

## تحلیل رفتار چگالی حاملهای بار روی یک سطح گرافنی تحت بایاس در دو مدل ظرفیت کوانتومی و کلاسیکی

محمد کریمی<sup>\*۱</sup>

۱- کارشناسی ارشد، فیزیک اتمی مولکولی، شرکت مخابرات ایران، منطقه آذربایجان غربی، مهاباد، ایران

\*Mohamadkarimi9044@gmail.com

ارسال : خرداد ماه ۹۶ پذیرش : تیر ماه ۹۶

### خلاصه

در این مقاله چگالی حاملهای بار القاء شده توسط بایاس در گاهی روی یک سطح گرافنی در یک ساختار خازنی مسطح که یک صفحه آن گرافن و صفحه دیگر آن فلز (درگاه) است به ازای مقادیر مختلف ولتاژ درگاه محاسبه شده است؛ سپس ولتاژ درگاهی و ولتاژ در کل ناحیه بین فلز و گرافن یعنی دی الکتریک بدست آمده است. ولتاژ و چگالی حاملها در نقاط مختلف این ساختار با استفاده از جعبه ابزار PDE در نرم افزار متلب به روش ظرفیت کوانتومی بررسی و محاسبه شده است. نتایج نشان می دهند که ظرفیت کوانتومی خصوصا برای سیستمهای با چگالی حالت پایین مهم است (مانند یک سیستم دو بعدی الکترونی در سطح یک دی الکتریک و یا سطح مشترک گرافن). در آخر به تحلیل و مقایسه نتایج حاصل از مدل ظرفیت کوانتومی با نتایج مدل ظرفیت کلاسیکی و روش پوآسون - دیراک به عنوان یک روش عددی خود سازگار پرداخته ایم تا نشان دهیم وجه تمایز ظرفیت کلاسیکی و کوانتومی در نظر گرفتن تصحیح کوانتومی در مدل کوانتومی است که تنها هنگامی نقش آشکاری ایفا می کند که صفحه فلزی بسیار نزدیک به صفحه گرافن باشد و در این حالت نتایج مدل کوانتومی و روش خودسازگار پوآسون - دیراک یکسانند.

کلمات کلیدی: چگالی بار، گرافن، PDE، ولتاژ درگاهی، ظرفیت کوانتومی.

### ۱. مقدمه

گرافن، لایه ای دو بعدی از اتمهای کربن با ساختار لانه زنبوری است که حاملهای بار در آن مانند فرمیونهای دیراک بدون جرم عمل می کنند پس دارای سطح فرمی است. در گرافین الکترونها از رابطه پاشندگی خطی تبعیت می کنند و شبیه ذرات نسبیتی بدون جرم عمل می کنند. این امر باعث می شود که در این اولین ماده دو بعدی ما خواص بسیار شگفت انگیز الکترونی را مشاهده کنیم [۱] ترابرد الکترونی در گرافن [۲,۳] یکی از مهمترین موضوعات مطالعات مربوط به این ماده از هنگام کشف آن در سال ۲۰۰۴ می باشد [۵] شناسایی خواص الکترونی با استفاده از درگاه های الکتریکی راه مستقیم مدولاسیون چگالی حاملها و در نتیجه سطح فرمی گرافن است [۵] بنابراین این روش دارای نقش اساسی در مطالعات بنیادی و پیشرفته الکترونیک گرافن می باشد (مقاله اصلی). برای محاسبه چگالی بار سطح گرافنی روشهای مختلفی وجود دارد. ارزانتترین روش محاسبه این است که چگالی حاملهای سطح گرافنی به عنوان چگالی بار سطح مجاور به

گرافن در نظر گرفته شود [۵] که به عنوان یک رسانا در پتانسیل صفر ثابت شده است. این روش با مدل کلاسیکی ظرفیت (CCM) مطابقت دارد که به طور گسترده در کارهای تجربی روی تراپرد الکترونی گرافن مورد استفاده قرار می گیرد [۳] و می تواند به صورت دقیق حل شود [۷]. دو روش دیگر عبارتند از: روش خود سازگار پواسون - دیراک (PDM) که در آن در یک محاسبه دقیق تر رابطه بین چگالی بار القایی روی گرافن و انرژی پتانسیل الکتریکی که آن حاملهای بار از طریق چگالی حالتی گرافن کسب می کنند بدست می آید [۸ و ۹] که این کار نیازمند محاسبات تکراری خودسازگار است [۱۰، ۱۱، ۱۲]؛ و روش محاسبه از طریق مدل ظرفیت کوانتومی (QCM) که به تفصیل در این مقاله مورد بررسی قرار گرفته است. هر کدام از این روشها ویژگی های متفاوتی در محاسبه و نتایج دارند در هر دو روش تصحیح کوانتومی نسبت به روش کلاسیکی لحاظ شده ولی تنها هنگامی اثرات آن نمایان می شود که درگاه (صفحه فلزی خازن) بسیار نزدیک به گرافن باشد  $d \ll 20\text{nm}$ . این دو روش به تفصیل در مقاله [۵] توضیح داده شده است. در ابتدا توضیحاتی در مورد مفاهیم اساسی ارائه شده و سپس به تحلیل نتایج پرداخته می شود.

## ۲. ظرفیت کوانتومی

ظرفیت کوانتومی CQ، ناشی از تراکم محدود حالتی ارائه شده توسط لایه رسانا برای الکترونها در حالتی کوانتومی ناشی از اصل طرد پائولی می باشد [۵] از این رو به عنوان ظرفیت کوانتومی نامگذاری شده است. یک گاز الکترونی دو بعدی در یک چاه کوانتومی، برعکس یک سطح صاف فلزی بازمینه معمولی، یک میدان الکتریکی عرضی را به طور کامل نشان نمی دهد و به علت تبهگنی انرژی، یک گاز الکترونی دو بعدی خودش را بصورت یک خازن سری ظاهر میکند که ظرفیت این خازن کوانتومی CQ با سطح واحد برابر است با  $CQ = \frac{Me^2}{\pi\hbar^2}$  در اینجا M جرم موثر الکترون می باشد [۷]. برای محاسبات در مقیاس بسیار ریز، در رابطه ی بین چگالی بار القا شده در گرافن و انرژی پتانسیل الکتریکی که بار الکتریکی را تقویت می کند به گونه ای است که برای محاسبه ی چگالی بار پایدار گرافن مستلزم انجام یک سری محاسبات تکرار شونده می باشد. که مرتبط با مدل ظرفیت کوانتومی QCM است [۶].

## ۳. مدل ظرفیت کوانتومی (QCM)

یک گرافن تک لایه در نظر گرفته می شود. از آنجایی که سهم کلاسیکی ظرفیت توسط رابطه  $n_c = \left(\frac{C_{ox}}{e}\right) V_g$  تعیین می شوند [۷]. در اینجا  $C_{ox}$  ظرفیت کلاسیکی (در سطح واحد) یک خازن صفحه موازی یکنواخت میباشد. چگالی بار ظرفیت کوانتومی را می توان بصورت زیر نوشت:

$$n_Q = \left(\frac{\epsilon_r}{d}\right)^2 \times 2.0784 \times 10^{11} \text{cm}^{-2} \quad (1)$$

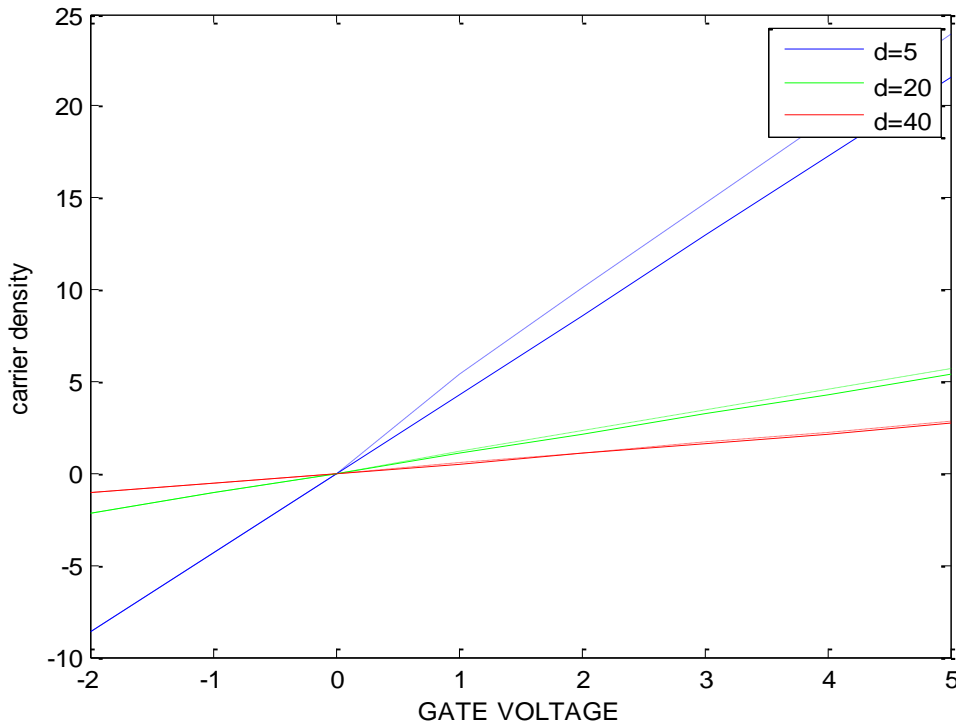
در اینجا d بر حسب نانو متر است. تصحیح کوانتومی میتواند بصورت زیر نوشته شود (در کلیه فرمولهای این مقاله ولتاژ بر حسب ولت و چگالی حاملها n بر حسب  $\text{cm}^{-2}$  و d بر حسب نانومتر است):

$$\Delta n = \text{sgn}(V_g) \left(\frac{\epsilon_r}{d}\right)^2 \left(1 - \sqrt{1 + 53.178 \frac{|V_g|d}{\epsilon_r}}\right) \times 2.0784 \times 10^{11} \text{cm}^{-2} \quad (2)$$

$$\Delta n = \text{sgn}(V_g) \left(\frac{\epsilon_r}{d}\right)^2 \left(1 - \sqrt{1 + 53.178 \frac{|V_g|d}{\epsilon_r}}\right) \times 2.0784 \times 10^{11} \text{cm}^{-2} \quad (3)$$

برای نشان دادن اندازه تغییر حاصل از تصحیح کوانتومی  $\Delta n$ ، لازم به مقایسه با  $n_c$  حاصل از روش کلاسیکی می باشد. همانگونه که در شکل (۱) چگالی حاملها برحسب  $V_g$  متغیر، به ازای ضخامت های  $d=5, 20, 40 \text{ nm}$  و با در نظر گرفتن  $\epsilon_r=3.9$  برای دی الکتریک  $\text{SiO}_2$  نشان داده شده است. فقط زمانی که  $d$  بسیار نازک است در  $(d \leq 20 \text{ nm})$  می توانید یک تفاوت واضح و مشخص را در  $\Delta n$  ببینید. با  $V_g$  غیر صفر و  $d$  بزرگ، معادله زیر با تقریب بهتر به دست می آید:

$$\Delta n \approx -\text{sgn}(V_g) \left(\frac{\epsilon_r}{d}\right)^{3/2} \left(\sqrt{|V_g|}\right) \times 1.5156 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \quad (4)$$



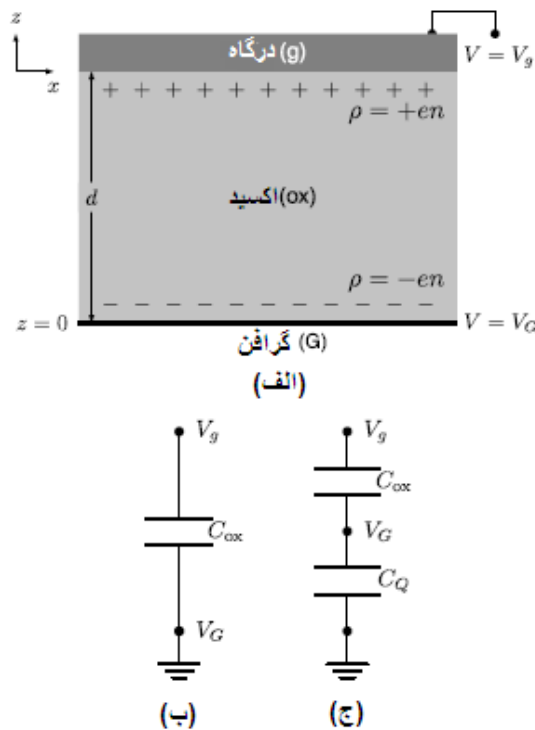
شکل ۱- چگالی بار را با  $\Delta n$  برای ضخامت های  $d=5, 20, 40 \text{ nm}$ ، خطوط نقطه چین در نمودار  $n_c$  را نشان می دهد (ولتاژ در گاهی بر حسب ولت و چگالی حاملها بر حسب  $\text{cm}^{-2}$  است)

#### ۴. مدل پوآسون-دیراک (PMD)

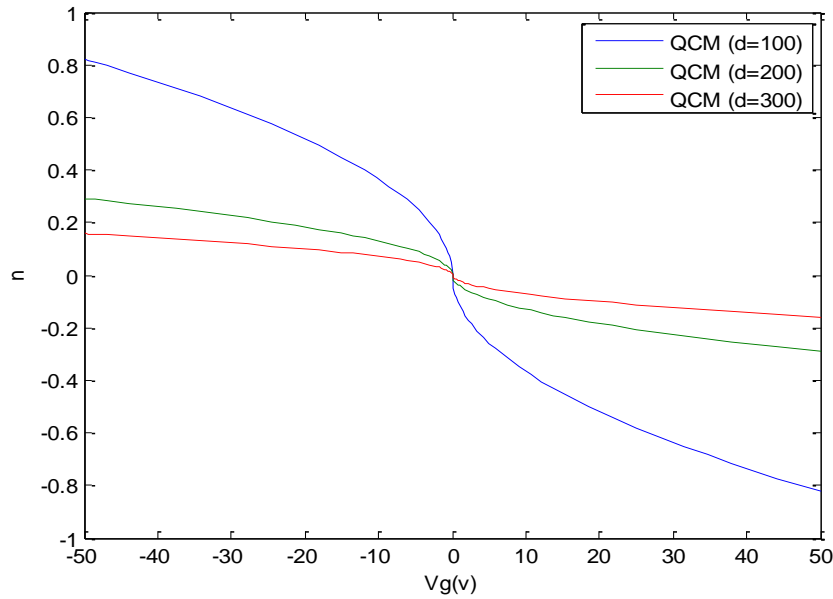
در روابط کلاسیکی بدست آمده برای چگالی حاملهای بار همواره فرض بر آنست که " چگالی بار سطحی القایی در سطح دی الکتریک همان چگالی حاملهای بار در گرافین است "؛ در این حالت به وضوح از تعدادی از جزئیات فیزیکی غفلت شده، از جمله اینکه چگالی حالت های گرافن نحوه پر شدن این حالتها را توسط حاملها کنترل و اداره می کند. به علاوه قرارگیری حاملها در گرافن باعث تغییر سطح فرمی آن شده که دلالت بر یک شیفت در انرژی پتانسیل می باشد که باید بیشتر از پتانسیل الکتریکی بارهای متناظر روی دی الکتریک و تبعاً درگاه باشد. این مطلب محل نقصان مدل کلاسیکی ظرفیت و ضرورت انجام یک تصحیح را نشان می دهد.

### ۵. تجزیه و تحلیل

یک گرافن در حضور یک قطعه فلزی به عنوان گرافن تک دريچه ای در نظر گرفته می شود. جهت محاسبه ظرفیت این سیستم، با تقریب ساده ی خازن صفحه موازی شروع می کنیم. یک خازن با صفحات موازی که یک اکسید در بین صفحات آن به عنوان دی الکتریک قرار داده شده است و مدار معادل آن در مدل های کلاسیکی و کوانتومی در شکل (۲) آمده است. در اینجا پتانسیل الکتریکی  $u(x,z)$  داخل لایه اکسید توسط مدل پوآسون - دیراک [۷] در ولتاژ دريچه  $V = 50 \text{ Volt}$  در ضخامت های مختلف برای  $d$  با  $d = 100, 200, 300 \text{ nm}$  داده می شود (شکل ۳).



شکل ۲- (الف) نمایی از یک گرافن تک دريچه ای - خازن مسطح با یک صفحه فلزی و دیگری گرافن، (ب) مدار معادل در مدل کلاسیکی، (ج) مدار معادل در مدل کوانتومی

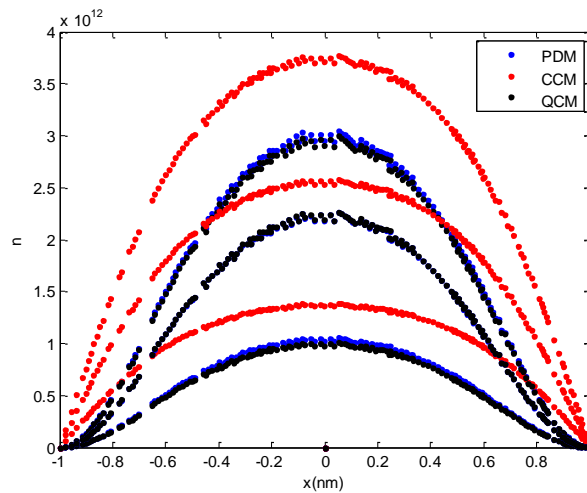


شکل ۳- نمودار  $PDM$  و  $QCM$  بر حسب  $\Delta n$  و  $Vg$  برای  $d = 100, 200, 300 \text{ nm}$  (ولتاژ بر حسب ولت و  $n$  بر حسب  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$  است)

حال اندازه محدود درجه بالایی را با ولتاژهای مختلف  $V_{tg} = 0.5, 1.0, 1.5$  ولت و یک فاصله بسیار باریک  $d = 20 \text{ nm}$  در نظر می گیریم. (شکل ۴ را ببینید) محاسبات شبیه به حالت نامحدود است. تنها تفاوت فرم تخمین ظرفیت دی الکتریک می باشد.

$$C_{ox}(X) = \left( \frac{e \cdot n_c(x)}{V_{tg}} \right) \quad (5)$$

در شکل ۴ چگالی بار محاسبه شده توسط  $PDM$ ،  $n_{PD}$ ،  $QCM$ ،  $n_{QC}$ ، و همچنین  $CCM$ ،  $n_C$ ، مقایسه شده است. توافق خوبی بین  $QCM$  و  $PDM$  دیده می شود. حال آنکه انحراف  $CCM$  از آنها به وضوح دیده می شود. [۷]

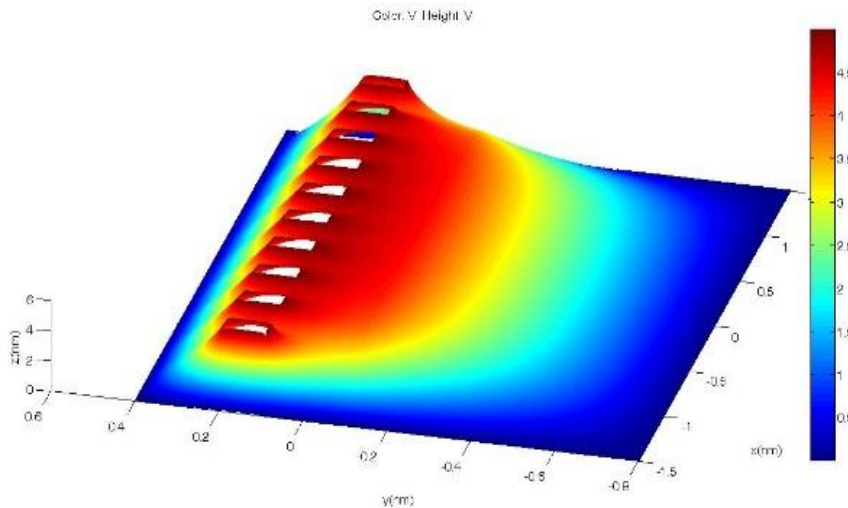


شکل ۴- چگالی بار محاسبه شده توسط  $PDM$ ،  $n_{PD}$ ،  $QCM$ ،  $n_{QC}$ ، همچنین  $CCM$  و  $n_C$  برای  $V_{tg} = 0.5, 1, 1.5$  (ولتاژ بر حسب ولت و  $n$  بر حسب  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  است)

## ۶. ابر شبکه گرافن

حال با استفاده از ساخت یک سری دریچه بالایی شروع به تولید یک ابر شبکه گرافنی می کنیم. همانطور که در شکل ۵ ترسیم شده است مساله PDE در ناحیه بالاتر از سطح گرافن به منظور حل پتانسیل الکتریکی با توجه به دریچه بالایی و ولتاژهای مختلف  $V_{tg} = -5, -3, 0, 3, 5$  v تعریف می شود. برای محاسبه از معادله (۶) استفاده می کنیم.

$$V(x) = -[sgn(x)]\hbar v f \sqrt{\pi|n(x)|} = -11.667 * sgn[n(x)] \sqrt{\frac{|n(x)|}{10^{10} cm^{-2}}} meV \quad (6)$$



شکل ۵- فرم یک ابر شبکه گرافن با بکار بردن یک زنجیره دریچه های بالایی بصورت سری و یک دریچه پایینی سراسری ( واحد انتخابی در کلیه محورها نانو متر nm )

## ۷. نتایج

برای خازنهای صفحه موازی با  $V_g = 0$  و  $d \leq 20$  nm نسبت تغییر حاصل از تصحیح کوانتومی نزدیک صفر است. به این معنی است که تصحیح کوانتومی نقش کمتری را ایفا می کند. در مقابل هنگام نزدیک شدن به  $V_g$  و محور d بالاتر، نسبت به طور قابل توجهی رشد پیدا می کند که دلالت بر این دارد تصحیح کوانتومی یک نقش مهمی دارد.

با توجه به پتانسیل الکتریکی  $u(x,z)$  بدست آمده داخل لایه اکسید برای گرافن تک دریچه ای در خازن صفحه موازی با فاصله های مختلف برای d و  $V_g$  ثابت، تناظر بین دو رویکرد QCM و PDM دقیق است. ولی همین محاسبات با مقدار ثابت برای d و مقادیر مختلف برای  $V_g$  نشان میدهد توافق خوبی بین PDM و QCM دیده می شود. حال آنکه انحراف CCM از آنها دیده می شود

## ۸. مراجع

1. Fowler ,W. ,A. ,*Rev. Mod. Phy.* (1984) 56,149.
2. Castro Neto, A.H., Guinea, F., Peres, N.M.R., Novoselov, K.S Geim, A.K.: The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.* 81, 109 (2009)
3. Das Sarma, S., Adam, S., Hwang, E.H., Rossi, E.: Electronic transport in two-dimensional graphene. *Rev. Mod Phys.* 83, 407–470 (2011)
4. S. Luryi, "Quantum capacitance devices," *Appl. Phys. Lett* vol. 52, no. 6, pp. 501–503, 1988

5. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, "Electric fie effect in atomically thin carbon films," *Science*, vol. 306, no. 5696, pp. 666–669, 2004.
6. M.-H. Liu and K. Richter, "Efficient quantum transport simulation for bulk graphene heterojunctions," *Phys. Rev.*, vol. 16, p. 115455, Sep 2012
7. Ming-Hao Liu , " Gate-induced carrier density modulation in bulk graphene: Theories and electrostatic simulation using MATLAB pdetool " , *J Campton Electron* , 12 , 188-202 , 2013
8. Guo, J., Yoon, Y., Ouyang, Y.: Gate electrostatics and quantum capacitance of graphene nanoribbons. *Nano Lett.* 7(7) , 1935–1940 (2007)
9. Fang, T., Konar, A., Xing, H., Jena, D., Carrier statistics and quantum capacitance of graphene sheets and ribbons. *Appl. Phys. Lett.* 91(9), 092109 (2007).
10. Gorbachev, R.V., Mayorov, A.S., Savchenko, A.K., Horsell, D.W Guinea, F.: Conductance of p–n–p graphene structures with "airbridge top gates. *Nano Lett.* 8(7), 1995–1999 (2008)
11. Shylau, A.A., Kłos, J.W., Zozoulenko, I.V.: Capacitance of graphene nanoribbons. *Phys. Rev. B* 80, 205402 (2009)
12. Andrijauskas, T., Shylau, A.A., Zozoulenko, I.V.: Thomas-Fermi and Poisson modeling of gate electrostatics in graphene nanoribbon *Liet. Fiz. Zh.* 52(1), 63–69 (2012)