

بررسی تأثیر طول و فاصله صفحات بر عملکرد کلیدهای نانوالکترومکانیکی گرافنی به روش دینامیک مولکولی

مهران قلی پور شهری *

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه اراک، اراک، ایران

دریافت: 1397/04/25 ویرایش نهایی: 1397/07/25 پذیرش: 1398/04/31

چکیده

کوچک‌تر شدن ابعاد نانوکلیدها از لحاظ مجتمع‌سازی دارای اهمیت بسیار می‌باشد ولی احتمالاً به دلایلی از جمله موانع ساخت تجربی و یا پیچیدگی‌های نظری، تاکنون نانوکلیدهایی با طول خیلی کم مورد بررسی قرار نگرفته‌اند. در این تحقیق عملکرد نانوکلیدهای گرافنی با طول‌های کمتر از 30nm و فاصله صفحات بسیار کم (در حدود 2nm) با استفاده از ترکیب روش دینامیک مولکولی با روش ممان‌ها، شبیه‌سازی شده و نتایج به دست آمده با برخی از مدل‌های موجود مقایسه شده است. نتایج نشان می‌دهد که با کاهش طول نانوروبان‌ها و یا افزایش فاصله صفحات، ولتاژ روشن شدن نانوکلیدها افزایش می‌یابد. همچنین می‌توان دید که در طول‌های بلند نانوروبان‌ها، توافق خوبی با نتایج نظری وجود دارد ولی در طول‌های کم روابط نظری موجود دقت کافی نداشته و قادر به پیش‌بینی درست ولتاژ روشن شدن نمی‌باشند. همچنین نتایج نشان می‌دهند که در ابعاد ذکر شده، زمان روشن شدن نانوکلیدها به‌طور قابل ملاحظه‌ای از زمان روشن شدن نانوکلیدهای موجود کمتر است.

کلیدواژه‌گان: نانوکلید، گرافن، دینامیک مولکولی، روش ممان‌ها

میکروالکترومکانیک متمایز می‌سازد. دستگاه‌های ساخته شده از اجزاء نانوالکترومکانیک با داشتن ویژگی‌هایی همچون فرکانس‌های طبیعی بالا، اتلاف انرژی پایین، جرم فعال در محدوده فمتوگرم، حساسیت نیرویی در حدود اتونیوتن، حساسیت جرمی تا اتوگرم و کمتر از اتوگرم، ظرفیت گرمایی خیلی کمتر از یوکتوکالری و مصرف انرژی در حدود ده اتوات بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند [1].

لایه‌های گرافن با ویژگی‌های منحصر به فرد یکی از کاربردی‌ترین مواد در طراحی و ساخت ادوات نانو ساختار از جمله نانوکلیدهای پلاسمونیک [2] و الکترومکانیکی می‌باشند.

مقدمه

به دلیل توسعه علم و تکنولوژی، اندازه دستگاه‌ها روز به روز کوچک‌تر می‌شود. پس از تکنولوژی سیستم‌های میکروالکترومکانیک، سیستم‌های نانو الکترومکانیک توجه محققان را به خود جلب کرده است. سیستم‌های نانو الکترومکانیک از جمله نانوکلیدها، نانوانبرک‌ها و نانوقیچی‌ها شامل اجزای الکتریکی-مکانیکی هستند که ابعاد آنها در حدود چند تا چند صد نانومتر می‌باشد. به دلیل اثرات کوچک شدن ابعاد از جمله آثار سطحی و کوآنتومی، سیستم‌های نانو الکترومکانیک مشخصات منحصر به فرد و مطلوبی از خود نشان می‌دهند که آنها را از سیستم‌های

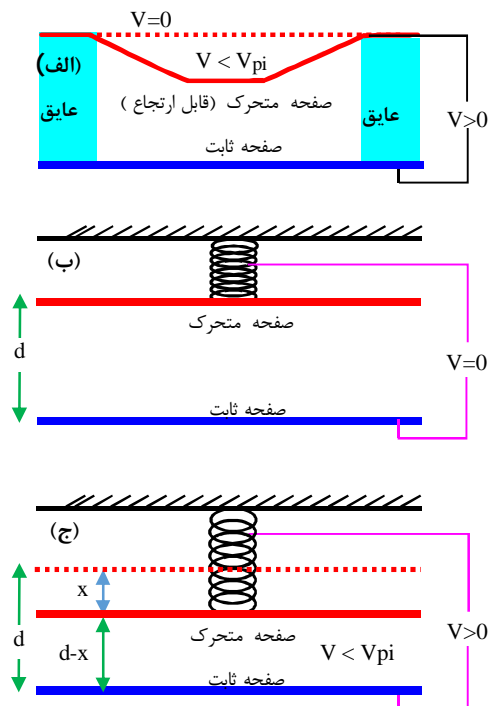
* نویسنده مسئول: m-gholipour@araku.ac.ir



است. اگر ولتاژ اعمال شده از حد بحرانی بیشتر باشد (در شکل نشان داده نشده است) آنگاه صفحه بالا به صفحه پایین متصل می‌شود.

این ولتاژ بحرانی یکی از مشخصه‌های مهم در کلیدهای نانو الکترومکانیکی می‌باشد که در اصطلاح ولتاژ روشن شدن $V_{pull-in}^2$ نامیده می‌شود. ولتاژ روشن شدن تابعی از شکل هندسی و جنس تیغه قابل ارتجاع می‌باشد و در اغلب موارد به این صورت تعریف می‌شود:

ولتاژ روشن شدن یک کلید الکترومکانیکی ولتاژی است که به ازای آن، سیستم نقطه تعادل پایدار نداشته باشد.



شکل 1. الف: نمای کلی از یک کلید الکترومکانیکی ساده دوطرف ثابت. ب: یک مدل ساده برای کلید الکترومکانیکی در ولتاژ صفر، ج: کلید الکترومکانیکی در حالت اتصال به ولتاژ کوچک‌تر از ولتاژ روشن شدن.

نانوکلیدهای الکترومکانیکی دارای مزایایی از جمله سادگی، نشت الکتریکی بسیار پایین، پاسخ تیز، ولتاژ کار پایین و عمر طولانی می‌باشند [3-5]. این ویژگی‌ها به همراه امکان تجمع خیلی بالای المان‌ها باعث شده است که در سال‌های اخیر نانوکلیدهای الکترومکانیکی گرافنی به منظور کاربرد در ادوات منطقی، حسگرها و رله‌ها مورد توجه بسیار قرار گیرند [6-7].

نانو سوئیچ به عنوان یکی از کاربردی‌ترین ابزارها در حوزه نانو الکترومکانیک می‌باشد. زیرا این ابزار با امکان کنترل دیجیتالی و کارایی بالا علاوه بر کلید، قادر است به عنوان مقاومت، سلف، مخازن متغیر، تضعیف‌کننده، شیفتر دهنده، فیلتر و ... به کار رود. امروزه تلاش‌های بسیاری در حوزه سوئیچ‌های نانو الکترومکانیک صورت گرفته است و انواع مختلفی از این نانو سوئیچ‌ها مورد بررسی قرار گرفته‌اند [8].

یکی از رایج‌ترین نمونه‌های این نانوکلیدها، نانوکلیدهای دو طرف ثابت¹ می‌باشد [9-10]. مطابق شکل 1، الف این نانوکلیدها دارای ساختار خازنی شامل یک صفحه سخت ثابت (صفحه پایین) و یک صفحه قابل ارتجاع (صفحه بالا) می‌باشند که صفحه قابل ارتجاع از دو سمت ثابت شده است. در ولتاژ صفر، صفحه بالایی (خط چین) در وضعیت مستقیم قرار می‌گیرد. با اتصال این صفحات به اختلاف پتانسیل الکتریکی، به دلیل جاذبه الکترواستاتیکی بین صفحات، صفحه قابل ارتجاع انحنای پیدا می‌کند. اگر اختلاف پتانسیل اعمال شده از یک حد بحرانی بیشتر باشد، در این حالت صفحه خم شده و با چسبیدن به صفحه پایین، می‌تواند یک اتصال الکتریکی جدید را برقرار کند. شکل 1، الف کلید الکترومکانیکی را در دو حالت ولتاژ صفر و همچنین ولتاژ اعمال شده کوچکتر از ولتاژ روشن شدن نشان می‌دهد، به طوری که صفحه قابل ارتجاع انحنای پیدا کرده و به سمت پایین کشیده شده

² Pull-in voltage

¹ doubly clamped

در این شکل دایره‌ها نقاط تعادل پایدار و مربع‌ها نقاط تعادل ناپایدار را نشان می‌دهند. می‌توان ملاحظه کرد که در بالاتر از یک ولتاژ بحرانی که در اینجا 5.17 V است، نقطه تعادل وجود نداشته و صفحه بالایی روی صفحه پایین سقوط می‌کند (به آن می‌چسبد) که در این وضعیت اتصال صورت می‌گیرد. این موضوع را می‌توان از دید گاه نیرو نیز بررسی کرد. در سیستم ایده‌آل مربوط به شکل 1 ج نیروی وارد بر صفحه بالایی برابر است با:

$$F = -Kx + \frac{1}{2} \frac{\epsilon_0 A}{(d-x)^2} V^2$$

در حالت تعادل $F = 0$ ، بنابراین:

$$Kx + 2 * (d-x)^2 - \epsilon_0 A V^2 = 0$$

اگر معادله فوق برحسب x جواب داشته باشد آنگاه شرایط تعادل برقرار شده و ضمن کشیده شدن فنر، صفحه بالایی می‌تواند معلق باشد. با استفاده از حل معادلات درجه 3 (از حوصله این بحث خارج است) می‌توان ثابت کرد که این معادله زمانی دارای جواب حقیقی می‌باشد که ولتاژ V از مقدار بحرانی

$$V = \sqrt{\frac{8Kd^3}{27\epsilon_0 A}} \quad 2$$

کوچک‌تر باشد [11]. در بالاتر از این ولتاژ بحرانی، نیروی کشش فنر هرگز نمی‌تواند بر نیروی جاذبه الکترواستاتیکی بین صفحات غلبه کند و بنابراین صفحه بالایی روی صفحه پایین سقوط کرده و به آن می‌چسبد. طبق رابطه 2، ولتاژ روشن شدن به ثابت الاستیک فنر، فاصله اولیه و سطح صفحات بستگی دارد. به ازای مقادیر ذکر شده یعنی $d=20\text{ nm}$ و ... مقدار 5.17 ولت برای ولتاژ بحرانی یا همان ولتاژ روشن شدن، به دست می‌آید.

در ابتدایی ترین مدل تحلیلی، مطابق با شکل 1 (ب،ج) کلید الکترومکانیکی را با یک خازن تخت تقریب می‌زنند به طوری که صفحه پایینی ثابت و صفحه بالایی به یک فنر وصل شده و قابلیت جابه‌جایی داشته باشد [11]. در حالت ایده‌آل انرژی پتانسیل (الکتریکی+مکانیکی) این سیستم به این صورت تعریف می‌شود:

$$U = \frac{1}{2} Kx^2 - \frac{1}{2} \frac{\epsilon_0 A}{(d-x)} V^2 \quad 1$$

که d فاصله اولیه صفحات، K ثابت فنر، V اختلاف پتانسیل اعمال شده، A مساحت صفحات و x میزان کشیدگی فنر یا به عبارت دیگر جابه‌جایی عمودی صفحه متحرک است.

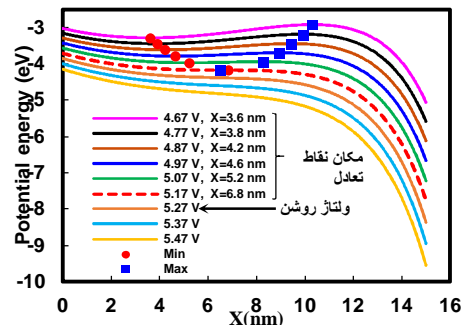
در اینجا منظور از حالت ایده‌آل، حالتی است که: الف: شکل هندسی صفحه بالایی خازن عوض نشود و فقط فاصله بین صفحات تغییر کند، ب: از اثر لبه‌ها (انحنای میدان در لبه‌ها) در ظرفیت خازن صرف نظر شود، ج: ثابت فنر در حین کشش عوض نشود.

شکل 1 ب کلید را در حالت استراحت یا ولتاژ صفر نشان می‌دهد. مطابق با شکل 1 ج، در ولتاژهای کوچکتر از ولتاژ روشن شدن، صفحه بالایی معلق باقی می‌شود که در این حالت نیروی جاذبه الکترواستاتیکی با نیروی کشش فنر برابر می‌باشد.

در شکل 2 نمودار انرژی پتانسیل رابطه 1 برای مقادیر

$$A = 10^6 \text{ nm}^2 \quad \text{و} \quad K = 100 \text{ N/m}, d=20 \text{ nm}$$

به ازای ولتاژهای مختلف برحسب x (میزان جابه‌جایی عمودی صفحه متحرک) ترسیم شده است.



شکل 2. نمودارهای انرژی پتانسیل برای یک کلید ساده الکترومکانیکی.

در این تحقیق برای تعیین نیروهای وارد بر ذرات (اتم‌های کربن) از پتانسیل‌های ترسوف [13] و کولنی (بار-بار، بار-دوقطبی و دوقطبی-دوقطبی) استفاده شده است. پتانسیل ترسوف به منظور ایجاد پیوندهای موجود در اتم‌های گرافن و پتانسیل‌های کولنی به منظور وارد کردن برهم‌کنش‌های اتم‌های باردار موجود در صفحه‌های متحرک (بالا) و ثابت (پایین) در نظر گرفته شده است. بنابراین انرژی پتانسیل به این صورت خواهد بود:

$$U = U^{\text{Electrostatic}} + U^{\text{Tersoff}}$$

با اتصال صفحه یا صفحات گرافن به اختلاف پتانسیل، این صفحات باردار می‌شوند. باردار شدن صفحه گرافنی منجر به ایجاد میدان الکتریکی در نزدیکی هر اتم می‌شود. هر اتم خنثی از جمله کربن با قرار گرفتن در میدان الکتریکی حاصل از بقیه اتم‌ها (میدان موضعی) قطبیده می‌شود که تحت عنوان پلاریزاسون اتمی شناخته می‌شود. بنابراین پس از اتصال صفحه گرافن به پتانسیل الکتریکی با مجموعه‌ای از اتم‌های کربن قطبیده و باردار مواجه هستیم. با فرض توزیع گوسی بار برای اتم‌های کربن [14-17] انرژی الکترواستاتیکی سیستم به این صورت خواهد بود:

$$U^{\text{Electrostatic}} = \sum_{i=1}^N q_i (\chi_i + V_i) - \sum_{i=1}^N \bar{P}_i \cdot \bar{E}_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i T_{q-q}^{ij} q_j - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \bar{P}_i \cdot T_{p-q}^{ij} q_j - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \bar{P}_i \cdot T_{p-p}^{ij} \cdot \bar{P}_j \quad 3$$

که در رابطه فوق q_i بار الکتریکی، \bar{P}_i دوقطبی القایی اتم‌های کربن، χ_i الکترون‌خواهی اتم i ام، \bar{E}_i میدان الکتریکی موضعی خارجی و V_i پتانسیل الکتریکی موضعی روی هر اتم می‌باشند و T^{ij} ها تانسورهای برهم‌کنش بار-بار، بار-دوقطبی و دوقطبی-دوقطبی هستند [15]. لازم به توضیح است که اگر برای برهم‌کنش کولنی اتم‌ها از شکل ساده قانون کولن یعنی

واضح است که ایده‌آل‌نگری‌های ذکر شده در مورد یک کلید نانوالکترومکانیکی واقعی مثل شکل الف درست نیست. زیرا: شکل هندسی صفحه‌ها بالا عوض می‌شود. در ابعاد کوچک نمی‌توان از اثر لبه‌ها صرف نظر کرد، ممکن است به دلیل تغییر شکل، خاصیت ارتجاعی صفحه‌ها بالا تغییر کند. بنا به دلایل ذکر شده، در این تحقیق از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای بررسی این سیستم‌ها استفاده شده است.

در زمینه نانوکلیدها تحقیقات زیادی صورت گرفته است و مدل‌های نظری و یا نیمه تجربی برای پیش بینی ولتاژ روشن شدن ارائه شده است. ولی تقریباً در تمام موارد از مدل‌های پیوسته استفاده شده و همچنین فقط برخی از مشخصه‌های هندسی این کلیدها یعنی ضخامت صفحات و فاصله صفحات در محدوده چند ده نانومتر قرار داشته است و بقیه ابعاد از جمله طول و پهنای نانوکلیدها در محدوده میکرومتر قرار داشته‌اند.

در این تحقیق رفتار نانوکلیدهای گرافنی با طول‌های کمتر از 30nm و فاصله صفحات بسیار کم (در حدود 2nm) با استفاده از روش دینامیک مولکولی شبیه‌سازی شده است و نتایج به دست آمده با برخی از مدل‌های نظری موجود مقایسه شده است. از دیگر مشخصه‌های بسیار مهم یک کلید الکترومکانیکی زمان روشن شدن آن است. در این تحقیق علاوه بر ولتاژ روشن شدن، زمان روشن شدن نیز بررسی شده است.

مدل شبیه‌سازی

روش شبیه‌سازی به کار رفته در این تحقیق دینامیک مولکولی می‌باشد. روش دینامیک مولکولی یکی از روش‌های قدرتمند برای شبیه‌سازی سیستم‌های بس ذره‌ای می‌باشد [12]. در این روش با مشخص بودن نیروی وارد بر تک تک ذرات، تحول زمانی سیستم یعنی مکان و سرعت ذرات به صورت لحظه‌ای تعیین می‌شود.

می‌باشد. به منظور تعیین ولتاژ روشن شدن، شبیه‌سازی‌هایی به این صورت انجام شد.

پیکر بندی اولیه اتم‌ها با استفاده از نرم‌افزار متلب تولید شد و نانوکلیدهایی با ابعاد مختلف ساخته شدند. برای رهایی از تنش‌های ذاتی اولیه که ناشی از کوچک بودن ابعاد می‌باشد، هر نانوکلید (صفحه بالا و صفحه پایین) در 10000 گام زمانی با گام زمانی 10^{-4} ps در تحت شرایط دمایی ثابت، فقط در راستای افقی تنش زدایی شد.

به منظور تعیین ولتاژ روشن شدن نانوکلیدها، در هر نانوکلید لایه پایین به طور کامل و لایه بالا (نانو روبان گرافن) از هر سمت به اندازه 5\AA ثابت نگه داشته شده و سپس اختلاف پتانسیل صفحه‌ها به تدریج با گام‌های مناسب و یکسان (بسته به طول نانو روبان‌ها در محدوده $0,05\text{V}$ برای بلندترین نانو روبان تا 2V برای کوتاه ترین نانوروبان) از مقدار صفر افزایش یافت و به ازای هر گام افزایش ولتاژ، تعداد 10000 گام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با گام زمانی 10^{-3} ps در دمای K 300 با استفاده از الگوریتم ولت سرعتی انجام شد. نتایج نشان داد که این تعداد گام برای اطمینان از رسیدن سیستم به تعادل کافی می‌باشد. برای کنترل دما از ترموستات نوز هوور استفاده شد [18].

فرآیند افزایش ولتاژ برای هر نانوکلید تا بعد از رسیدن کمینه فاصله صفحات به حدود 2\AA (± 1) ادامه یافته است و در این حین کمیت‌هایی از جمله انرژی پتانسیل و کمینه فاصله صفحه بالا تا پایین محاسبه شده‌اند.

چالش اساسی در انجام این شبیه‌سازی، وابستگی بار الکتریکی اتم‌ها به هندسه و اختلاف پتانسیل اعمال شده به نانوکلیدها بود که به این شرح محاسبه شد.

با توجه به رسانا بودن صفحه‌های بالا و پایین، در هر لحظه بارهای الکتریکی به گونه‌ای بازآرایی می‌شوند که انرژی الکترواستاتیکی سیستم کمینه شود. بر همین اساس با استفاده از روش حساب وردش‌ها و در نظر

$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_j q_i}{r_{ij}}$ استفاده شود، در این صورت هنگام تماس اتم‌های کربن با یکدیگر در فاصله‌های کم، انرژی سیستم بینهایت شده و باعث بروز خطا در محاسبات می‌شود. به منظور جلوگیری از بینهایت شدن انرژی سیستم و همچنین بینهایت شدن پتانسیل موضعی اتم‌ها، تانسورهای T^{ij} به این صورت تعریف می‌شوند [16]:

$$T_{q-q}^{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\text{erf}\left(\frac{r_{ij}}{R}\right)}{r_{ij}} \quad 4$$

$$T_{p-q}^{i,j} = -\nabla_{r_i} T_{q-q}^{i,j}$$

$$T_{p-p}^{i,j} = -\nabla_{r_i} \nabla_{r_j} T_{q-q}^{i,j}$$

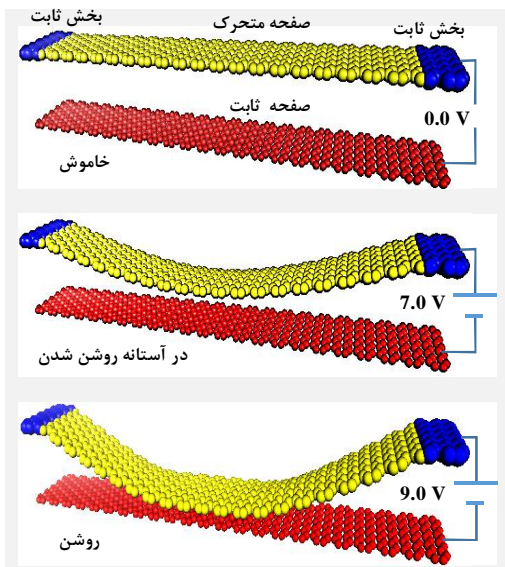
تابع خطا ناشی از در نظر گرفتن توزیع بار گاوسی روی اتم‌های کربن می‌باشد که به نحو واقعی تری تراکم بار روی اتم‌های کربن را نشان می‌دهد. در این رابطه R برای اتم‌های کربن در حدود $0,68 \text{\AA}$ می‌باشد [17]. در ساختار اولیه مکان اتم‌های کربن در تک لایه‌های گرافن با استفاده از رابطه:

$$\vec{r} = n\vec{t}_1 + m\vec{t}_2$$

$$\vec{t}_1 = a \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right) \quad 5$$

$$\vec{t}_2 = a \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right)$$

تعیین شده‌اند که m و n اعداد صحیح می‌باشند. لازم به توضیح است که در موارد عملی، صفحه پایین از فلزاتی مثل طلا ساخته می‌شود ولی در این شبیه‌سازی به خاطر ساده‌تر شدن از لایه گرافن استفاده شد. در ضمن نتایج شبیه‌سازی نشان داد که در برهم‌کنش‌های بین دو لایه، به دلیل غالب شدن برهم‌کنش‌های کولنی بر بقیه برهم‌کنش‌ها، این انتخاب تأثیر چندانی بر نتایج ندارد. همان گونه که اشاره شد ولتاژ روشن شدن یکی از مهم‌ترین پارامترهای یک کلید نانو الکترومکانیکی



شکل 3. چند مرحله از روشن شدن یک نانوکلید با فاصله صفحات اولیه 1,5nm، پهنای 1,2nm و طول 9,6nm.

در تصاویر موجود در شکل 3 می توان نزول ناگهانی را مشاهده کرد. در افزایش ولتاژ تا 7V هنوز کلید خاموش است و فقط با افزایش ولتاژ فقط به اندازه 2V نانوکلید روشن می شود و اتصال صورت می گیرد.

در شکل های 4 و 5 به ترتیب نمودارهای کمینه فاصله صفحات و انرژی پتانسیل بهنجار شده¹، برای نانوکلیدهایی با فاصله صفحات اولیه 1,5nm پهنای 1,2nm و طول های مختلف در محدوده 6,2nm تا 24,1nm برحسب ولتاژ اعمالی نشان داده شده است. برای محاسبه کمینه فاصله صفحات و انرژی پتانسیل، این کمیت ها در 1000 گام پایانی از هر 10000 گام محاسبه و میانگین گیری شده اند. اختلاف انرژی پتانسیل در نمونه های مورد آزمایش زیاد است و در اینجا هدف از بهنجار کردن انرژی پتانسیل، صرفاً نمایش حالت نزول به طور هم زمان برای تمام طول ها می باشد. برای بهنجار کردن، انرژی پتانسیل سیستم در ولتاژ صفر مقدار 1- فرض شده است. همان گونه که در شکل های 4 و 5 مشاهده می شود، در هر نانوکلید، نمودار کمینه

گرفتن قید مربوط به صفر بودن مجموع تمام بارها (بارهای مثبت و منفی) می توان به سه معادله زیر رسید [15]:

$$\sum_{j=1}^N T_{p-p}^{ij} \bar{P}_j + \sum_{j=1}^N T_{p-q}^{ij} q_j = -\bar{E}_i$$

$$\sum_{j=1}^N T_{p-q}^{ij} \bar{P}_j + \sum_{j=1}^N T_{q-q}^{ij} q_j + \lambda = -(\chi_i + V_i) \quad 6$$

$$\sum_{j=1}^N q_j = 0$$

که در رابطه فوق λ ضریب نامعین لاگرانژ می باشد معادله های فوق، یک دستگاه معادلات خطی می باشد که با حل آن می توان بارها و مؤلفه های قطبش اتم ها را به دست آورد. این روش بسیار شبیه روش مؤلفه ها می باشد [19].

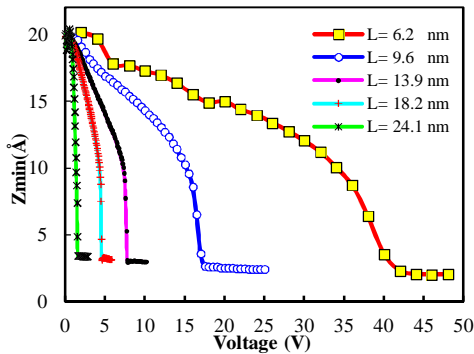
به این منظور در هنگام اجرای الگوریتم سرعتی ورلت، به ازای هر 10000 گام زمانی (یا یک گام افزایش ولتاژ)، بار الکتریکی اتم ها با استفاده از روش ذکر شده بر اساس هندسه جدید سیستم و با در نظر گرفتن قیدهای موجود، یعنی پتانسیل الکتریکی صفحات و صفر بودن مجموع بارها محاسبه و به روز رسانی شد. چون تمامی اتم ها از یک نوع هستند، کمیت χ_i تأثیری در محاسبات ایجاد نمی کند و بنابراین صفر در نظر گرفته شده است. شبیه سازی ها با استفاده از زبان برنامه نویسی ++C انجام شده و نتایج با استفاده از نرم افزارهای Matlab و VMD مورد تحلیل قرار گرفته و نمایش داده شده اند.

بحث و نتایج

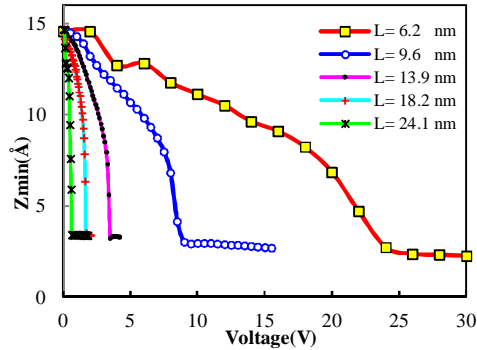
در شکل 3 چند تصویر از مراحل خم شدن و اتصال مربوط به یک نانوکلید با طول 9,6nm فاصله صفحات اولیه 1,5nm و پهنای 1,2nm نشان داده شده است.

¹ Normalized Potential Energy (NPE)

فاصله صفحات برحسب ولتاژ اعمالی دارای یک نزول ناگهانی می‌باشد.

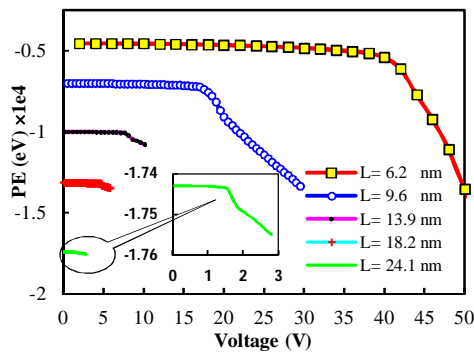


شکل 6. نمودار کمینه فاصله صفحات برای نانوکلیدها با فاصله صفحات 2,0nm، پهنای 1,2nm و طول‌های مختلف.



شکل 4. نمودار کمینه فاصله صفحات برای نانوکلیدها با فاصله صفحات 1,5nm، پهنای 1,2nm و طول‌های مختلف.

این نقطه نزول همان‌گونه که در قسمت قبل (شکل 2) اشاره شد، هنگامی اتفاق می‌افتد که سیستم نقطه تعادل پایدار نداشته باشد.

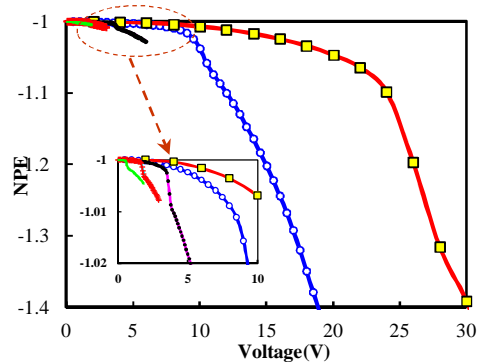


شکل 7. نمودار انرژی پتانسیل برای نانوکلیدها با فاصله صفحات 2,0nm، پهنای 1,2nm و طول‌های مختلف.

با مقایسه نتایج موجود در شکل‌های 4 تا 7 می‌توان مشاهده کرد که با کاهش طول و یا افزایش فاصله اولیه صفحات، ولتاژ روشن، ولتاژ روشن شدن نانوکلیدها افزایش می‌یابد و در هر طول مشخص، نزول نمودار کمینه فاصله صفحات در نانوکلیدهایی با فاصله صفحات اولیه 1,5nm سریع‌تر اتفاق افتاده است.

برای مثال، مطابق با شکل‌های 4 و 5 این نزول در طول 9,6nm برای نانوکلید با فاصله اولیه صفحات 1,5nm در حدود 9V دیده می‌شود در حالی که برای نانوکلید با فاصله اولیه صفحات 2,0nm در 17V اتفاق افتاده است.

ولتاژ روشن شدن برای دو دسته از نانوکلیدهای شبیه‌سازی شده با فاصله صفحات 1,5nm و 2,0nm در شکل 8 نشان داده شده و با برخی از مدل‌های موجود

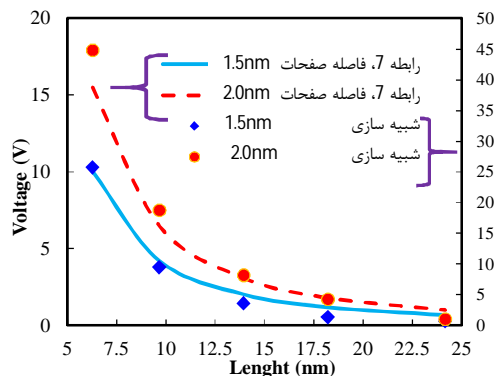


شکل 5. انرژی پتانسیل بهنجار شده برای نانوکلیدها با فاصله صفحات 1,5nm، پهنای 1,2nm و طول‌های مختلف.

می‌توان دید که با افزایش طول نانو روبان گرافنی، نقطه نزول به سمت ولتاژهای کم‌تر انتقال یافته است.

این نزول را می‌توان در نمودار انرژی پتانسیل شکل 5 نیز ملاحظه کرد و بر این اساس می‌توان ولتاژ روشن شدن نانوکلیدها را محاسبه کرد. همچنین به منظور بررسی اثر فاصله بین صفحات، نمودارهای کمینه فاصله صفحات و انرژی پتانسیل برای نانوکلیدهایی با فاصله صفحات اولیه 2nm پهنای 1,2nm و طول‌های مختلف در محدوده 6,2nm تا 24,1nm برحسب ولتاژ اعمالی در شکل‌های 6 و 7 نشان داده شده است.

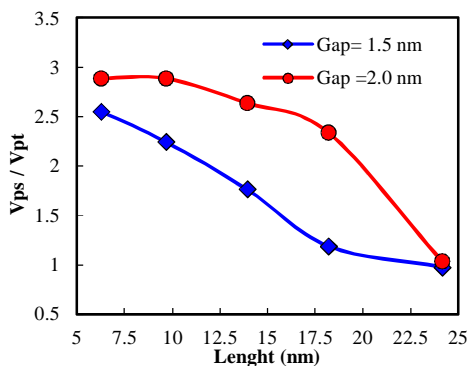
روند پیش‌بینی شده توسط روابط نظری 7 (یا 9) یکسان است ولی ولتاژ روشن شدن برای نانوکلیدهای الکترومکانیکی با طول کم، حداقل دو برابر مقادیر پیش‌بینی شده توسط این روابط می‌باشد.



شکل 8. مقایسه ولتاژ روشن شدن به دست آمده از شبیه‌سازی با رابطه نظری 7.

این اختلاف ممکن است از آنجا ناشی شده باشد که روابط موجود از جمله 7 و 9 اغلب برای انحناهای کم تیغه‌ها طراحی شده و برای طول‌های کوتاه و انحناهای زیاد مناسب نمی‌باشند.

به منظور بررسی دقیق‌تر، نسبت ولتاژ به دست آمده از روش شبیه‌سازی (V_{ps}) به ولتاژ پیش‌بینی شده توسط روابط نظری (V_{pt}) در شکل 9 ترسیم شده است.



شکل 9. نسبت ولتاژهای به دست آمده از شبیه‌سازی به نتایج نظری.

نتایج موجود در این شکل نشان می‌دهد با افزایش طول نانو رویان‌ها، این نسبت به تدریج کاهش می‌یابد و به عدد 1 نزدیک می‌شود. به عبارت دیگر نتایج شبیه‌سازی به نتایج نظری نزدیک می‌شوند. با توجه به اینکه در این

مقایسه شده است. همان‌گونه که در قسمت مقدمه اشاره شد، مدل‌های زیادی برای محاسبه ولتاژ روشن شدن کلیدهای الکترومکانیکی ارائه شده است [9-11]. [5]. نتایج شبیه‌سازی در این تحقیق، بیشترین هم‌خوانی را با رابطه‌های زیر داشت [5 و 11].

$$V_{\text{Pull-in}} = \sqrt{\frac{8Kg_0^3}{27\epsilon_0 LW}} \quad 7$$

اگر دقت کنیم رابطه 7 همان رابطه 2 می‌باشد با این تفاوت که L طول، W پهنا و g_0 فاصله صفحات نانوکلید است. همچنین در رابطه 7 به جای ثابت فنر، ثابت معادل یا مؤثر یک تیغه به این صورت تعریف شده است [5].

$$K = \frac{32EWt^3}{L^3} \quad 8$$

نتایج ما با رابطه زیر نیز هم‌خوانی خوبی داشت [20].

$$V_{\text{Pull-in}} = 10.85 \left(1 + 0.024 \frac{NL^2}{EI} \right) \sqrt{\frac{EIg_0^3}{\epsilon_0 WL^4}} \quad 9$$

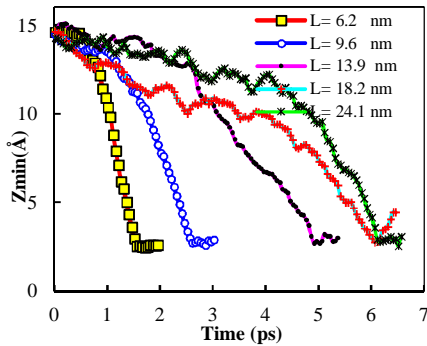
$$I = \frac{1}{12} Wt^3 \quad \text{که در آن:}$$

در رابطه‌های 8 و 9، E و t به ترتیب مدول یانگ و ضخامت تیغه می‌باشند. چون در این تحقیق صفحه‌های گرافنی نقش تیغه را ایفا می‌کنند، بنابراین مقادیر $1/02 \text{ Tpa}$ [21] و $3/5 \text{ \AA}$ [22] برای آنها منظور شده است.

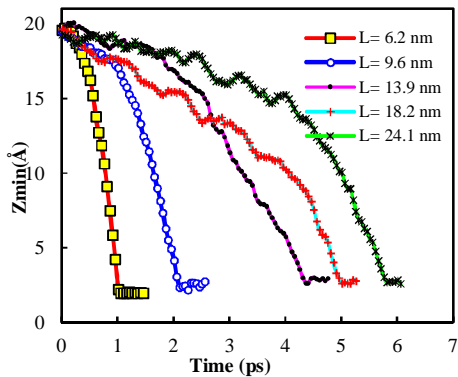
رابطه 9 بر اساس حل معادلات دیفرانسیل تنش و کرنش در محیط‌ها پیوسته به دست آمده است و در آن N تنش باقی ماده در سیستم می‌باشد. با توجه به اینکه در این شبیه‌سازی‌ها تنش باقی مانده وجود ندارد، (نانوکلیدها قبل از اعمال ولتاژ تنش زدایی شده‌اند) مقدار آن صفر منظور شده است. نتایج حاصل از روابط 7 و 9 بسیار به هم نزدیک می‌باشند و بنابراین در شکل 8 نتایج مربوط به رابطه 7 در محور سمت چپ گزارش شده است

نتایج موجود در شکل 8 نشان می‌دهند که اگرچه روند وابستگی ولتاژ روشن شدن به طول و فاصله صفحات با

کاهش می‌یابد که با نتایج مشاهده شده قبلی سازگاری دارد [24].



شکل 10. کمینه فاصله بین صفحات برحسب زمان برای نانوکلیدها با فاصله صفحات 1.5nm.



شکل 11. کمینه فاصله بین صفحات برحسب زمان برای نانوکلیدها با فاصله صفحات 2.5nm.

همچنین می‌توان ملاحظه کرد که زمان روشن شدن نانوکلیدهای شبیه‌سازی شده به‌طور قابل ملاحظه‌ای کوچک است.

اگر موانع تجربی ساخت این نانوکلیدها برداشته شود، این نانوکلیدها می‌توانند تحول عظیمی در زمینه‌ها کاربردی از جمله مخابرات، مشدها و حسگرها ایجاد کنند. زمان گزارش شده برای نانوکلیدها تاکنون از مرتبه چند نانوثانیه می‌باشد درحالی که زمان به‌دست آمده برای روشن شدن این نانوکلیدها از مرتبه چند پیکوثانیه می‌باشد. همچنین می‌توان مشاهده کرد که نانوکلیدهایی با طول کمتر سریع‌تر عمل می‌کنند.

ایده استفاده از گرافن در سیستم‌های محدوده تراهرتز، شاید اولین بار به‌صورت جامع در مجله Science

شبیه‌سازی از هیچ تقریبی استفاده نشده است، به‌نظر می‌رسد حداقل در حد فیزیک کلاسیک نتایج درست باشند. بدیهی است که تحلیل دقیق این موضوع نیاز به روش‌های پیشرفته‌تری از جمله دینامیک مولکولی کوآتومی دارد که بسیار زمان‌گیر است و شاید حتی برای این مسئله به‌راحتی قابل اجرا نباشد.

همان‌گونه که اشاره شد پارامتر بسیار مهم دیگر در کلیدها یا نانوکلیدهای الکترومکانیکی زمان روشن شدن می‌باشد. این امر در فرایندهای کلید زنی مربوط به سیستم‌های مخابراتی بسیار حائز اهمیت است. زمان روشن شدن نانوکلیدها تابع پیچیده‌ای از شکل و مشخصات هندسی، ولتاژ اعمال شده و جنس (مشخصه‌های مکانیکی) آنها می‌باشد و در اغلب موارد براساس تحلیل دینامیکی سیستم و حل معادلات دیفرانسیل مربوط به تنش-کرنش محاسبه می‌شود. زمان روشن شدن نانوکلیدهای مورد بحث در این تحقیق را می‌توان از شکل‌های 10 و 11 به‌دست آورد. به‌منظور بررسی زمان روشن شدن این کلیدها، شبیه‌سازی‌هایی به‌این شرح انجام شد. پس از مشخص شدن ولتاژ روشن شدن نانوکلیدها، هر نانوکلید از همان ابتدا به‌ولتاژ روشن شدن متصل شد و فرایند تحول زمانی سیستم با استفاده از الگوریتم ورلت دینامیک مولکولی با گام زمانی 10^{-3} ps انجام شد. به‌منظور افزایش دقت، بار الکتریکی اتم‌ها به‌ازای هر ده گام زمانی با استفاده از رابطه‌های 3 تا 5 محاسبه شد. در این شبیه‌سازی‌ها کمینه فاصله بین صفحه ثابت و متحرک در هر گام زمانی محاسبه شده و حداقل فاصله حدود $2/0\text{\AA}$ (1) $(2 \pm)$ به‌عنوان معیاری برای روشن شدن نانوکلیدهای منظور شده است.

کمینه فاصله بین صفحه‌ها در شکل‌های 10 و 11 به‌ازای هر 50 گام زمانی نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهند که زمان روشن شدن کلیدها با افزایش طول

مرجع‌ها

[1] Ke. Changhong, D. Horacio, Nano-electro-mechanical Systems and Modelling, *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology*, American Scientific Publishers (2005).

[2] ف. مرادیانی، م. صیفوری، ک. عابدی، تحلیل و طراحی سوئیچ پلاسمونیک با استفاده از نانونوارهای گرافنی در طول‌موج‌های مادون قرمز میانی، پژوهش سیستم‌های بس‌ذره‌ای، **8** (2018) 101-105.

[2] F. Moradiani, M. Seifouri, K. Abedi, Design and Analysis of Plasmonic Switch at mid-IR Wavelengths with Graphene Nano-Ribbons, *Journal of Research on Many-body Systems* **8** (2018) 101-105.

[3] J. Sun, M. Muruganathan, N. Kanetake, H. Mizuta, Locally-actuated graphene-based nano-electro-mechanical switch, *Micromachines* **7** (2016) 1-6.

[4] E.L. Wolf, *Applications of graphene: an overview*, Springer, (2014).

[5] W. Wang, M. Muruganathan, J. Kulothungan, H. Mizuta, Study of dynamic contacts for graphene nano-electromechanical switches, *Japanese Journal of Applied Physics* **56** (2017) 1-8.

[6] S.N. Kazmi, M.A. Hafiz, K.N. Chappanda, S. Ilyas, J. Holguin, P.M. Costa, M.I. Younis, Tunable nanoelectromechanical resonator for logic computations, *Nanoscale* **9** (2017) 3449-3457.

[7] K.E. Kaczor-Urbanowicz, C. Martín Carreras-Presas, T. Kaczor, M. Tu, F. Wei, F. Garcia-Godoy, D.T. Wong, Emerging technologies for salivaomics in cancer detection, *Journal of cellular and molecular medicine* **21** (2017) 640-647.

[8] O.Y. Loh, H.D. Espinosa, Nanoelectromechanical contact switches, *Nature nanotechnology* **7** (2012) 283-295.

مطرح شده باشد [24]. این ایده از اینجا نشأت می‌گیرد که گرافن سبک (جرم در واحد سطح کوچک) و در عین حال بسیار محکم (ثابت الاستیک بالا) است. این وضعیت مشابه حالتی است که یک جرم خیلی سبک به یک فنر بسیار محکم بسته شده باشد. حداقل طبق رابطه $\omega = \sqrt{k/m}$ می‌توان گفت که فرکانس ارتعاشی چنین سیستمی می‌تواند بالا باشد.

در حال حاضر استفاده از گرافن در سیستم‌های محدوده تراهرتز بیشتر به صورت ایده مطرح شده و به صورت نظری یا شبیه‌سازی مورد بررسی قرار می‌گیرد [25]. در طی سال‌های گذشته تلاش‌های زیادی برای تحقق این ایده‌ها انجام شده است ولی به نظر می‌رسد در زمینه کلیدهای نانوالکترومکانیکی هنوز به مرحله عمل نرسیده است.

نتیجه‌گیری

با استفاده از ترکیب روش دینامیک مولکولی با روش ممان‌ها، عملکرد نانوکلیدهای گرافنی تک‌لایه‌ای با استفاده از روش دینامیک مولکولی بررسی شد. نتایج نشان داد که در طول‌های کوتاه نانو روبان‌ها، ولتاژ روشن شدن حدود دو برابر ولتاژ پیش‌بینی شده توسط روابط موجود نظری می‌باشد. همچنین نتایج نشان داد که ولتاژ روشن شدن نانوکلیدها با کاهش فاصله صفحه‌ها یا افزایش طول کاهش می‌یابد و با افزایش طول به نتایج حاصل از روابط نظری نزدیک می‌شود. علاوه بر این نتایج نشان داد که کوچک شدن ابعاد نانوکلیدها از جمله طول و فاصله بین صفحات تأثیر به‌سزایی در زمان روشن شدن نانوکلیدها دارد.

سپاسگزاری

با تشکر از دانشگاه اراک که از این فعالیت در قالب طرح پژوهشی به شماره قرارداد 5112/97 حمایت کرده است.

- nanotubes via charge-dipole model, *Physical Review B* **76** (2007) 1-5.
- [17] A. Mayer, P. Lambin, R. Langlet, Charge-dipole model to compute the polarization of fullerenes, *Applied physics letters* **89** (2006) 1-3.
- [18] D.J. Evans, B.L. Holian, The nose-hoover thermostat, *The Journal of chemical physics* **83** (1985) 4069-4074.
- [19] L.N. Dworsky, Introduction to numerical electrostatics using MATLAB, John Wiley & Sons, 2014.
- [20] Y. Fang, P. Li, A new approach and model for accurate determination of the dynamic pull-in parameters of microbeams actuated by a step voltage, *Journal of micromechanics and microengineering* **23** (2013) 1-11.
- [21] F. Scarpa, S. Adhikari, A.S. Phani, Effective elastic mechanical properties of single layer graphene sheets, *Nanotechnology* **20** (2009) 1-10.
- [22] C.J. Shearer, A.D. Slattery, A.J. Stapleton, J.G. Shapter, C.T. Gibson, Accurate thickness measurement of graphene, *Nanotechnology* **27** (2016) 1-10.
- [23] P. Li, T. Cui, Single-crystalline graphene radio-frequency nanoswitches, *Journal of Micromechanics and Microengineering* **25** (2015) 1-6.
- [24] P. Tassin, T. Koschny, C.M. Soukoulis, Graphene for terahertz applications, *Science* **341** (2013) 620-621.
- [25] M. Hasan, S. Arezoomandan, H. Condori, B. Sensale-Rodriguez, Graphene terahertz devices for communications applications, *Nano Communication Networks* **10** (2016) 68-78.
- [9] M. Nie, Q.-A. Huang, W. Li, Pull-in characterization of doubly-clamped composite beams, *Sensors and Actuators A* **151** (2009) 118-126.
- [10] H. Rong, Q.-A. Huang, M. Nie, W. Li, An analytical model for pull-in voltage of clamped-clamped multilayer beams, *Sensors and Actuators A* **116** (2004) 15-21.
- [11] S. Chowdhury, M. Ahmadi, W.C. Miller, Pull-in voltage study of electrostatically actuated fixed-fixed beams using a VLSI on-chip interconnect capacitance model, *Journal of Microelectromechanical systems* **15** (2006) 639-651.
- [12] ا. پیوسته، ق. الهیاری‌زاده، ع. مینوچهر، محاسبه خواص مکانیکی و ترمودینامیکی ساختار 3C کربید سیلیکون با استفاده از دینامیک مولکولی و نظریه تابعی چگالی، پژوهش سیستم‌های بس‌ذره‌ای، **8** (2019) 22-38.
- [12] I. Peyvaste, G. Alahyarizadeh, A. Minuchehr, Mechanical and thermodynamic properties of 3C structure of silicon carbide using molecular dynamics and density functional theory methods, *Journal of Research on Many-body Systems* **8** (2019) 22-38.
- [13] J. Tersoff, Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems, *Physical Review B* **39** (1989) 5566-5568.
- [14] A. Mayer, A monopole-dipole model to compute the polarization of metallic carbon nanotubes, *Applied Physics Letters* **86** (2005) 1-2.
- [15] Z. Wang, R.W. Scharstein, Electrostatics of graphene: Charge distribution and capacitance, *Chemical Physics Letters* **489** (2010) 229-236.
- [16] Z. Wang, M. Devel, Electrostatic deflections of cantilevered metallic carbon