مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

بررسی اثر آلایندگی نیتروژن بر خواص الکترونی نانونوارهای سیلیسنی

امید سلطانی ، روح اله فرقدان

دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، کاشان کیلومتر ٦ بلوار قطب راوندی

چکیده

در این مقاله، ما با استفاده از فرمول بندی اسلیتر و کوستر در تقریب تنگ-بست به بررسی ساختار الکترونی نانونوارهای سیلیسنی با لبه‌ی زیگزاگ و آرمچیری آلاییده شده توسط نیتروژن در لبه‌ی این نانونوارها می‌پردازیم. نشان می‌دهیم که باندهای پیوندی π سهم عمده‌ای در ترابرد الکترونی نانونوارهای سیلیسنی ایفا می-کنند. حضور آلایندگی نیتروژن باعث گذار فاز رسانا به نیم‌رسانا و کنترل گاف نواری در نانونوار سیلیسنی با لبه‌ی آرمچیری می‌شود. از طرفی این آلایندگی باعث تغییر رفتار فلزی در نانونوارهای سیلیسنی با لبه‌ی زیگزاگ و نزدیک‌تر شدن باندهای پیوندی σ به سطح فرمی خواهد شد.

در یک دهه‌ی اخیر نوع جدیدی از مواد که خواص منحصر به فردی دارند توسعه پیدا کرده‌اند. این مواد برخلاف دیگر ساختارها که شامل سه بعد هستند، ساختار دوبعدی دارند. در این بین می‌توان به گرافن به عنوان معروف‌ترین ساختار دوبعدی اشاره کرد[۱]. سیلیسین نیز همانند گرافن شامل ساختار دوبعدی لانه زنبوری است. با این تفاوت که اتم‌های سیلیسیم جایگزین اتم‌ها کربن شده‌اند. این ساختار برای اولین بار در سال ۲۰۱۰ بر روی زیر لایه‌ی نقره(۱۱۱) سنتز شد[۲]. نتایج ساختار نواری بیانگر عدم وجود گاف نواری در این دو ماده است[۳]. لذا به منظور کاربرد این دو ساختار در ترانزیستورهای اثر میدانی با مشکل روبه‌رو هستیم. از این رو، به منظور ایجاد گاف نواری در این ماده روش‌های مختلفی از جمله اعمال میدان الکتریکی عمودی، استفاده از زیر لایه، اصلاحات شیمیایی مانند اضافه کردن ناخالصی و در نهایت استفاده از نانونوارهای سیلیسنی پیشنهاد شده است[٤]. از طرفی نتایج انرژی تشکیل در حضور آلایندگی نیتروژن، در مقایسه با ساختار دست نخورده، حاکی از پایداری بیشتر این ساختار است[٥]. ما نیز در این مقاله به بررسی کاربرد ناخالصی نیتروژن به عنوان آلاینده در نانونوارهای سیلیسنی با لبه‌ی زیگزاگ و آرمچیری خواهیم پرداخت. نشان خواهیم داد که با ایجاد آلایندگی مطلوب و کنترل گاف انرژی، می‌توان از این نانونوارها در ترانزیستورهای اثر میدانی بهره برد. بدین منظور با استفاده از فرمول بندی اسلیتر و کوستر در تقریب تنگ-بست عمل کرده‌ایم. هامیلتونی در تقریب تنگ-بست به فرم زیر در نظر گرفته می‌شود:[٦]

$$HC_i = E_i(\vec{k})SC_i \qquad (۱)$$

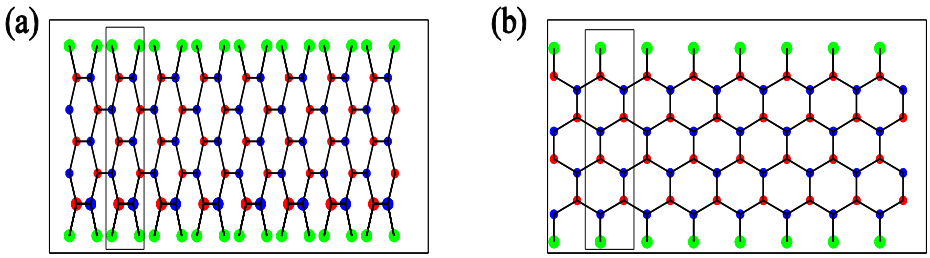
در رابطه‌ی۱، Hهامیلتونی در مدل تنگ-بست، C_i بردار ستونی و S تابع همپوشانی در غیاب هامیلتونی است. از طرفی، با استفاده از فرمول بندی اسلیتر و کوستر می‌توان فرم هامیلتونی در مدل تنگ-بست را، برای مثال برای همپوشانی اوربیتال دو اوربیتال S و P در همسایگی اول و همچنین دو اوربیتال P و P در همسایگی اول به شکل زیر نوشت:[٦]

$$\left\langle 3S^{A}\left|H\right|3P_x^{B}\right\rangle = v_{sp\sigma}.\sum_{i=1}^{3}L_i.\exp(i.\vec{k}.\vec{\delta}_i) \qquad (۲)$$

$$\left\langle 3P_x^{A}\left|H\right|3P_x^{B}\right\rangle = v_{pp\sigma}.\sum_{i=1}^{3}L_i.N_i.\exp(i.\vec{k}.\vec{\delta}_i) - v_{pp\pi}.\sum_{i=1}^{3}L_i.N_i.\exp(i.\vec{k}.\vec{\delta}_i)$$

مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

در رابطه‌ی۲، L کسینوس هادی بین اوربیتال $3S$ و $3P_x$ ، $v_{sp\sigma}$ پارامتر جهش بین اوربیتال ۳S و ۳Px و δ_i بردار سه همسایگی اول در شبکه مستقیم ساختار سیلیسن است. همچنین N کسینوس هادی بین اوربیتال $3P_x$ و $3P_z$، $v_{pp\sigma}$ و $v_{pp\pi}$ پارامتر جهش بین اوربیتال $3P_x$ و $3P_z$ است. از طرفی، پارامترهای جهش بین اوربیتال‌های اتمی به صورت $E_s = -12,721(-21,978)$، $E_p = -6,806(-9,428)$، $ss\sigma = -2,075(-4,327)$، $sp\sigma = 2,508(3,443)$، $pp\sigma = 2,716(3,385)$ و $pp\pi = -0,715(-2,082)$ در نظر گرفته شده است که مقادیر بر حسب الکترون ولت و مقادیر ابتدایی مربوط به پیوند سیلیسیم-سیلیسیم و مقادیر داخل پرانتز مربوط به پیوند سیلیسیم-نیتروژن می‌باشد[۷]. ما ساختار نواری نانونواری سیلیسنی لبه زیگزاگ 4-ZSiNR و نانونواری سیلیسنی لبه آرمچیری 5-ASiNR را مورد بررسی قرار داده‌ایم. سلول واحد با آلایندگی نیتروژن در نانونوارهای لبه زیگزاگ و آرمچیری در شکل۱ نشان داده شده است.

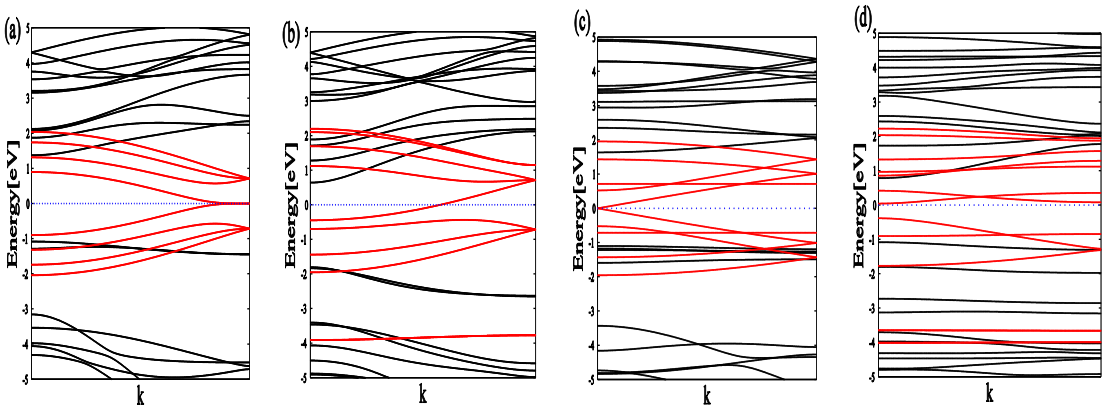


شکل۱ : طرح نانونوار سیلیسنی آرمچیری (a) و نانونوار سیلیسنی زیگزاگ (b). اتم‌های نیتروژن به رنگ سبز نشان داده شده‌اند. مستطیل مشکی رنگ نشان‌دهنده سلول واحد در نظر گرفته شده است.

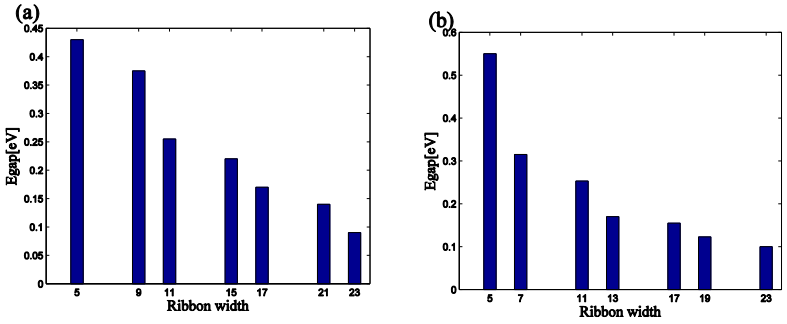
نتایج ساختار نواری چند باندی نانونوار سیلیسنی لبه زیگزاگ با پهنای ٤ به صورت دست نخورده و با در نظر گرفتن آلایندگی نیتروژن در لبه‌ها به ترتیب در شکل۲a و ۲b نمایش داده شده است. نانونوار سیلیسنی زیگزاگ به صورت دست نخورده رفتار فلزی بدون هیچ گاف نواری از خود نشان می‌دهد اما، در حضور آلایندگی نیتروژن تغییر در رفتار فلزی سیستم را شاهد باشیم. از طرفی پیش بینی می‌کنیم باندهای پیوندی σ، به دلیل نزدیک‌تر شدن به سطح فرمی، نقش بیشتری را در ترابرد الکترونی نسبت به حالت دست نخورده ایفا کنند. هر چند، با توجه به تغییر رفتار باندهای σ رفتار اپتیکی سیستم دستخوش تغییرات می‌شود. شکل۲c و ۲d به ترتیب ساختار الکترونی چند باندی نانونوار سیلیسنی آرمچیری دست نخورده و در حضور آلاییدگی نیتروژن را نشان می‌دهد. با توجه به عرض نوار بررسی شده، نانونوار سیلیسنی لبه آرمچیری رفتار فلزی از خود نشان می‌دهد. در حضور آلایندگی نیتروژن در این نانونوارها شاهد ایجاد گاف نواری و تغییر فاز از فلزی به نیم‌رسانایی هستیم. نکته حائز اهمیت قابل کنترل بودن گاف نواری با تغییر پهنای نانونوار سیلیسنی لبه آرمچیری در حضور آلایندگی نیتروژن است. محاسبات ما نشانگر کاهش تدریجی گاف نواری با افزایش پهنای نانونوار به استثنای پهناهای ۷ و ۱۳ و ۱۹ است. طبق محاسبات ما نانونوارهای سیلیسنی لبه‌ی آرمچیری در حضور آلاییدگی نیتروژن با پهناهای ذکر شده همچنان از خود رفتار فلزی نشان می‌دهند. البته رفتار فلزی سیستم متفاوت از رفتار فلزی حالت دست نخورده است. از طرفی، همچنان به دلیل دور

مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

بودن باندهای پیوندی σ از سطح فرمی انتظار داریم نقش عمده در ترابرد الکترونی این نانونوارها مرتبط با باندهای پیوندی π باشد. اما با حضور آلایندگی نیتروژن این مورد می‌تواند تا حدودی افزایش یابد. نتایج میزان گاف نواری ایجاد شده، در پهناهای مختلف، در نانونوارهای سیلیسنی لبه آرمچیری در شکل۳a نشان داده شده است. شکل۳b نیز معرف نتایج تغییرات گاف نواری در نانونوار سیلیسنی لبه آرمچیری که فقط یکی از لبه‌های نانونوار با نیتروژن آلاییده شده، می‌باشد. لذا در حضور آلایندگی نیتروژن پیش بینی می‌کنیم، بتوان از این نانونوارها جهت استفاده در ترانزیستورها اثر میدانی بهره برد.



شکل ۲ : ساختار نواری نانونواری سیلیسنی با لبه‌ی زیگزاگ دست نخورده(a) و در حضور آلایندگی نیتروژن(b) و نانونوار سیلیسنی با لبه‌ی آرمچیری دست نخورده(c) و در حضور آلایندگی نیتروژن(d). نوارهای قرمز رنگ مربوط به پیوند π و نوارهای مشکی رنگ مربوط به پیوندهای σ می‌باشد. خط چین آبی سطح فرمی را نشان می‌دهد.



شکل ۳ : نمودار تغییرات گاف نواری نسبت به تغییرات پهنا در نانونوارهای سیلیسنی با لبه‌ی آرمچیری در حضور آلاییدگی نیتروژن(a) و نانونوارهای سیلیسنی با لبه‌ی آرمچیری نیمه آلاییده شده(b).

نتیجه گیری

نتایج ما نشانگر رفتار فلزی در نانونوار سیلیسنی با لبه‌ی زیگزاگ دست نخورده با تمامی پهناها و همچنین رفتار نیم‌رسانایی و فلزی، بسته به پهنای نوار، در نانونوار سیلیسنی با لبه‌ی آرمچیری در غیاب آلایندگی نیتروژن است. از طرفی، در حضور آلاییدگی نیتروژن در سر آزاد نانونوار سیلیسنی با لبه‌ی زیگزاگ رفتار فلزی سیستم تغییر خواهد کرد. همچنین به دلیل نزدیک شدن باندهای σ به سطح فرمی، نسبت به حالت دست نخورده، انتظار

مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

داریم ترابرد الکترونی سیستم تحت تاثیر این پیوندها قرار گیرد. حضور آلایندگی نیتروژن در نانونوار سیلیسنی با لبه‌ی آرمچیری می‌تواند فاز فلزی را به نیم‌رسانایی تغییر دهد. از طرفی بسته به پهنای نانونوار میزان تغییرات گاف نواری متفاوت خواهد بود. در نانونوارهای سیلیسنی با لبه‌ی آرمچیری حضور آلایندگی نیتروژن رفتار باندهای پیوندی سیگما را تغییر داده اما همچنان به دلیل دور بودن از سطح فرمی، انتظار داریم که نقش کمتری در رفتار ترابرد الکترونی سیستم داشته باشند.

مرجع‌ها

۱. A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nature Materials*. **6**, 183-191
۲. Boubekeur Lalmi et al, *Appl. Phys. Lett*. **97**, 223109 (2010)
۳. Gian G. Guzmán-Verri and L. C. Lew Yan Voon, *Phys. Rev. B.* **76**, 075131(2007)
۴. Harold J.W. Zandvliet, *Nano Today*. **Volume 9**, Issue **6**(2014)
۵. Ling Ma, Jian-Min Zhang, Ke-Wei Xu And Vincent Ji, *Physica B*, **425**, 66–71(2013)
۶. J.C.Slater And G.F.Koster, *PHYSICAL REVIEW*, **Volume 94**, Number 6(1954)
۷. E. San-Fabian And E. Louis, *Phys. Rev. B.* **39**,1844(1989)