$$\delta\sigma(\beta) = e \sum_{i \neq j} \frac{(f_i - f_j) \langle i | V | j \rangle}{E_i - E_j} \langle j | \beta \rangle \langle \beta | i \rangle, \quad (1.33)$$

حيث أن f_i هي عدد حالات الانشغال و $\langle i | V | j \rangle$ عناصر المحدودة التي تعطى بالمعادلتين (1.26) و (1.27) للجهد $V = \mathcal{E}_{xt}h$ ، حيث أن h هي المسافة بين محور النانوتيوب والسطح المعدني. E_i هي طاقات الطبقات الفرعية و $\langle \beta | i \rangle$ الدوال الموجية المناظرة لها.



الشكل 1.7 DoS لـ [10,10] للنانوتيوب في غياب Van Hove singularity (اللون الأسود). حقن الشحنة في النانوتيوب نتيجة لفرق دالة الشغل (انظر للنص) ناتج عن الانفصال المداري، الذي يرى بوضوح بالمقارنة مع DoS النقي للنانوتيوب الطبيعي (اللون الرمادي).

نحن نعرف ثنائي القطب الغير منتظم والذي يشكل جزء من كثافة الشحنة للنانوتيوب SWNT على النحو التالي

$$\delta\sigma_1 \equiv \int_0^{2\pi} \sin \beta \sigma(\beta) d\beta$$

ويكون مركبة ثنائي القطب للشحنة السطحية على النحو التالي:

$$\delta\sigma_1 = \frac{ie}{8\pi R^2} \sum_i \frac{(f_i - f_{i\pm 1}) \langle i|V|i \pm 1 \rangle}{E_i - E_{i\pm 1}}. \quad (1.34)$$

دعنا نسترجع من المعادلة (1.26) $\langle i|V|i \pm 1 \rangle = -i8\pi R^2 e\sigma / (2h)$.

في حالة ان الجهد الكهروكيميائي يساوي صفر (أي لا توجد شحنة في النانوتيوب)، فان الاستقطاب المستعرض يحتوي على انتقالات من طبقة التكافؤ إلى طبقة التوصيل فقط، $\langle v|V|c \rangle$ (تفاصيل الحل موجودة في بحث اخر [46]). هنا نحن قمنا بدراسة المركبة الاضافية للاستقطاب الناتجة عن كثافة الشحنة المستحثة. ولهذا نحن نحتاج الى اعتبار الانتقالات فقط من المستويات فوق مستوى الشحنة المتعادلة $E=0$ ، وتحت مستوى



فيرمي، $E=E_F$ (المساحة المظلمة في الشكل 1.4). وعليه، فإن ثنائي القطب المستقطب يتناسب مع صافي كثافة الشحنة σ ، وكثافة شحنة ثنائي القطب للنانوتيوب SWNT يعطى بالعلاقة التالية:

$$\delta\sigma_1 = \frac{\sqrt{3}C_Q^2}{32\pi} \frac{(2\pi R\sigma_A)^2}{e} \frac{R}{h} \log \frac{2h}{R} \propto \mathcal{E}_{xt}^2. \quad (1.35)$$

حيث $2\pi R\sigma_A$ كثافة الشحنة النوعية في بعد واحد للنانوتيوب SWNT، σ ، تتناسب مع الجهد الخارجي أي المجال الخارجي \mathcal{E}_{xt} .

المعادلة (1.35) تبين ان تأثير الاستقطاب العرضي على التركيب الطبقي يكون من الدرجة الثانية في المجال الخارجي، ويتوافق جيد مع نظري الاستجابة للمواد العازلة plain dielectric response theory [47,48]، في حين تأثير صورة الشحنة خطي في المجال الخارجي \mathcal{E}_{xt} ، ولهذا فان انفصال المستويات المتحللة نتيجة مركبة ثنائي القطب سوف تكون اقل أهمية من الانفصال نتيجة المركبة المنتظمة: $\sigma_0 \equiv \int_0^{2\pi} \sigma(\beta)d\beta$ ، على الأقل في حالة المجال الضعيف. وهذا يثبت ان افتراضنا بان كثافة الشحنة σ مستقلة عن δ كان افتراضاً صحيحاً.

نحن افتراضنا في هذا الجزء ان نظرية الاضطراب في حالة تقريب خطي في μ (أو مكافئ لـ σ) متحقق. وقيد واحد فقط يمكن أن يتبع هذه الفرضية ان الجهد الخارجي يجب أن يكون صغيراً جداً.

نحن أهملنا هنا ثنائيات القطب المستحثة في كثافة الشحنة. وهذا يكافئ الخط الضعيف في الطبقات الفرعية، وهذا الافتراض قد لا يكون متحقق في نطاق كبير من النانوتوب أو في حالة المجال الخارجي القوي. تأثير المجال القوي على تركيب الطبقات سوف يناقش في القسم التالي.

حتى الآن نحن طورنا نظرية كمية للتعديل في SWNT Dos بواسطة الجهد المستحث من خلال توازن كثافة الشحنة، بالاعتماد على ان الفرضية (1.29) متحققة. ومن الممكن اعتبار أجهزة النقل بنفس الطريقة طالما ان توزيع شحنة النانوتيوب لا زالت تعطى بواسطة كثافة الاتزان الجزئي. وفي حالة وجود تيار كهربائي متدفق في النانوتيوب فانه يجب استخدام معادلة مختلفة عن المعادلة (1.29) لكثافة الشحنة. وعلى سبيل المثال في حالة الاتزان الجزئي المؤقت $n(x)$ فانه سوف يتم استخدام (1.5) و (1.6) كما هو موضح في القسم الأول.

1.5 الشروط الكمية

هندسة التركيب الطبقي

في التراكيب النانوية لأشباه الموصلات، والتي هي أساس تقنية النانو العصرية فإن بعض الخصائص الالكترونية سوف تعتمد على حجم التركيب نفسه. على سبيل المثال نصف قطر النانوتيوب SWNT. وللعديد من التطبيقات مثل المفاتيح switches فإنه من المهم ان تكون قادرة على تغيير الخصائص الالكترونية بتطبيق إشارة خارجية مثل إشارة كهربية او ضوء الخ.

التفاعل مع طبقة القاعدة، كما تم مناقشته في القسم الأخير، من الممكن ان يعود إلى تعديل في نانوتيوب DoS نتيجة للزوال التلقائي للتماثل في ميكانيكا كم هاملتونيون. عندما يطبق جهد خارجي على النظام فإن التغيرات سوف تكون مثيرة وقد ينتج عنها تأثيرات مختلفة وتطبيقات جديدة.

نحن نعرض هنا طريقة للتحكم في خصائص الـ SWNT الالكترونية بطريقة هندسية لتركيب الطبقات. وفي هذا القسم سوف نعرض طريقة استخدام مجالات كهربية خارجية للتحكم في هندسة التركيب الطبقي للـ SWNTs.

1.5.1 فتح وإغلاق فجوة الطاقة في مجال منظم

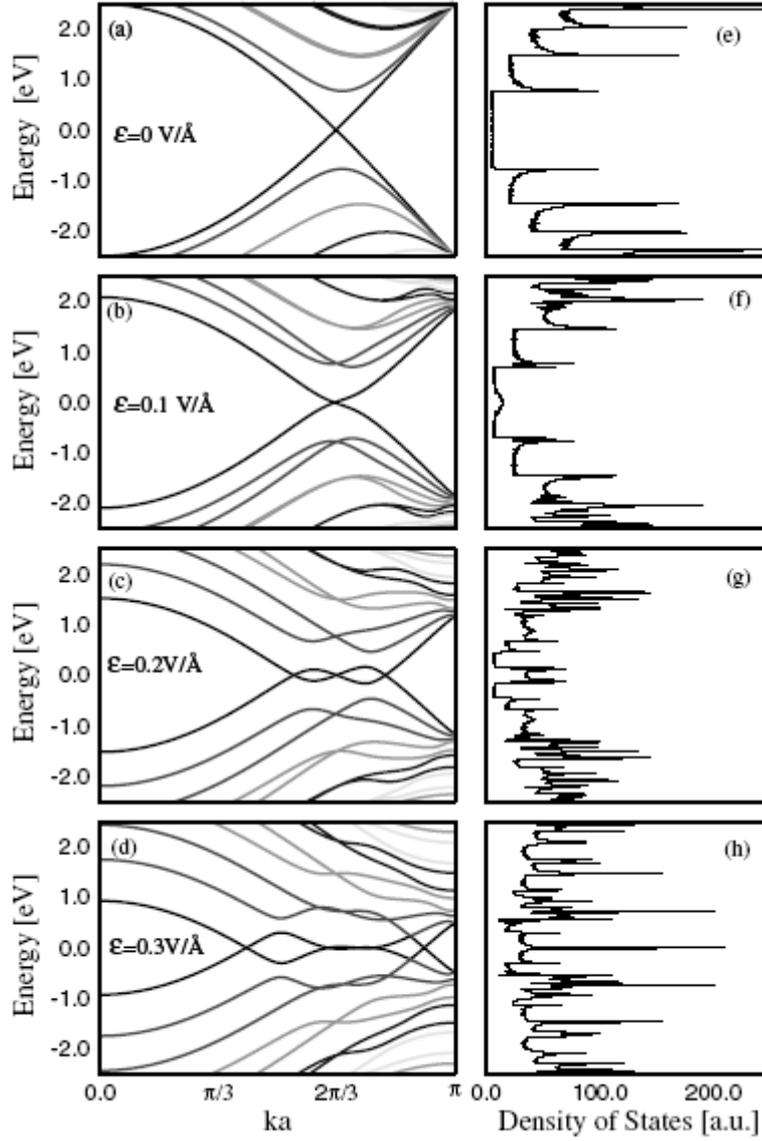
أولاً نحن نعتبر ان تأثير المجال المنتظم على التركيب الطبقي للنانوتيوب. ونؤكد على إن المجال الكهربي المفترض انه منتظم في أبعاد النانوتيوب، أي في حدود 1nm. وأي الكترود يستخدم سيكون أكبر بكثير من هذا. ولهذا فإنه إذا لم يكون هناك جهد خاص لإنتاج مجال قوى متغير في جهاز تأثير المجال Field-Effect device فإن المجال للبوابة ونقاط الاتصال سوف يكون منتظم في أبعاد النانومتر. نحن لاحظنا إن التيوب المشحون نفسه هو مصدر للمجال الغير المنظم اذا ما تم وضعه بالقرب من سطح مستقطب، ولكن هذا التأثير تم الحديث عنه مسبقا في القسم 1.4.

التغيرات في التركيب الطبقي تصنف على أساس تماثلية النانوتيوب. في المجال الكهربي المنتظم فإن النانوتيوب armchair تبقى معدنية، في حين الانتقال معدن - عازل يحدث في النانوتيوب الشبه معدنية. وهذا يعني انه بزيادة المجال الخارجي فإن الثابت DoS للنانوتيب SWNT الشبه معدني يتغير بالقرب من مستوى فيرمي. وعند مجال ما تقل DoS إلى الصفر عند مستوى فيرمي والفجوة الممنوعة تفتح. تكبر الفجوة مع زيادة شدة المجال إلى ان يصل المجال إلى قيمة حرجة، ثم يقل بعدها. شدة المجال الحرجة تتناسب عكسيا مع مربع نصف قطر النانوتيوب كما سوف نناقش هذه النقطة بالتفصيل بعد قليل.



الطريقة المستخدمة هنا لنمذجة تأثير المجال الكهربائي المستعرض على التركيب الطبقي هي direct diagonalization of a single π orbital TB Hamiltonian، هذا مع حساب الحالة الكهروستاتيكية الذاتية لتأخذ في الحسبان تأثير الحجب screening effect. وفي الحدود المسموح بها للمجال الضعيف، فإن التغيير في الجهد الكهربائي على طول محيط النانوتيوب SWNT تكون اقل بكثير من الطاقة بين الطبقات الفرعية المتجاورة، $V = e\mathcal{E}R \ll \Delta E_m \sim \hbar v_F/R$ ، حيث m تشير إلى رقم الطبقة، و $v_F = 3b\gamma/2$ هي سرعة فيرمي/ و γ هي hopping integral و b مسافة الرابطة بين ذرة كربون وأخرى. وعليه فإن نظرية الاضطراب من الممكن ان تستخدم للحصول على تقريب تحليلي لاعتماد فجوة الطاقة على المجال المطبق. عندما يكون المجال كبير كفاية لدمج الطبقات الفرعية ولكن ليس كبيرا جدا لتدمير المدارات π بمعنى ان $e\mathcal{E}R \geq \Delta E_m$ و $e\mathcal{E}b < \gamma$ ، و ان تتغير تركيب الطبقات بشكل نوعي.

الشكل 1.8 يظهر طبقات الطاقة للـ [10,10] نانوتيوب armchair في المجال الكهربائي لقيم مختلفة من الشدة تتراوح بين 0 و $0.3V/\text{Å}$. الطبقتين الأقل تكونان عادة متقاطعتين، حتى في مجالات كبير عندما تكون التركيب الطبقي معدل بشكل ملحوظ [46]. عندما $\mathcal{E} \simeq 0.1 V/\text{Å}$ (انظر الشكل 1.8b)، تزاوح نقاط فيرمي نحول النقطة Γ ($k=0$) و الطبقتين الأقل تتسطحان بالقرب من نقاط فيرمي. وفي نفس الوقت كل المستويات التي تحللت بالنسبة للعزم الزاوي $\pm m$ تنفصل. الانفصال يصبح أكثر وضوحا بالقرب من الطبقات الدنيا، مشابهة للانفصال التلقائي الذي وضعناه في القسم السابق. وعندما تزداد شدة المجال (Fig. 1.8(c,d)) فإن ادني طبقات فرعية تظهر عقد nodes مزدوجة، في حين ان العقدة الأولى تتحرك بالقرب من $k=0$.

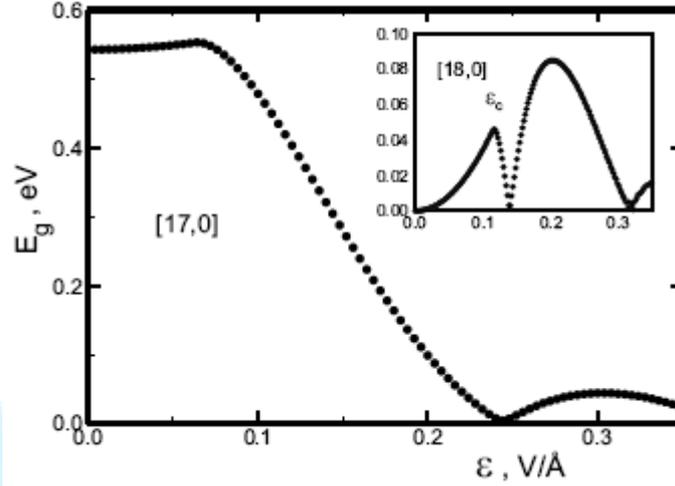


الشكل 1.8 التركيب الطبقي (a,b,c,d) و DoS (e,f,g,h) لـ [10,10] نانوتيب armchair عند عدة مجالات كهربية متعددة $E = 0, 0.1, 0.2$ and $0.3V/\text{\AA}$

التعديل في التركيب الطبقي يظهر بوضوح في كثافة حالات النانوتيوب كما في الشكل 1.8(d-h). يظهر ارتفاع في منحنى الطاقة المنخفضة وتزايد في شدة المجال. تعزيز DoS بالقرب من $E=0$ ناتج عن التسطح والانحناء في ادني طبقتين. وفي المقابل ينتهي التحلل $\pm m$ في كافة الأزواج المزاحة ويتحول الانفصال لقمة Van Hove المفردة إلى مزدوجة.

أما في حالة التيوب المنشاري شبه المعدني فان الفيزياء المتعلقة به مختلفة تماماً. عند مجالات ضعيفة، فجوة الطاقة تفتح عند نقطة فيرمي $k=0$ ، كما هو موضح في الشكل المصغر داخل الشكل 1.9 للنانوتيوب [18,0].

تزداد فجوة الطاقة بدالة من الدرجة الثانية مع زيادة شدة المجال حتى يصل للقيمة الحرجة \mathcal{E}_c . قيمة المجال الحرج تلك تعتمد على نصف القطر والتي تعطى بتقريب تحليلي على النحو التالي:



الشكل 1.9 يوضح التغير في فجوة الطاقة للنانوتيوب المتعرج [17,0] مع زيادة شدة المجال. والشكل المصغر يظهر نفس العلاقة للنانوتيوب [18,0]

$$e\mathcal{E}_c R \sim \Delta E_m \sim \hbar v_F / R, \quad (1.36)$$

عندما ينخفض الجهد الكلي فإنه يصبح مقارن بفرق الطاقة بين الطبقات المتجاورة. عندما يزداد المجال بعد القيمة الحرجة \mathcal{E}_c ، فإن الطاقة تقل وتزاح بعيدا عن نقطة مركز فيرمي $k=0$ وتتفصل إلى شقين. ونتيجة لذلك فإن الفجوة لا تزيد عن قيمة حرجة بعدها أي زيادة في المجال سوف يؤدي إلى غلق الفجوة (انظر الشكل 1.9). أكبر قيمة لفتحة فجوة الطاقة عند \mathcal{E}_c تم تعيينها بواسطة نظرية الاضطراب على النحو التالي:

$$E_g \sim \frac{(e\mathcal{E}_c R)^2}{6\gamma} \sim \frac{v_F^2}{6\gamma R^2}. \quad (1.37)$$

القيمة العظيمة للفجوة تقل مع زيادة نصف قطر SWNT وتصبح مهملة في النانوتيوب التي لها نصف قطر أكبر من 8\AA . وفي المقابل لاحظنا انه في حالة النانوتيوب SWNT الرفيعة فان الاختلاط بين $\sigma-\pi$ يسبب وجود فجوات ثانوية تعمل على تعديل نتائج TB التي وردت في الأعلى.

النانوتيوب شبه الموصل ذو الشكل المتعرج يظهر تغير شديد في وجود مجال كهربي عمودي. الشكل 1.9 يوضح تغير فجوة الطاقة للنانوتيوب [17,0] مع زيادة شدة المجال. في البداية تبقى فجوة الطاقة ثابتة عند مجالات ضعيفة. عندما يصبح الاضطراب مقارن مع فجوة الطاقة الأصلية أي $e\mathcal{E}_c R \sim E_g \approx 0.53\text{ eV}$ ، كلا من أسفل طبقة التوصيل وأعلى طبقة التكافؤ تزدادان بعيدان عن نقطة فيرمي الأصلية $k=0$ وتغلق الفجوة. عند المجالات الأكبر من المجال الحرج فان الفجوة تعود لتفتح مرة أخرى. شدة المجال الحرج \mathcal{E}_c تتناسب عكسيا مع مربع نصف القطر، كما هو الحال تماما في النانوتيوب شبه معدني. لاحظنا في نوعين مختلفين من النانوتيوب شبه الموصل (تحدثنا عنه في المقدمة) يكون سلوكه مختلف في المجالات المنخفضة. الشكل 1.9 يظهر ان الفجوة للنانوتيوب [17,0] لها قيمة عظمى عن مجال ضعيف تقريبا 0.7V/\AA . بالمقارنة فان الفجوة في النانوتيوب SWNT [19,0] تقل مع المجال [47].

نحن نؤكد على ان العديد من التقنيات العملية، من تشتت رمان Raman scattering إلى مسح الطيف النفقي scanning tunnelling spectroscopy يستخدم مجالات كهربية عالية لفحص وقياس الخصائص الالكترونية للنانوتيوب، والتي من الممكن ان تتداخل وتشوش التركيب الالكتروني لها. ان نتائجنا العملية من الممكن ان تساعد في فهم الاختلاف بين القياسات العملية والمتوقعة لفجوة الطاقة، وكثافة المستويات LDoS، وللكثافة الفعالة، ولموضع قمم Van Hove. ومن جهة أخرى فان السلوك الفريد لل SWNT تحت مجال كبير يزودنا بطريقة فعالة للتحكم في خصائصه الالكترونية وتعديل موصلية الأجهزة كما سوف نناقش ذلك في القسم الأخير.

1.6 مبدأ عمل الأجهزة المبتكرة

ترانزستور تأثير المجال المعدني (METFET)

في القسم الأخير أثبتنا نظريا انه بالإمكان تعديل الخصائص الالكترونية لل SWNT عن طريق تطبيق مجال خارجي، حيث يتم تغير فجوة الطاقة وهذا يؤدي إلى تحويل النانوتيوب من الحالة المعدنية في مجال يساوي صفر إلى حالة شبه الموصل او الحالة العازلة عند درجات حرارة منخفضة. هذا التأثير الكمي الجديد يمكن استخدامه في تصميم أجهزة الكترونية جديدة [49,50].



ترانزستور تأثير المجال Field-Effect Transistor هو احد الأجهزة الأساسية التي تعتمد عليها التكنولوجيا الحالية. والاتجاه نحو قياسات نانوية يدعو إلى زيادة مستويات التطعيم لتحسين الموصلية في FETs [51]. في النهاية فان الترانزستورات النانوية لكي تصبح لها موصلية قريبة من المعدن فان هذا يتطلب زيادة مستويات التطعيم. وهذا يعتبر تحديا تقنيا لان الأجهزة المتناهية في الصغر نقل موصليتها نتيجة لتأثير الكمي ونتيجة لعدم التناسق في المادة ولأسباب أخرى.

من جهة أخرى فان توصيل FET في حالة OFF يجب ان يكون اقل ما يمكن لتقليل التيار. وهذا يتطلب ان تكون خصائص المادة قريبة جدا من الحالة العازلة، وهذا يتعارض مع الحالة ON حيث يتطلب ان تكون المادة موصلة للتيار بقدر الإمكان وهذا يعني ان تغير خصائص المادة أثناء عمل الجهاز. وقد تم ترشيح استخدام مواد غريبة (ممكن ان تتغير حالتها من الحالة الموصلة إلى الحالة العازلة [52]) للتغلب على هذه المشكلة. على كل حال نحن حديثا قدمنا طريقة للتحكم في حاملات الشحنة في FET المعدني ذو البعد الواحد (1D METFET) باستخدام المجال الكهربائي الغير منتظم.

من المعلوم ان الانتقال الالكتروني يصل إلى حده الأقصى في المعدن/أشباه الموصل بسبب التشتت الخلفي لالكترونات. بالإضافة إلى ان armchair SWNT لها تماثل خاص في شبكتها البلورية تسبب في انضغاط للتشتت الخلفي عند مستوى فيرمي عندما لا يوجد تطعيم doping، وهذا يعزز من حالة التوصيل.

نحن نقدم لاستخدام كلا من (a) تشتت ضعيف في بعد واحد و (b) حجب ضعيف في بعد واحد لتصميم قناة معدنية ببعد واحد يتحكم في بوابتها بطريقة كهروستاتيكية. العديد من التركيب والمواد من الممكن استخدامها لإنتاج 1D METFET، في هذا القسم سوف نعتد على كربون SWNT كمثال.

ان استخدام نانوتيوب معدني ذو جدار مفرد metallic single-wall nanotubes (M-SWNTs) لملاحظة إمكانية الحصول على تأثير المجال في بعد واحد عندما يكون حجم التيوب صغير جدا (نصف قطر الـ SWNT يساوي 0.7nm تقريباً). إضافة إلى ذلك وبمتابعة ما اكتشفه باحثون شركة IBM بدمج النانوتيوب المعدني مع شبه الموصل (S-SWNT's) في الدوائر، حيث ان M-SWNT's تعمل كرابط والـ S-SWNT's تعتبر أجهزة عملية [19, 53-55]، يمكن ان تستخدم التيوب المعدنية كترانزستورات. الـ METFET سوف يضيف أجهزة قطبية للنوع p-type للنانوتيوب S-SWNT's بدون إضافة المزيد من التطعيم وبدون تعقيدات التحكم في دالة الشغل. الـ METFETs ممكن ان تدمج في الدوائر التناظرية لـ CMOS.

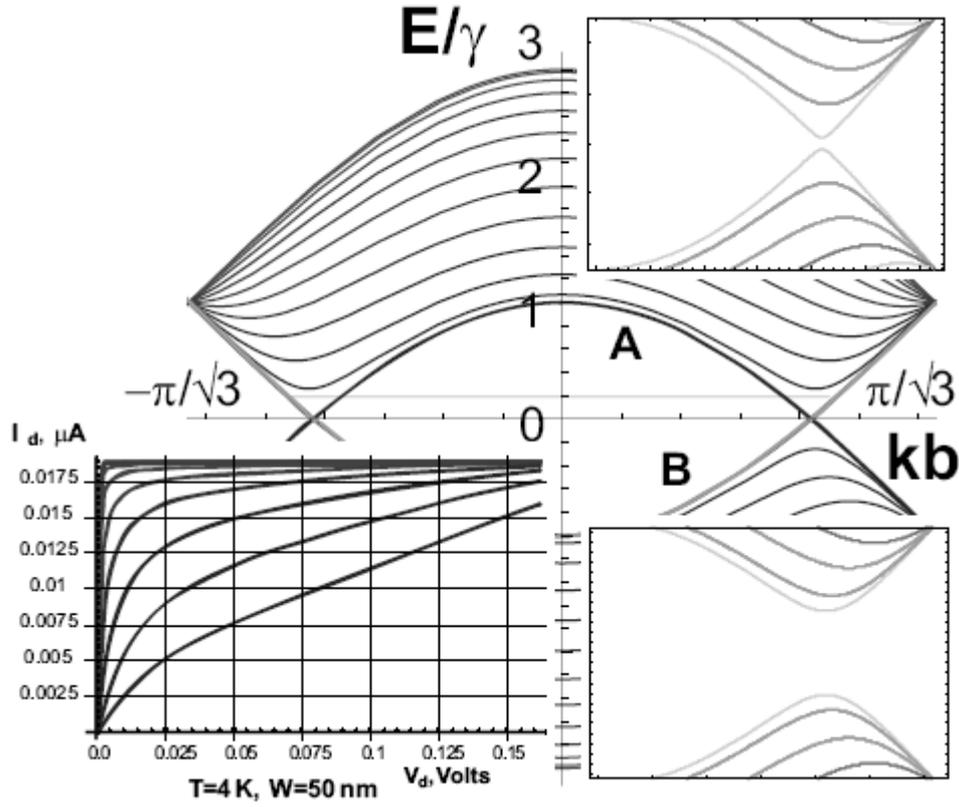


النانوتيوب SWNT المثالي نظرياً يمتلك موصلية عالية جداً. كما وضحنا في القسم السابق فإن بعض SWNT تتعرض إلى تحول من معدن إلى شبه موصل أو (معدن-عازل) لتمكنا من الحصول على وظيفة الترانزستور.

في التالي سوف نقدم مفهوم البوابة المحلية local gating. المجالات الكهربائية بانحدار كبير أو بتغير كبير من الممكن أن تؤدي إلى انفصال في التماثل المستحث (بالمقارنة مع الانفصال في التماثل التلقائي الذي شرح في القسم 1.4). ونتيجة لذلك فإن فجوة الطاقة سوف تفتح، حتى في نانوتيوب armchair المعدني. كذلك فإن استخدام البوابة المحلية تسمح بالحصول على مجال كهربائي قوي في منطقة ضيقة. ولهذا فإن استنزاف الشحنة سوف يكون أسهل. بالإضافة إلى ذلك فإن توزيع المجال الكهربائي الغير منتظم يشكل مصدراً للتشتت والذي يعدل الموصلية في منطقة البوابة في حين أن البوابة المتجانسة تؤثر على القناة ككل وتشارك قليلاً في التشتت.

1.6.1 التماثل وقواعد الاختيار في نانوتيوب Armchair

استخدام M-SWNT's في METFET يعتبر ميزة هامة لأن لها معدل تشتت فونوني منخفض [56] ومعدل تشتت منخفض بواسطة الشوائب مع مدى كبير للجهد [57,58]. هذا يتبع من التماثل المطبق على الانتقال بين الطبقات الفرعية المتقاربة في النانوتيوب armchair SWNT's. ينتج عن هذا زيادة كبيرة في الموصلية في armchair M-SWNT's عند مستويات تطعيم منخفضة. قواعد الاختيار هذه مهمة أيضاً لدراستنا وسوف يتم التعامل معها في الفقرة التالية.



الشكل 1.10 التركيب الطبقي لـ M -SWNT [10,10] armchair. الطبقات الفرعية التي لها عدد كمي $m=0, 1, 2, \dots, 9$ موضحة من الأعلى إلى الأسفل في طبقة التوصيل (ومن الأسفل إلى الأعلى في طبقة التكافؤ). الطبقتين المتجاورتين عديمتا الكتلة A و B لهما نفس $m=10$. والشكل المصغر يوضح عرض مكبر لنقطة فيرمي عندما تكون الفجوة مفتوحة في M -SWNT بسبب الاضطراب كما تم توضيحه في النص. أما الشكل في الجانب الأيسر من الأسفل يوضح كيف تنمو الفجوة بصورة خطية مع الجهد المطبق. والشكل التوضيحي في الركن الأيسر العلوي يوضح IVC لـ METFET عندما يكون اتساع البوابة 15nm .

الدالة الموجية للإلكترون في طبقة التوصيل والتكافؤ تكتب على شكل حاصل ضرب لدالة الغلاف وسعة pseudospin في وحدة الخلية، (1.25). وبالعودة إلى معلوماتنا عن الـ pseudospin فإن لها إشارة معاكسة ± 1 لحالات طبقات التوصيل وطبقات التكافؤ، والتي تكون متماثلة بالنسبة لمستوى فيرمي عند تطعيم يساوي صفر:

$$E_{m,k,+1}^{(C)} = \zeta E_{mk\zeta} = -E_{m,k,-1}^{(V)} \quad (1.38)$$



لكل زوج متماثل من إلكترون وفجوة لنانوتيوب armchair له $m=0, 1, \dots, (n-1)$ (انظر الشكل 1.10)، فإن عدد الكم الزاوي والمحوري يكون هو نفسه ولكن العزم pseudospin يكون معاكس في الإشارة. فإذا اختيرت مدارات وحدة الخلية لتكون متعامدة: $\langle \varphi_I | \varphi_{II} \rangle$ ، يكون التكامل للمستويات المتماثلة في طبقة التوصيل وطبقة التكافؤ تساوي صفر $\langle \psi_{m,k,-1} | \psi_{m,k,+1} \rangle = 0$. نفس الشيء يتحقق لعناصر المصفوفة المتداخلة بين الطبقتين عديمة الكتلة (A و B) (تتقاطعان عند مستوى فيرمي).

التقريب المشترك في نظرية الحالة الصلبة يكون في التغيرات في الجهد الخارجي في حدود أبعاد وحدة الخلية (نظرية الكتلة الفعالة). عناصر المصفوفة للجهد تكون عبارة عن حاصل ضرب تكامل وحدة الخلية المتداخلة في مركبات فورير للجهد.

$$\langle \psi | U | \psi \rangle = \langle \varphi | \varphi \rangle U_q. \quad (1.39)$$

هناك دليل واضح على ان هذا التقريب يؤدي إلى تشتت يساوي صفر بين الطبقتين المتجاورتين في النانوتيوب armchair أي $\langle \varphi | \varphi \rangle \equiv 0$. هذا يوحي لانتقال باليستي في قنوات Armchair SWNT⁵. ولهذا تعتبر فكرة نانوتيوب armchair مرشح جيد لاستخدامه في 1D METFET لأنها توصل في الحالة ON والتي تكون مساوية لـ $2G_0 = 2e^2/h$ ، أي بمقدار أربعة مرات حالة التوصيل الكمي (2 للعزم و 2 لقنوات الفضاء) وهي القيمة العظمى لموصلية الدائرة 1D بوصلات leads ميكروسكوبية⁶.

لتوليد انتقال من حالة المعدن إلى أشباه الموصلات وفتح الفجوة الممنوعة في تركيب طبقات النانوتيوب فإنه يجب الوصول لحالة الاستنزاف لـ DoS عند مستوى فيرمي. هناك طبقتين فرعيتين متداخلتين A و B تساهمان في DoS عند تلك الطاقة، كما في الشكل 1.10. من معلوماتنا في ميكانيكا الكم فإن هذين المستويين من الطاقة يتداخلان إذا كان هناك على الأقل عدد كمي واحد مختلف لهذه المستويات. في حالة النانوتيوب armchair فإن هذا العدد الكمي هو pseudospin. ولهذا فإنه يجب ان يتم كسر التماثل وخط الطبقات المتداخلة. أي تأثير للمجال سوف يكون متناسبا مع فتحة فجوة الطاقة بسبب هذا الخلط.

1.6.2 فتح الفجوة وإغلاقها في النانوتيوب armchair

فجوة الطاقة E_g التي نتجت من كسر التماثل لنانوتيوب armchair بالنسبة إلى عدد الكم pseudospin، تتناسب مع عناصر المصفوفة للجهد الخارجي بين الطبقات A و B. عنصر المصفوفة عبارة عن حاصل



ضرب التكامل المتداخل لوحدة الخلية ومعامل تحويل فورير للجهود $U_{q,\delta m}$ حيث ان $U_{q,\delta m}$ لا تساوي صفر عندما تكون $\delta m = 2Qn$ حيث $Q=0, 1, \dots$ و n هي رتبة \downarrow armchair SWNT [n,n]. تتناسب الفجوة خطيا مع الجهد المطبق (انظر الشكل المصغر في الشكل 1.10). لا يوجد هناك حد أقصى لقيمة فتحة الفجوة في هذه الحالة، ما عدا للحالة الطبيعية بشرط ان المجال الخارجي لا يسبب قطع كهربائي electric breakdown. إضافة إلى ذلك عندما يكون المجال مقارنا بالمجال الذري فان نموذج TB لا يصبح متحققا في هذه الحالة.

الخط المباشر للطبقات المتقاطعة صعب لان ذلك يتطلب كسر التماثل والحفاظ على تماثل زاوي كامل للجهود المطبق مثل الانتقال بين المستويات لنفس العزم الزاوي $m=n$ يكون مسموحا به. هذا يتطلب عزم كبير جدا على الأقل $\delta m = 2n$ [60]، وهذا يعتبر تحديا كبيرا لتكنولوجيا المستقبل.

على كل حال إذا تحقق الشرط الأول (كسر التماثل)، فان الفجوة ممكن ان تفتح بواسطة الخلط غير المباشر للطبقات عند تطبيق جهد عالي [46]. بالأخص بتطبيق مجال منتظم على طرفي armchair SWNT نحصل على فجوة طاقتها تفوق جهد البوابة بثلاث مرات. نظرية الاضطراب للنانوتيوب تتنبأ بان أعظم فجوة يعتمد فقط على حجم التيوب والقياسات تكون R^{-1} أو n^{-2} [46].

1.6.3 إغلاق النانوتيوب الشبه معدني المتعرج

في حين ان فتح فجوة الطاقة في نانوتيوب armchair المعدني يتطلب توفير تماثل كروي لجهد البوابة، فان النانوتيوب الشبه معدني يعتبر الأنسب في مجال هندسة فجوة الطاقة كما لاحظنا في القسم 1.5. فان المجال الكهربائي الخارجي المطبق على طرفي النانوتيوب الشبه معدني المتعرج يفتح البوابة كنتيجة لتأثير ستارك Stark effect. ولهذا فان فجوة الطاقة تتناسب مع مربع الجهد. تماما مثل حالة تأثير ستارك في نانوتيوب armchair، هذه الفجوة سوف تغلق بزيادة الجهد الخارجي. ولهذا فان أعظم فتحة فجوة والتي تعرف باستخدام نصف قطر النانوتيوب $E_g^{(c)} \sim R^{-2}$ انظر المعادلة (1.37). هذا التوقع التحليلي تم التأكد منه بواسطة حسابات عددية في [41,46]. لاحظنا هنا انه بالرغم من ان فتح فجوة الطاقة أسهل في حالة النانوتيوب الشبه معدني، لان ذلك لا يحتاج إلى تطبيق قواعد الاختيار للانتقال بين الطبقات المتجاورة. عند تصميم مفتاح الكتروني فعال فانه يجب ان نوازن بين هذين العاملين. معدل التشتت يعتمد على عملية التشتت نفسها. من المهم ان نحصل على مدى طويل للتشدد ومدى صغير للجهد الكهروستاتيكي للبوابة حتى يتم التحكم بفاعلية في قناة FET.

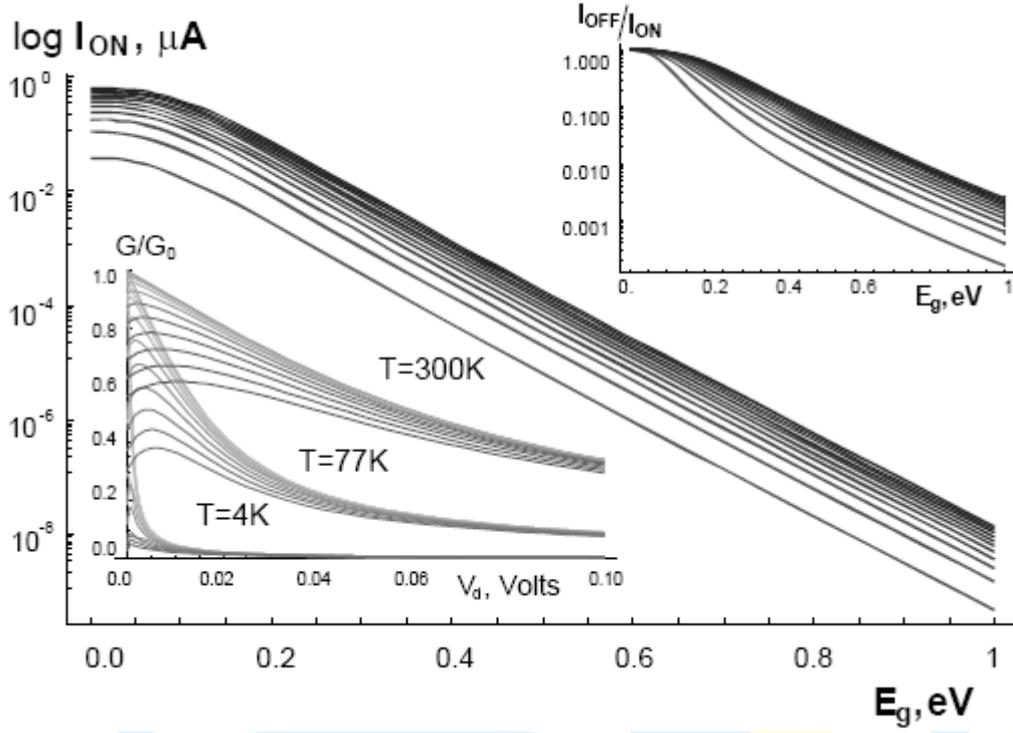
1.6.4 تعديل الموصلية الباليستية

بعد هذا النقاش حول العمليات الممكنة على الانتقال عازل - موصل، فإننا نقوم بتطبيق مجال كهربي غير متجانس مركز على منطقة صغيرة نسبياً لنانوتيوب METFET. هذا المجال غير المتجانس قادر على فتح فجوة الطاقة في أشباه الموصلات في DoS ل armchair في منتصف الفجوة الممنوعة في منطقة البوابة (عند مستوى فيرمي، والذي يجب أن يكون في منتصف الفجوة الممنوعة في منطقة البوابة) يكون مقموعا عند $T=0$. عملية التدفق الكمي النفقي يجب أن تدخل في حساب التيار لان الكتلة الفعالة للإلكترون في SWNT قليلة جداً. ولهذا فان معدل التدفق النفقي خلال المنطقة الممنوعة يكون عالياً. وقمنا بوصفه بواسطة حساب معامل التشتت الخلفي والانتقال داخل Wentzel–Kramers–Brillouin approximation.

أي فتح في البوابة تستحث فجوة على امتداد قناة METFET وهذا سوف ينتج جهد عن الحاجز، والذي سوف يعرقل التوصيل. هذا من الممكن ان يكون بسبب قوة كولوم عند الوصلة، والذي سوف تناقشه فيما بعد. معامل الانتقال دالة آسية في ارتفاع الحاجز، أي ان الفجوة $E_g/2$ ، وطول الحاجز. ولهذا فان نسبة الإغلاق على الفتح OFF/ON يتم التحكم بها من خلال المعامل E_g والطول الكلي لمنطقة البوابة.

الشكل التوضيحي المصغر في الشكل 1.10 يوضح منحنيات IV (الجهد والتيار) ل METFET المصنوع من نانوتيوب معدني armchair نصف قطره 1.4nm (SWNT [10,10]) عند $T=4K$. افترضنا ان البوابة المحلية باتساع قدره 15nm من الممكن ان تستخدم في تطبيق جهد غير منتظم على قناة 1D وفجوة مفتوحة. الجزء العلوي في منحنيات IV يناظر جهد بوابة يساوي صفر (أي بدون فجوة). يتم تعيين التيار عندما تكون القناة مفتوحة بالكامل من خلال استخدام توصيلات اومية، وبهذا، بواسطة الموصلية الكمية $2G_0$. بزيادة جهد البوابة نلاحظ ان نقصان كبير في التيار ناتج عن فتح الفجوة كذلك استنزاف للإلكترونات في هذه المنطقة، وهذا هو تأثير المجال field-effect. نحن عرضنا منحنيات الجهد والتيار IVCs عند العديد من قيم جهد البوابة الذي يقابل فتحة فجوة تصل إلى 1eV لأقل منحنى.

من الطرق التي قمنا بدراستها لتقليل الموصلية في هذا القسم هي طريقة التشتت الباليستي ballistic scattering للإلكترونات بواسطة جهد الحاجز الناتج عن مجال البوابة المحلية، أو النقصان في معامل الانتقال الكلي وهي الموصلية بدون أبعاد (ليس لها وحدة). قمنا برسم معامل المصلية لقناة METFET كدالة في استنزاف الجهد وهذا موضح في الشكل المصغر على الجزء الأيسر السفلي في الشكل 1.11. مجموعة من المنحنيات موضحة لدرجات حرارة مختلفة. في المجموعة العلوية فان المنحنيات عند درجة حرارة الغرفة ويمكن الملاحظة بوضوح الإخماد في الانتقال عبر منطقة البوابة كدالة في زيادة الفجوة: من 0 إلى 0.2eV (من الأعلى إلى الأسفل). ولمجموعات أخرى عند درجة حرارة اقل $T=77K$ و 4K فان هذا التأثير يكون أكثر حدة.



الشكل 1.11 يوضح العلاقة بين نسبة التيار OFF/ON عند درجة حرارة الغرفة مع فتحة الفجوة. اتساع البوابة المحلية 50nm. الشكل المصغر في الجز العلوي على اليمين يوضح نسبة التيار OFF/ON عند درجة حرارة T=4K واتساع البوابة 15nm. كل منحنى من الأسفل إلى الأعلى يناظر الزيادة في استنزاف الجهد من 1 إلى 20meV. في الشكل المصغر في الجزء الأيسر السفلي من الشكل يوضح استنزاف الجهد عند درجات حرارة T=4K, 77K, and 295K من الأسفل إلى الأعلى، وجهد البوابة من 0 إلى 0.2eV من الأعلى إلى الأسفل.

1.6.5 نتائج ومناقشة

سوف نناقش نسبة OFF/ON لـ METFET ونبين ان الحد النظري لأصغر تصميم لـ SWNT METFET's من الممكن ان يصل إلى 10^{-6} . الشكل 1.11 يوضح عند درجة حرارة الغرفة T=300K التيار الباليستي المتدفق عبر METFET كدالة في فجوة الطاقة E_g (والتي تتناسب طرديا مع جهد البوابة). هذه تم حسابها لجهاز ذو بوابة عريضة في حدود 50nm. وفجوة مقدارها 1/2eV فان النسبة OFF/ON عند درجة حرارة الغرفة تكون تقريبا 10^{-3} لـ $V_d \sim 20\text{meV}$ ومن الممكن ان تصل إلى 10^{-5} لـ $V_d \sim 1\text{meV}$. تم ملاحظة نسبة OFF/ON مرتفعة لـ S-SWNT في Schottky barrier FET's [19,61]. لاحظ ان الفرق الكبير في التوصيلية عندما يكون جهد البوابة يساوي صفر من الممكن ان يعين لأنواع مختلفة من النانوتيوب [54,62]. الشكل المصغر في الشكل 1.11 يوضح التيار عند بوابة قصيرة (15nm) عند درجة حرارة 4K معايرة عند التيار ON عند جهد يساوي صفر.



القناة الخاصة بـ 1D METFET تمتلك كثافة عالية للمستويات أي عالية التوصيل كما في المعدن في حالة غياب جهد البوابة.

يمكن تشكيل البوابة المحلية للـ 1D METFET بطرق مختلفة، على سبيل المثال رأس المسح في الميكروسكوب من الممكن ان يمثل بوابة محلية، او طرف رفيع جدا موصل بالنانوتيوب أو غير ذلك. في هذه الدراسة قمنا بنمذجة منحنيات IV لـ METFET's لبوابات محلية مختلفة الاتساع من 5 إلى 50nm. الحد الأدنى هو حجم رأس المسح scanning tip والذي يمكن ان يلامس قناة الـ M-SWNT، في حين ان الحد الأقصى يصل إلى حجم رابط نانوي معدني [63] والذي يتم تصنيعه بطريقة الليثوغرافي بالقرب من قناة .SWNT.

لاحظنا ان نقاط التقاطع للمعدن وشبه الموصل عند حافة البوابة هي مكان تجمع للشحنة. وبهذا المعنى فان حدود تقاطع المعدن وشبه الموصل تصبح مكثف 1D وبسعة تساوي تقريبا $\sim W/2\ln(W/R)$. وبالتالي إذا ما تم إهمال الحد اللوغارثمي فان السعة تصبح $\sim e^2/2W$ ، والذي يعني طاقة كبيرة لبوابة ضيقة. مواصفات وصلة النانوتيوب المعدن - شبه الموصل في SWNT هي كتلة فعالة كبيرة جدا وان يكون طول النفق كبيرا في حدود أجزاء النانومتر إلى عشرات النانومترات والمعدل النفقي tunneling rate كبير جدا. ولاندماج نفقي كبير بين جوانب وصلة المعدن - شبه الموصل فان تغيرات كمية للشحنة تزيل ارتباط كولوم وتزيل حاجز كولوم أيضا. ومن جهة أخرى فانه بتطبيق جهد البوابة من الممكن ان نقل التوصيل عبر الوصلة وبالتالي زيادة ارتباط كولوم. وهذا التأثير يزيد من تناقص تيار OFF في METFET.

هذا يقودنا أيضا إلى افتراض أسلاك نانوية حبيبية [65] كمادة ممكنة لـ 1D METFET. هذه الأسلاك أظهرت إنها تظهر حاجز كولوم عند درجة حرارة منخفضة. ويتوقع ان تغير هذه الأسلاك مصليتها عندما تتعرض لجهد خارجي.

لاحظنا انه باستخدام بوابات مزدوجة يمكن ان يكون مفيدا في 1D METFET لان البوابة الخلفية تتحكم في مستوى فيرمي والبوابة المحلية تتحكم في المصلية وفي المفتاح OFF/ON للقناة.

بالمقارنة مع الكترونييات السليكون فان نانوتيوب METFET فانه لن يكون حساسا للإشعاع. والسبب في هذا مساحة مقطع التصادم صغيرة [66] والتوصيل الحراري عالي جدا. كما ان كفاءة الأدوات والأجهزة المصنعة من النانوتيوب لا تعتمد على مستوى تطعيم المادة [67]. لاحظنا ان أجهزة النانوتيوب تظهر أداء جيد عند درجات



حرارة منخفضة ولهذا فإننا نتصور ان النانوتيوب المصنعة من METFET من الممكن أن تكون مطلوبة في تطبيقات الفضاء.

References

1. R.P. Feynman: There's plenty of room at the bottom: An invitation to enter a new field of physics. In: *Engineering and Science*, vol XXIII, No. 5, (Caltech 1960) pp 22–36
2. S. Iijima: *Nature* **354**, 56 (1991)
3. M. Damnjanović, I. Milošević, T. Vuković, B. Nikolić and E. Dobardžić: "Symmetry Based Fundamentals on Carbon Nanotubes", Chapter 2, in this volume.
4. Phaedon Avouris, Marko Radosavljević and Shalom J. Wind: "Carbon Nanotube Electronics and Optoelectronics", Chapter 9, in this volume.
5. R. Bruce Weisman: "Fluorescence Spectroscopy of Single-Walled Carbon Nanotubes", Chapter 8, in this volume.
6. Anand Jagota, Bruce A. Diner, Salah Boussaad, and Ming Zheng: "Carbon Nanotube – Biomolecule Interactions: Applications in Carbon Nanotube Separation and Biosensing", Chapter 10, in this volume.
7. M.S. Strano, M.L. Usrey, P.W. Barone, D.A. Heller and S. Baik: "The Selective Chemistry of Single Walled Carbon Nanotubes", Chapter 6, in this volume.
8. S. Huang and J. Liu: "Direct Growth of Single Walled Carbon Nanotubes on Flat Substrates for Nanoscale Electronic Applications", Chapter 4, in this volume.
9. T. Ando, A.B. Fowler, F. Stern: *Rev. Mod. Phys.* **54** (2), 437(1982)
10. J. Voit: *Rep. Prog. Phys.* **57**, 977 (1995)
11. N.R. Aluru, J-P. Leburton, W. McMahan, U. Ravaioli, S.V. Rotkin, M. Staedele, T. van der Straaten, B.R. Tuttle and K. Hess: "Modeling Electronics on the Nanoscale", in *"Handbook of Nanoscience, Engineering and Technology"*, Eds.: W. Goddard, D. Brenner, S. Lyshevski, G.J. Iafrate; (CRC Press 2002)
12. Dmitriy A. Dikin, Xinqi Chen, Frank T. Fisher and Rodney S. Ruoff: "Nanomanipulator Measurements of the Mechanics of Nanostructures and Nanocomposites", Chapter 12, in this volume.
13. M. Dequesnes, S.V. Rotkin, N.R. Aluru: *Journal of Computational Electronics* **1** (3), 313(2002)



14. T. Durkop, S.A. Getty, E. Cobas, and M.S. Fuhrer: *Nano Letters* **4**, 35 (2004)
15. Y. Cui, X. Duan, J. Hu, and C.M. Lieber: *J. Phys. Chem. B* **104**, 5213 (2000)
16. H. Hasegawa and S. Kasai: *Physica E* **11**, 149 (2001)
17. J.-R. Kim et al.: *Appl. Phys. Lett.* **80**, 3548 (2002)
18. Y. Zhang, A. Kolmakov, S. Chretien, H. Meitu and M. Moskovits: *Nano Letters* **4** (3), 403(2004)
19. S. Heinze, J. Tersoff, R. Martel, V. Derycke, J. Appenzeller, Ph. Avouris: *Phys. Rev. Lett.* **89**, 106801 (2002)
20. N.S. Averkiev and A.Y. Shik: *Semiconductors* **30**, 112 (1996)
21. H. Ruda and A. Shik: *J. Appl. Phys.* **84**, 5867 (1998)
22. K.A. Bulashevich and S.V. Rotkin: *JETP Lett.* **75**, 205 (2002)
23. S.V. Rotkin, V. Srivastava, K.A. Bulashevich, and N.R. Aluru: *International Journal of Nanoscience* **1**, 337 (2002)
24. S.V. Rotkin, H. Ruda, A. Shik: *International Journal of Nanoscience* **3** (1/2), 161 (2004)
25. S.V. Rotkin, H.E. Ruda, and A. Shik: *Appl. Phys. Lett.* **83**, 1623 (2003)
26. M. Abramovitz and I.A. Stegun: *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New-York, 1964)
27. T. Maemoto, H. Yamamoto, M. Konami, A. Kajiuchi, T. Ikeda, S. Sasa, and M. Inoue: *Phys. Stat. Sol. (b)* **204**, 255 (1997)
28. G.L. Harris, P. Zhou, M. He, and J.B. Halpern: *Lasers and Electro-Optics, 2001, CLEO'01. Technical Digest*, p.239
29. S.J. Wind, J. Appenzeller, R. Martel, V. Derycke, and P. Avouris: *Appl. Phys. Lett.* **80**, 3817 (2002)
30. X. Liu, C. Lee, and C. Zhou: *Appl. Phys. Lett.* **79**, 3329 (2001)
31. F. Leonard and J. Tersoff: *Phys. Rev. Lett.* **88**, 258302 (2002)
32. S. Luryi: *Appl. Phys. Lett.* **52** (6), 501 (1988)
33. M. Dequesnes, S.V. Rotkin, N.R. Aluru: *Nanotechnology* **13**, 120(2002)
34. S.V. Rotkin: in *Microfabricated Systems and MEMS - VI*, vol. PV 2002-6, Symposium - the Electrochemical Society Proceedings, P.J. Hesketh, S.S. Ang, J.L. Davidson, H.G. Hughes, and D. Misra, Eds. (ECS Inc., Pennington, NJ, USA 2002) pp. 90–97.
35. S.V. Rotkin, “Theory of Nanotube Nanodevices”, in *Nanostructured Materials and Coatings for Biomedical and Sensor Applications*, Editors: Y.G. Gogotsi and Irina V. Uvarova (Kluwer Academic Publishers: Dordrecht-Boston-London 2003) Vol. **102**, pp. 257–277
36. A. A. Odintsov, Y. Tokura: *Journal of Low Temperature Physics*, **118**, 509 (2000)
37. A.G. Petrov, S.V. Rotkin: *Nano Letters* **3** (6), 701(2003)
38. Y. Yaish, J.-Y. Park, S. Rosenblatt, V. Sazonova, M. Brink, and P. L. McEuen: *Phys. Rev. Lett.*, **92**, 046 401–1(2004)
39. S. Akita, Y. Nakayama, S. Mizooka, et al.: *Appl. Phys. Lett.* **79** (11), 1691(2001)
40. D. Lu, Y. Li, S.V. Rotkin, U. Ravaioli, and K. Schulten, *Nano Letters* **4** (12), 2383 (2004)
41. Y. Li, S.V. Rotkin, and U. Ravaioli: *Nano Letters*, **3**, no.2, 183(2003)
42. J. Gonzalez, F. Guinea, MAH. Vozmediano: *Nuclear Physics B.* **406** (3), 771 (1993) D.P. DiVincenzo, E.J. Mele: *Phys.Rev. B* **29**(4), 1685 (1984)



43. S.V. Rotkin, K.A. Bulashevich, N.R. Aluru: in Procs.–ECS PV 2002–12, P.V. Kamat, D.M. Guldi, and K.M. Kadish, Eds. (ECS Inc., Pennington, NJ, USA 2002) pp. 512–519
44. S. Suzukia, Ch. Bower, Y. Watanabe, O. Zhou: Appl. Phys. Lett. **76** (26), 4007 (2000)
45. M. Shiraishi, M. Ata: Carbon **39**, 1913 (2001)
46. Y. Li, S.V. Rotkin, and U. Ravaioli: Appl. Phys. Lett. **85** (18), 4178 (2004)
47. S.V. Rotkin: Proceedings of SPIE, Vol. **5509**, 145 (2004)
48. F. Leonard, J. Tersoff: Appl. Phys. Lett. **81**, 4835 (2002)
49. S.V. Rotkin, and K. Hess, Appl. Phys. Lett. **84** (16), 3139(2004)
50. S.V. Rotkin, and K. Hess, in *Technical Proceedings of the 2003 Nanotechnology Conference and Trade Show*, Volume 1-3, (March 7-11, 2004), Boston, Massachusetts, USA
51. K. Hess: *Advanced Theory of Semiconductor Devices* (New York: IEEE Press 2000)
52. F. Chudnovskiy, S. Luryi, and B. Spivak: in *Future Trends in Microelectronics: The Nano Millennium*, ed. by S. Luryi, J.M. Xu, and A. Zaslavsky (Wiley Interscience, New York 2002) pp. 148–155
53. J. Appenzeller: Device Research Conference, Utah, June 26, 2003
54. J. Appenzeller, R. Martel, V. Derycke, M. Radosavljevic, S. Wind, D. Neumayer, and P. Avouris: *Microelectronic Engineering* **64**, 391 (2002)
55. Ph.G. Collins, Ph. Avouris: *Sci.Am.* **12**, 62(2002) Ph. Avouris: *Chemical Physics* **281**, 429(2002)
56. H. Suzuura and T. Ando: *Phys. Rev. B* **65**, 235412 (2002)
57. T. Ando and T. Nakanishi: *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 1704 (1998) T. Ando, T. Nakanishi and R. Saito: *J. Phys. Soc. Japan* **67**, no. 8, 2857 (1998)
58. A.G. Petrov, S.V. Rotkin: *Phys. Rev. B* **70** (3), 035408 (2004)
59. T. Vukovic, I. Milosevic, M. Damnjanovic: *Phys. Rev. B* **65**(04), 5418 (2002)
60. S.V. Rotkin, G. Wilson, J.S. Moore, and K. Hess: unpublished
61. J. Appenzeller, J. Knoch, R. Martel, V. Derycke, S.J. Wind, P. Avouris: *IEEE Transactions on Nanotechnology*, **1** (4), 184 (2002)
62. P.L. McEuen, M. Bockrath, D.H. Cobden, Y-G. Yoon, and S.G. Louie: *Phys. Rev. Lett.* **83**, 5098 (1999)
63. L. Rotkina, J.-F. Lin, J.P. Bird, Appl. Phys. Lett. **83** (21), 4426 (2003)
64. K.A. Matveev: *Phys. Rev. B* **51**, 1743 (1995)
65. J.-F. Lin, J.P. Bird, L. Rotkina, P.A. Bennett: Appl. Phys. Lett. **82** (5), 802 (2003); J.-F. Lin, J.P. Bird, L. Rotkina, A. Sergeev and V. Mitin, Appl. Phys. Lett. **84** (19), 3828 (2004)
66. A.V. Krasheninnikov, K. Nordlund, and J. Keinonen: *Phys. Rev. B* **65**, 165423 (2002)
A.V. Krasheninnikov, K. Nordlund, M. Sirvio, E. Salonen, and J. Keinonen: *Phys. Rev. B* **63**, 245405 (2001)
67. F.Z. Cui, Z.J. Chen, J. Ma, G.R. Xia and Y. Zhai: *Physics Letters A* **295** (1), 55 (2002)