

Investigation of structural, electronic and transport properties of III-V nanotubes using by Density Functional Theory

Monir Kamalian*

Department of Physics, Faculty of Science, Yadegar-e-Imam Khomeini (RAH) Shahre Rey Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

Received: 14/09/2020 Final revised: 04/08/2021 Accepted: 28/11/2021

 [10.22055/JRMBS.2021.17273](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.17273)

Abstract

In this study, the structural, electronic and transport properties of the (5,0) zig-zag BN, GaAs, GaN, GaP, InN and InP nanotubes have been studied using Density Functional Theory (DFT) combined with Non-Equilibrium Green's Function (NEGF) formalism with SIESTA software. The electronic band structure, density of states (DOS), current-voltage (I-V) characteristics and quantum conductance curves (dI/dV) of these structures were studied under low-bias conditions. The obtained results demonstrate that all of these structures exhibit semiconducting behavior but the (5,0) zig-zag GaP nanotube has an indirect band gap which makes it suitable to use for full color displays. Instead the (5,0) zig-zag GaAs nanotube has a smaller band gap, the highest value of the electron density of states and it showed the amazing property of Negative Differential Resistance (NDR). Therefore, it is an important candidate to use in high-speed optoelectronic devices, high-speed switching devices and high frequency oscillators.

Keywords: III-V Compounds, Nanotube, Density Functional Theory (DFT), Negative Differential Resistance (NDR), SIESTA Software

*Corresponding Author: M.Kamalian@srbiau.ac.ir

بررسی خواص ساختاری، الکترونی و تراپردی نانولوله‌های III-V با استفاده از تئوری تابعی چگالی

منیر کمالیان*

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره) شهر ری، تهران، ایران

دریافت: 1399/06/24 ویرایش نهایی: 1400/06/01 پذیرش: 1400/09/02

 [10.22055/JRMBS.2021.17273](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.17273)

چکیده

در این مقاله خواص ساختاری، الکترونی و تراپردی نانولوله‌های زیگزاگ (۵،۰) بورون نیتراید (BN)، گالیم آرسناید (GaAs)، گالیم نیتراید (GaN)، گالیم فسفاید (GaP)، ایندیوم نیتراید (InN) و ایندیوم فسفاید (InP) با استفاده از تئوری تابعی چگالی (DFT) ترکیب شده با فرمالیزم تابع گرین غیرتعدادی (NEGF) توسط نرم‌افزار SIESTA مورد مطالعه قرار گرفته شده است. ساختار باندهای الکترونی، چگالی حالت‌های الکترونی (DOS)، گاف انرژی، مشخصه جریان ولتاژ (I-V) و منحنی تراپرد (dI/dV) این ساختارها تحت شرایط بایاس پائین مورد بررسی قرار گرفت، نتایج به دست آمده ماهیت نیم‌رسانایی این ساختارها را تأیید می‌نماید. در بین این ساختارها، نانولوله زیگزاگ (۵،۰) گالیم فسفاید (GaP) باند گاف انرژی غیر مستقیم را نشان داده است که این ساختار را مناسب برای به‌کارگیری در نمایشگرهای رنگی می‌سازد در عوض نانولوله زیگزاگ (۵،۰) گالیم آرسناید (GaAs) علاوه بر باند گاف انرژی کوچکتر و چگالی حالت‌های الکترونی بیشتر مشخصه مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR) از خود نشان داد به گونه‌ای که می‌تواند کاندیدای مناسبی برای به‌کارگیری در قطعات اپتوالکترونیکی سرعت بالا، سوئیچ کننده‌های سرعت بالا و نوسانگرهای سرعت بالا باشد.

کلیدواژه‌گان: ترکیبات گروه III-V، نانولوله، تئوری تابعی چگالی (DFT)، مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR)، نرم افزار SIESTA

مقدمه

نانوتکنولوژی کاربردی و تئوری، مهندسی مولکولی، فیزیک حالت جامد تجربی، محاسباتی و یا تئوری، شیمی و بسیاری از زمینه‌های دیگر به شدت مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته‌اند [1]. حال اگر ساختار لانه زنبوری گرافن حفظ شود و در سلول واحد گرافن به جای دو اتم کربن اتم‌های غیر همانند گروه III-V قرار گیرد، گروهی از مواد دوبعدی شکل می‌گیرند که بر خلاف گرافن، اغلب دارای گاف انرژی می‌باشند و بعضی از خواص آنها با گرافن متفاوت است. اخیراً مواد

از زمان کشف نانولوله‌های کربنی در سال 1991، نانولوله‌ها بسته به خواص فیزیکی و شیمیایی بی‌نظیرشان، بستر فعالیت عظیمی را در تمامی زمینه‌های علمی و مهندسی ایجاد کرده‌اند. قبل از آن هیچ ماده‌ای، ترکیبی از عالی‌ترین خواص الکترونیکی، مکانیکی و حرارتی را از خود نشان نداده بود. نانولوله‌ها به عنوان پتانسیل کاربردی در کلیه اقسام قطعات نانومقیاس در تمامی علوم شامل نانوعلم تجربی و محاسباتی،

* نویسنده مسئول: M.Kmalian@srbiau.ac.ir

نوری استفاده نمود [13-15]. گالیم آرسناید (GaAs)، یکی از چالش برانگیزترین ترکیبات نیم‌رسانای گروه III-V می‌باشد که به علت جرم مؤثر الکترونی پائین، تحرک پذیری الکترونی بالا و سرعت سوق اشباع بالا برای قطعات اپتوالکترونیک و کاربردهای قطعه‌ای کم قدرت و سرعت فوق بالا مورد توجه قرار گرفته است [16-18]. گالیم نیتراید (GaN)، یکی از جالب‌ترین ترکیبات نیم‌رسانای گروه III-V می‌باشد که بسته به کاربردهای اپتوالکترونیکی آن در رنج طول‌موج کوتاه، قابلیت کاربرد در دماهای بالا، قطعات الکترونیکی فرکانس و توان بالا، توجه فراوانی را به خود جلب کرده و در قطعاتی نظیر آشکارسازها، دیودهای لیزری، قطعات الکترونیکی تابشی-مقاومتی و گسیلنده‌های آبی و فرابنفش به‌کار گرفته شده است [19-22]. گالیم فسفاید (GaP)، یکی از محبوب‌ترین ترکیبات نیم‌رسانای گروه III-V می‌باشد که به دلیل خواص فیزیکی بی‌نظیری مانند رسانش گرمایی بالا، چگالی پائین و گاف نواری پهن برای سیستم‌های اپتیکی‌ای در محدوده طول‌موج مرئی و ماوراء بنفش و ساخت دیودهای گسیلنده نوری مورد توجه قرار گرفته‌اند [25-23]. ایندیوم نیتراید (InN)، یکی دیگر از ترکیبات نیم‌رسانای گروه III-V است که دارای جرم مؤثر الکترون-حفره‌ای بسیار کوچک می‌باشد که به لحاظ کاربردی در ترانزیستورهای اثر میدانی با فرکانس بالا در نظر گرفته می‌شود، همچنین مشخصه جذبی آن نزدیک به مادون قرمز می‌باشد. از این نیم‌رسانا در صنعت میکروالکترونیک، اپتوالکترونیک و سلول‌های خورشیدی استفاده می‌شود [26-28]. ایندیوم فسفاید (InP)، یکی از نیم‌رساناهای ترکیبات گروه III-V با باند گاف انرژی پهن و تحرک‌پذیری الکترونی بالا می‌باشد که آنرا یکی از ترکیبات قابل توجه برای قطعات الکترونیکی سرعت بالا، مدارهای منطقی با سرعت بالا و مخابرات فیبر نوری ساخته است [32-

نیم‌رسانای با ابعاد پائین، مورد علاقه محققین در زمینه نانو قرار گرفته است که در این میان مواد ترکیبات گروه III-V به علت پتانسیل کاربردی و تکنولوژیکی برترشان در قطعات اپتوالکترونیکی، مجتمع‌ات فوتونیک، ماکروویو فرکانسی فوق بالا، قطعات نانو الکترونیکی سرعت فوق بالا، سلول‌های خورشیدی فوتولتائی، لیزرها، آشکارسازهای تابشی و منابع گسیلنده میدان الکترونی توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند [2-11]. ترکیبات III-V به دلیل دارا بودن دو ویژگی مهم برای صنایع و علوم مختلف بسیار جذاب هستند. ویژگی اول آن است که این رده از ترکیبات باند گاف قابل تنظیمی را از 0/17 الکترون ولت برای InSb تا 6/2 الکترون ولت برای AlN فراهم آورده‌اند از این رو ساخت قطعات اپتوالکترونیکی نانو مقیاس به واسطه استفاده از چنین ساختارهایی برای رنج وسیعی از طول‌موج‌ها با بسیاری از مشخصه‌های پیشرفته همانند رسانش گرمایی بالا و پایداری عالی محقق خواهد شد و ویژگی دوم، قابلیت حرکت الکترونی (موبیلیتی) بسیار بالای این ترکیبات است که آنها را ماده شگفت‌انگیزی برای کاربردهای عالی در عملکردهای توان و تحرک‌پذیری بالا ساخته است [12]. از این رو به دلیل اهمیت ساختارهای ترکیبات گروه III-V و برخی خواص منحصر به فرد این ترکیبات در صنایع و علوم مختلف در حوزه نانو، در این مقاله به بررسی ویژگی‌های ساختاری و الکترونی برخی از نانولوله‌های کاربردی از این گروه همچون نانولوله‌های BN، GaAs، GaN، GaP و InP پرداخته‌ایم.

بورن نیتراید (BN)، ترکیبی نیم‌رسانا با باند گاف انرژی پهن و دارای خواص ویژه شیمیایی، اپتیکی و حرارتی است که به سبب عملکرد مناسب می‌توان از آن به عنوان یک فرصت مناسب در به‌کارگیری در قطعات الکترونیکی مبتنی بر اسپین، سوئیچ کننده‌های دیجیتال، ترانزیستورهای اثر میدانی تونل‌زنی و قطعات گسیلنده

محاسبات در قالب تقریب LDA^3 با استفاده از تابع تبدلی-همبستگی پردو-زینگر $(PZ)^4$ [34] و شبه‌پتانسیل نرْم-پایسته⁵ مارتین-ترولیر⁶ $(MT)^6$ [35] (برای برهم‌کنش هسته با الکترون‌های ظرفیت) انجام گرفته است. برای کلیه اتم‌ها از مجموعه توابع پایه زتای دوگانه قطبی⁷ $(DZP)^7$ بهره‌جسته‌ایم و بهینه‌سازی ساختارهای هندسی با مینیم کردن انرژی کل ساختار توسط نیروی هلمن-فایمن⁸ که مشتمل بر تصحیحات شبه‌پائولی⁹ می‌باشد، صورت گرفته است. عمل بهینه‌سازی تا زمانی ادامه می‌یابد که نیروی اعمالی روی اتم‌ها به کمتر از مقدار $0.01 \text{ eV/\text{Å}}$ برسد چنانچه مقدار قطع درجه بندی¹⁰ برای محاسبه پتانسیل‌ها و چگالی الکترونی $350Ry$ در نظر گرفته شده است. برای افزایش دقت محاسبات دمای الکترونها 300 درجه کلون و مش بندی نقاط K در منطقه اول بریلوئن به صورت $3 \times 3 \times 60$ در نظر گرفته شده است. بعد از اعمال یک ولتاژ بایاس از رنج 0 تا 1 ولت (بایاس پائین) در سرتاسر الکترونها، جریان عبوری از ناحیه مرکزی (ناحیه پراکندگی) از فرمالیزم لاندائور-بوتیکر¹¹ که با رابطه زیر داده می‌شود به دست می‌آید:

$$I = \frac{2e^2}{h} \int T(E, V_b) dE \quad 1$$

که در آن $\frac{2e^2}{h}$ واحد کوآنتومی رسانش و $T(E, V_b)$ احتمال انتقال کل در انرژی ورودی در سرتاسر قطعه تحت ولتاژ بایاس اعمالی است که خودش از رابطه $T(E, V_b) = \sum T_n(E, V_b)$ به دست می‌آید و در آن V_b ولتاژ بایاس اعمالی است. شکل 1 مدل قطعه‌ای ساختارهای مورد بررسی را برای انجام محاسبات نشان می‌دهد.

[29]. در مطالعه حاضر به بررسی و مقایسه خواص ساختاری، الکترونی و تراپردی نانولوله‌های زیگزاگ $(5,0)$ بورون نیتراید (BN) ، گالیم آرسناید $(GaAs)$ ، گالیم نیتراید (GaN) ، گالیم فسفاید (GaP) ، ایندیوم نیتراید (InN) ، و ایندیوم فسفاید (InP) با استفاده از تئوری تابعی چگالی¹ (DFT) ترکیب شده با فرمالیزم تابع گرین غیر تعادلی² $(NEGF)$ پرداخته شده است. کلیه محاسبات انجام شده در این مطالعه برای گزارش نتایج با استفاده از کد محاسباتی $SIESTA$ و $TRANSIESTA$ [33] که بر پایه نظریه تابعی چگالی بنیان‌گذاری شده، انجام گرفته است.

مواد و روش محاسبات

در این مطالعه برای بررسی و مقایسه خواص ساختاری، الکترونی و تراپردی از ساختارهای نانولوله زیگزاگ $(5,0)$ بورون نیتراید (BN) ، گالیم آرسناید $(GaAs)$ ، گالیم نیتراید (GaN) ، گالیم فسفاید (GaP) ، ایندیوم نیتراید (InN) و ایندیوم فسفاید (InP) به عنوان ناحیه مرکزی (ناحیه پراکندگی) بهره‌جسته‌ایم که سلول واحد هر یک از این ساختارها شامل 60 اتم (30) از گروه III و 30 اتم از گروه V می‌باشد. به منظور بررسی خواص تراپرد الکترونی، ساختارهای نانولوله‌ای منتخب، میان دو الکتروود از جنس طلا $(Au(100))$ که هرکدام از آنها مشتمل بر صد اتم طلا می‌باشد قرار گرفته است (23) درصد از اتم‌های طلا از هر دو الکتروود به همراه ساختار نانولوله به عنوان ناحیه پراکندگی، در محاسبات $TRANSIESTA$ در نظر گرفته شده است). برای انجام محاسبات $SIESTA$ در ابتدا ساختارهای در نظر گرفته شده باید بهینه شود. این

⁷Duple-ζ Plorized

⁸Hellmann-Feynman Forces

⁹Pulay-Like Correction

¹⁰Mesh-Cutoff

¹¹Landauer-Buttiker Formalism

¹Density Functional Theory

²Non-Equilibrium Green's Function

³Local Density Approximation

⁴Perdew-Zunger

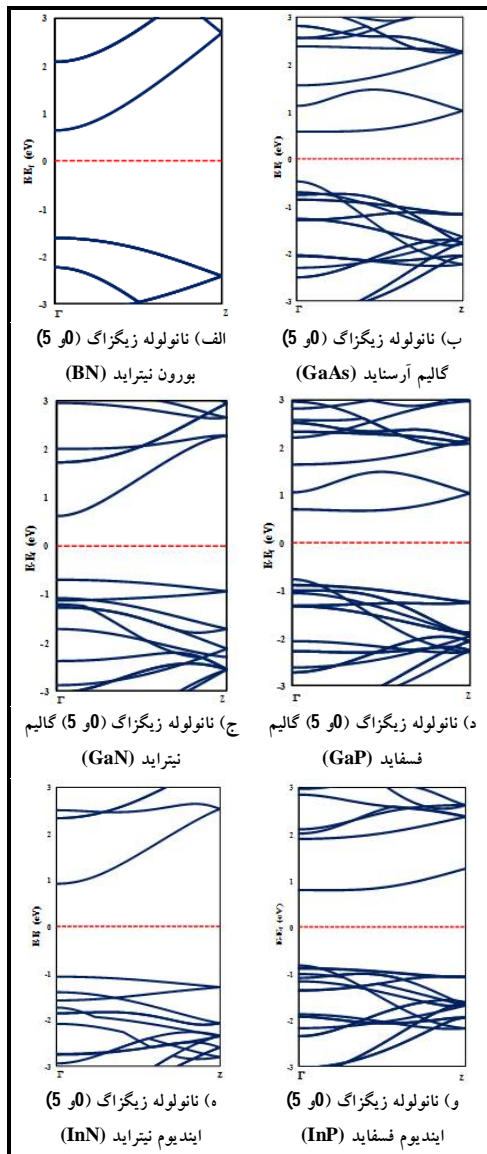
⁵Norm-Conserving

⁶Troullier-Martins

بحث و نتایج

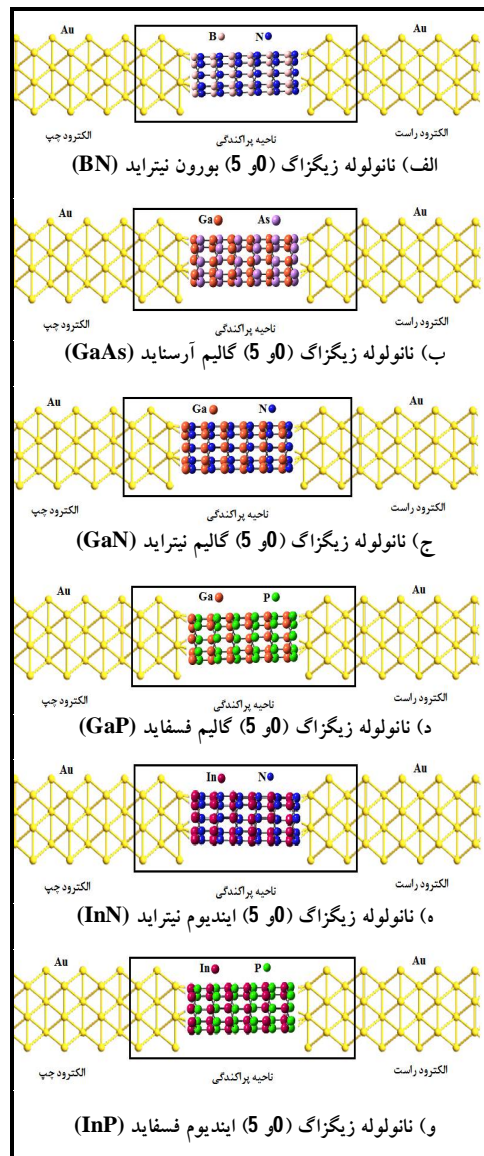
الف) ساختار نواری الکترونی

به منظور بررسی رفتار رسانشی ساختارهای منتخب، ابتدا محاسبات ساختار نواری برای ساختارهای شکل 1 انجام گرفته است زیرا رسانش کوآتومی به شدت متأثر از ساختار نواری الکترونی است.



شکل 2. ساختار نواری نانولوله‌های زیگزاگ (5,0) الف: بورن نیتراید (BN)، ب: گالیم آرسناید (GaAs)، ج: گالیم نیتراید (GaN)، د: گالیم فسفاید (GaP)، ه: ایندیوم نیتراید (InN)، و: ایندیوم فسفاید (InP). خط چین قرمز رنگ تراز انرژی فرمی را مشخص می‌کند.

در میان ساختارهای بررسی شده نانولوله زیگزاگ (5,0) گالیم فسفاید (GaP) گاف انرژی غیر مستقیمی



شکل 1. مدل قطعه‌ای ساختارهای نانولوله زیگزاگ (5,0) الف: بورن نیتراید (BN)، ب: گالیم آرسناید (GaAs)، ج: گالیم نیتراید (GaN)، د: گالیم فسفاید (GaP)، ه: ایندیوم نیتراید (InN)، و: ایندیوم فسفاید (InP) به‌عنوان ناحیه کانال (پراکندگی).

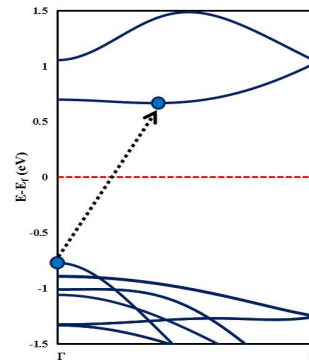
جدول 1. مقادیر بهینه شده طول پیوند، قطر نانولوله و گاف انرژی ساختارهای مورد مطالعه در شکل 1.

ساختار	بورون نیتراید (BN)	گالیم آرسناید (GaAs)	گالیم نیتراید (GaN)	گالیم فسفاید (GaP)	ایندیوم نیتراید (InN)	ایندیوم فسفاید (InP)
طول پیوند (Å)	کار حاضر 1,44	2,41	1,88	2,29	1,88	2,38
کار دیگران	1,445 [37]	2,40 [38]	1,90 [39]	2,27 [40]	---	---
قطر نانولوله (Å)	کار حاضر 4,20	6,80	5,39	6,32	5,46	6,72
کار دیگران	4,22 [37]	6,86 [38]	5,37 [39]	6,28 [40]	---	---
گاف انرژی (eV)	کار حاضر 2,262	1,055	1,320	1,369	1,997	1,623
کار دیگران	2,21 [41]	0,81 [42]	1,63 [43]	1,1 [40]	---	---

ب) چگالی حالت‌های الکترونی (DOS) و ضریب تراگسیل (Transmission Coefficient)

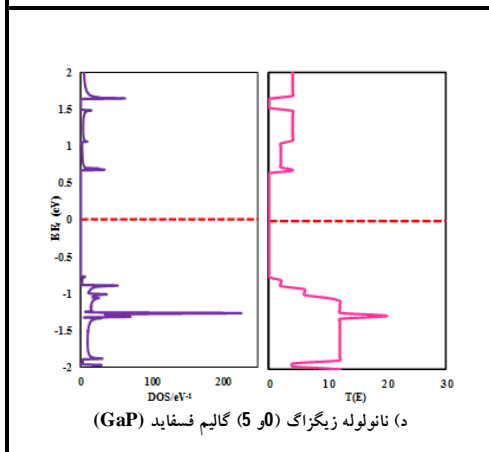
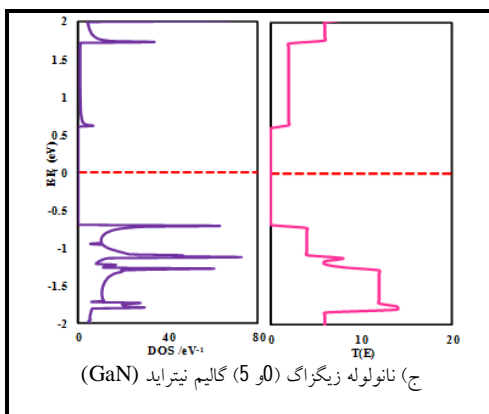
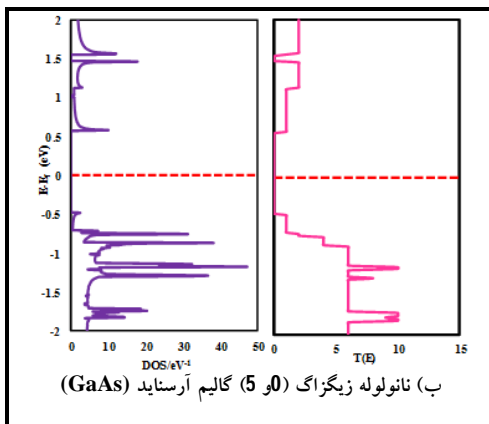
ساختار نواری به‌همراه چگالی حالت‌های الکترونی اطلاعات دقیقی در مورد رسانش الکترونی می‌دهد، ساختارهای با تراز انرژی نیمه‌پر، رسانا هستند اما چنانچه ترازهای قابل دسترس نیمه‌پر کمتری در نزدیکی تراز فرمی وجود داشته باشند امکان رسانش ضعیفی وجود خواهد داشت، از این‌رو چگالی حالت‌های الکترونی نزدیک به تراز فرمی حائز اهمیت می‌باشد. از سمت دیگر ضریب تراگسیل که نرخ انتقال الکترونی میان دو اتصال را نشان می‌دهد به‌صورت مستقیمی به چگالی حالت‌های الکترونی وابسته است. چگالی حالت‌های الکترونی، میزان تجمع الکترون‌ها در حالت‌های قابل دسترس را نشان می‌دهد چنانچه دانستن حالت‌های موجود دریافت‌کننده الکترونی در الکتروود سمت راست برای جمع نمودن الکترون‌های آمده از الکتروود سمت چپ نیز ضروری است که این امر به‌واسطه تابع تراگسیل نشان داده می‌شود. شکل 4 چگالی حالت‌های الکترونی و تابع تراگسیل الکترونی

را نشان می‌دهد که امکان داشتن یک الکترومولومینسانس¹ قوی برای چنین ساختاری انتظار می‌رود که برای به‌کارگیری در نمایشگرهای تمام رنگی بسیار پرکاربرد است [36]. برای وضوح بیشتر، وجود گاف انرژی غیر مستقیم نانولوله گالیم فسفاید در نوار ساختاری این ماده در شکل 3 نشان داده شده است.

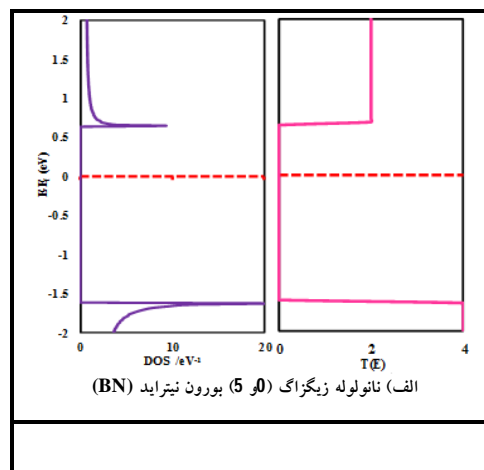


شکل 3. گاف انرژی غیر مستقیم نانولوله زیگراگ (0,5) گالیم فسفاید. نقاط توپر کمترین مقدار انرژی مربوط به نوار رسانش در بالا و بیشترین مقدار انرژی مربوط به نوار ظرفیت در پایین را نشان می‌دهند که فلش مشکی رنگ این مسیر غیر مستقیم را مشخص می‌نماید. گاف انرژی که فاصله میان بیشترین مقدار انرژی در نوار ظرفیت تا کمترین مقدار انرژی در نوار رسانش است، هرچه بیشتر باشد رسانش ناحیه پراکندگی کاهش خواهد یافت. مقادیر بهینه شده طول پیوند و قطر نانولوله کلیه ساختارها به‌همراه گاف انرژی هر یک از آنها در نقطه Γ در مقایسه با مقادیری که از مطالعات دیگران به‌دست آمده در جدول 1 نشان داده شده است. مطابق با مقادیر محاسبه شده گاف انرژی از روی ساختار نواری، کمترین گاف انرژی مربوط به نانولوله زیگراگ (5,0) گالیم آرسناید با مقدار 1/055 الکترون ولت می‌باشد و پس از آن گالیم نیتراید و گالیم فسفاید دارای مقادیر گاف انرژی کوچکتری هستند.

¹Electroluminescence



ساختارهای مورد مطالعه را برحسب تابعی از انرژی نشان می‌دهد، میزان تابع تراگسیل به مقدار ثابت نشان می‌دهد، $G_0 = \frac{2e^2}{h}$ نرمالیزه شده است. تابع تراگسیل کلیه ساختارها شبه پله‌ای است که این مشخصه به کانال‌های رسانشی ترازهای الکترونی مرتبط است. در مجاورت تراز فرمی و در بازه -1 تا 1 الکترون ولت، ساختارهای نانولوله زیگزاگ (5,0) گالیم آرسناید (GaAs)، گالیم نیتراید (GaN) و گالیم فسفاید (GaP) دارای بیشترین مقدار رسانش کوانتومی به ترتیب $4G_0$ ، $5G_0$ ، $6G_0$ می‌باشند. نتایج حاصل با نتایج گاف نواری به دست آمده در بخش قبل در توافق است. ساختارهایی با گاف انرژی کمتر دارای چگالی حالت‌های الکترونی بزرگتر و در نتیجه رسانش کوانتومی بیشتری هستند چرا که افزایش چگالی حالت‌های الکترونی در نزدیکی تراز انرژی فرمی، توانایی انتقال الکترونی در ساختار را ارتقاء می‌دهد. در مقایسه مقدار گاف نواری نزدیک به هم دو ساختار نانولوله زیگزاگ (5,0) گالیم فسفاید (GaP) و نانولوله زیگزاگ (5,0) گالیم نیتراید (GaN)، عدم تقارن خطوط پله‌ای تابع انتقال در مجاورت تراز فرمی نتیجه گاف غیر مستقیم این ساختار می‌باشد. همچنین در مورد نانولوله‌های زیگزاگ (5,0) گالیم آرسناید (GaAs) و گالیم نیتراید (GaN)، خطوط پله‌ای نسبت به گالیم فسفاید مسطح‌تر می‌باشد که نشان از انتقال الکترونی کامل‌تر است [44].

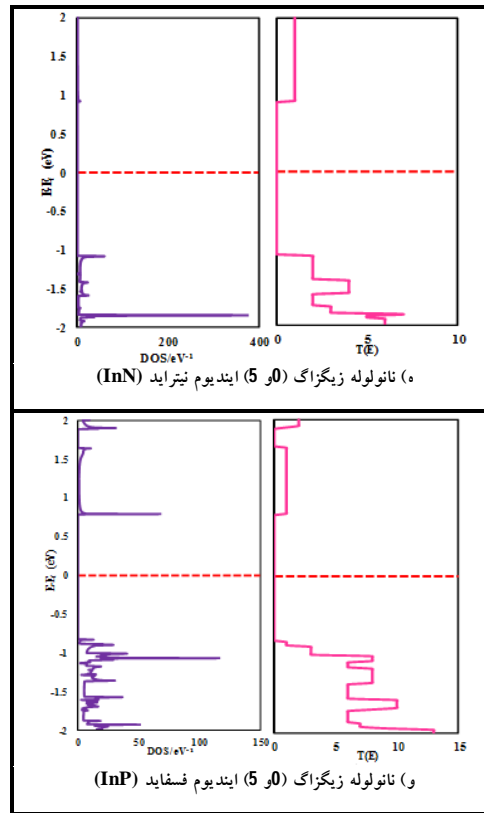


کلیه شبیه‌سازی‌ها، با رسم مشخصه جریان-ولتاژ و منحنی ترابرد در ولتاژهای متفاوت تجزیه و تحلیل شده است. شکل 5 منحنی‌های جریان و مشتق جریان-ولتاژ را برحسب ولتاژ بایاس نشان می‌دهد.

چنانچه در شکل 5 مشاهده می‌شود، برای ساختارهای نانوله‌های زیگزاگ (5,0) بورن نیتراید (BN)، گالیم نیتراید (GaN) و گالیم فسفاید (GaP) در ابتدا جریان بسیار ناچیز است و قطعه شبیه به یک عایق رفتار می‌کند اما با افزایش ولتاژ اعمالی، جریان به‌طور تقریباً

یکنواخت و خطی افزایش می‌یابد تا به بیشینه مقدار خود برسد و قطعه یک رفتار اهمی از خود نشان می‌دهد. این نمایش جریان-ولتاژی شبیه به مشخصه‌های جریان-ولتاژ دیوده‌های نیم‌رسانا است. برای ساختار نانوله‌ زیگزاگ (5,0) ایندیوم نیتراید (InN) جریان با افزایش ولتاژ، کمینه و یا بیشینه مقدار ندارد فقط شیب نمودار جریان-ولتاژ در محدوده ولتاژ 0/9 تا 1 ولت کاهش می‌یابد اما برای نانوله زیگزاگ (5,0) گالیم آرسناید (GaAs) تحت بازه ولتاژی 0/4 تا 0/7 ولت و برای ایندیوم فسفاید (InP) در بازه 0/7 تا 1 ولت، افت جریان با افزایش ولتاژ مشاهده خواهد

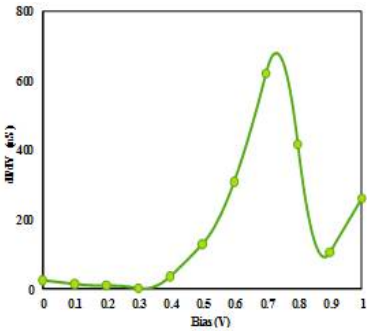
شد. چنانچه برای نانوله زیگزاگ (5,0) گالیم آرسناید (GaAs) جریان حداقلی در ولتاژ بایاس 0/6 ولت به میزان 1409/55 نانوامپر و برای ایندیوم فسفاید (InP) در ولتاژ بایاس 0/8 ولت به میزان 345/50 نانوامپر خواهد شد. چنین افت جریانی مقدمه رخدادی از اثری به نام مقاومت دیفرانسل منفی (NDR) می‌باشد. NDR یک خاصیت استثنایی در برخی قطعات الکتریکی است که در اثر افزایش ولتاژ، جریان الکتریکی کاهش می‌یابد.



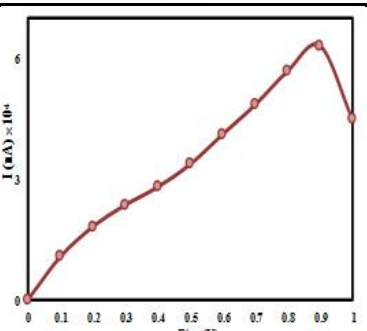
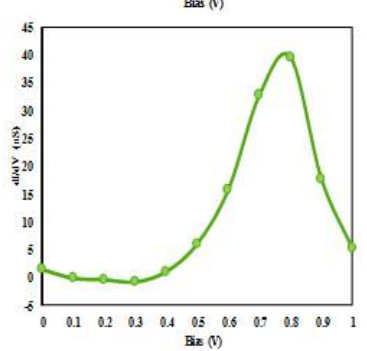
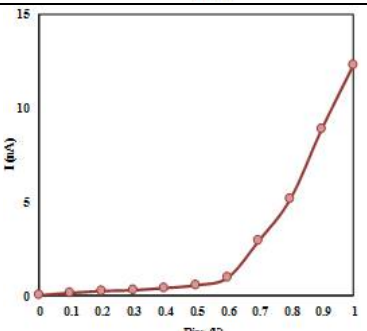
شکل 4. در سمت چپ تصویر نمایش چگالی حالت‌های الکترونی و در سمت راست تصویر نمایش ضریب تراکسیل برای نانوله‌های زیگزاگ (5,0): الف: بورن نیتراید (BN)، ب: گالیم آرسناید (GaAs)، ج: گالیم نیتراید (GaN)، د: گالیم فسفاید (GaP)، ه: ایندیوم نیتراید (InN)، و: ایندیوم فسفاید (InP). خط چین قرمز رنگ تراز انرژی فرمی را مشخص می‌کند.

ج) مشخصه جریان-ولتاژ و منحنی ترابرد (Conductance curve)

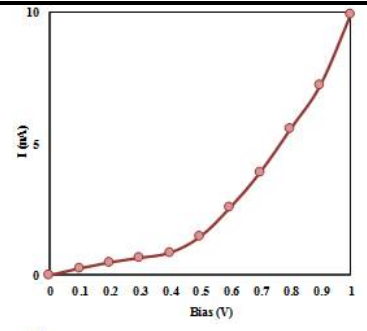
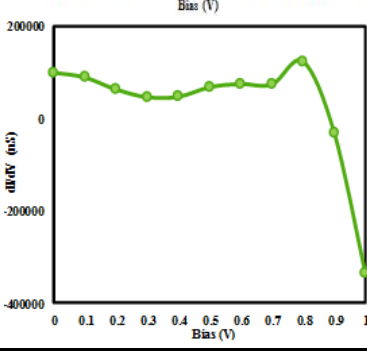
نانوله‌ها می‌توانند در قطعات اپتوالکترونیکی به‌عنوان ناحیه کانال یا ناحیه پیوندگاه مورد استفاده قرار گیرند [۱۳، ۴۵، ۴۶] از این‌رو ترابرد، یک موضوع بسیار مهم برای کاربرد نانوله‌ها در صنعت الکترونیک محسوب می‌شود. خواص ترابردی ساختارهای پیشنهادی با استفاده از کد محاسباتی TRANSIESTA بررسی شده است، که مبتنی بر ترکیب روش DFT و NEGF می‌باشد. ولتاژ بایاس میان دو الکتروود در محدوده صفر تا یک ولت (ولتاژ پائین) در نظر گرفته شده و در نهایت طیف عبور در



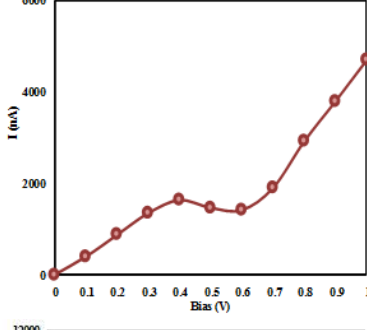
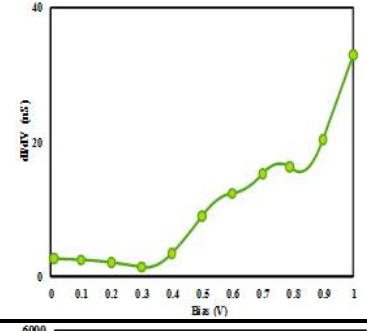
(د) نانولوله زیگراگ (0,5) گالیم فسفاید (GaP)



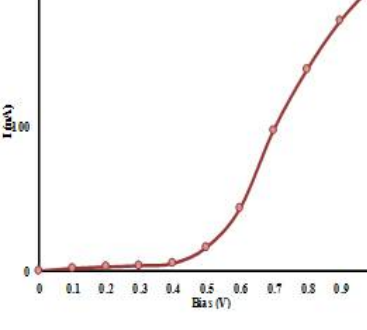
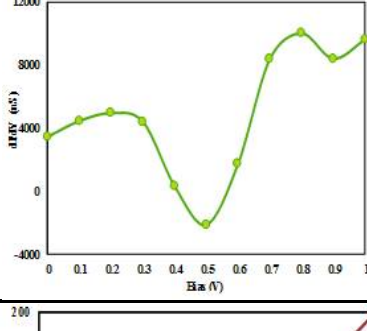
(ه) نانولوله زیگراگ (0,5) ایندیوم نیتراید (InN)



(الف) نانولوله زیگراگ (0,5) بورون نیتراید (BN)



(ب) نانولوله زیگراگ (0,5) گالیم آرسناید (GaAs)



(ج) نانولوله زیگراگ (0,5) گالیم نیتراید (GaN)

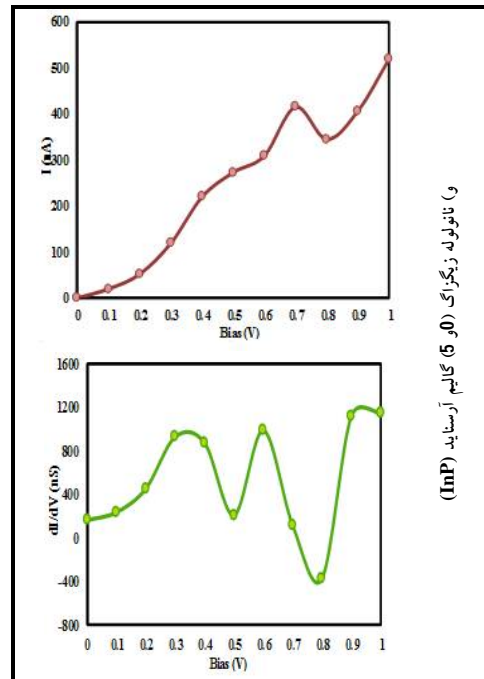
جدول 2. مقادیر جریان برای کلیه ساختارهای قطعه‌ای مورد مطالعه در شکل 1 در بازه متفاوتی از ولتاژهای اعمال شده.

جریان (nA)						ولتاژ اعمالی (V)
InP	InN	GaP	GaN	GaAs	BN	
0	0	0	0	0	0	0
19,91	10652,17	0,13	1,82	393,18	0,25	0,1
51,99	18106,62	0,22	2,89	869,87	0,48	0,2
119,26	23535,61	0,27	3,71	1344,47	0,65	0,3
220,12	27960,65	0,38	5,26	1628,44	0,85	0,4
273,42	33651,39	0,54	16,40	1459,37	1,46	0,5
309,69	41106,79	0,93	43,37	1409,05	2,57	0,6
415,85	48415,29	2,91	97,49	1895,49	3,91	0,7
345,50	56787,67	5,13	139,47	2913,95	5,55	0,8
406,94	63115,97	8,87	173,32	3786,60	7,23	0,9
520,23	44783,47	12,25	198,91	4684,77	9,90	1

جدول 3. مقادیر ترابرد برای کلیه ساختارهای قطعه‌ای مورد مطالعه در شکل 1 در بازه متفاوتی از ولتاژهای اعمال شده.

ترابرد (nS)						ولتاژ اعمالی (V)
InP	InN	GaP	GaN	GaAs	BN	
162,43	99528,15	1,45	23,37	3429,97	2,66	0
235,89	89138,0	-0,12	12,63	4433,82	2,46	0,1
453,79	62741,25	-0,38	8,94	4931,06	2,06	0,2
929,48	46400,43	-0,78	1,51	4380,42	1,37	0,3
872,09	47277,91	1,06	35,60	304,20	3,42	0,4
206,88	67961,16	6,07	128,08	-2150,3	8,96	0,5
987,62	75261,70	15,81	307,98	1715,46	12,35	0,6
115,38	73909,16	32,75	620,63	8358,81	15,26	0,7
-374,91	123905,4	39,62	415,10	9996,38	15,97	0,8
1117,0	-31001,3	17,78	104,30	8384,17	20,36	0,9
11488,9	-335648,6	5/20	259/79	9591/21	32/95	1

مطابق جدول 3 بیشینه ترابرد مربوط به نانولوله زیگزاگ (5,0) ایندیوم نیتراید (InN) با مقدار 123905/4 نانوثانیه در ولتاژ بایاس 0/8 ولت و کمینه ترابرد برای نانولوله زیگزاگ (5,0) گالیم فسفاید (GaP) با مقدار 1/06 نانوثانیه در ولتاژ بایاس 0/4 ولت می‌باشد. در حالت کلی به ترتیب نانولوله‌های زیگزاگ (5,0) ایندیوم نیتراید (InN) و گالیم آرسناید (GaAs) دارای بیشترین مقادیر ترابردی و گالیم فسفاید (GaP) و بورن نیتراید (BN) دارای کمترین مقادیر ترابردی است.



شکل 5. منحنی‌های جریان-ولتاژ و مشتق جریان-ولتاژ برحسب ولتاژ اعمالی برای نانولوله‌های زیگزاگ (5,0)، الف: بورن نیتراید (BN)، ب: گالیم آرسناید (GaAs)، ج: گالیم نیتراید (GaN)، د: گالیم فسفاید (GaP)، ه: ایندیوم نیتراید (InN)، و: ایندیوم فسفاید (InP). در مقابل از بین رفتن جریان عبوری از قطعه به واسطه یک مقاومت مثبت، مقاومت منفی متضمن یک شدت سیگنال الکتریکی (تقویت کننده) است. مقاومت دیفرانسیل منفی (NDR) یک اثر چشمگیر از ترابرد کوآنتومی در قطعات الکترونیکی است که کاربردهای کلیدی بسیاری در قطعاتی همانند نوسانگرهای فرکانس بالا، حافظه‌ها، قطعات مداری چند ترازی و سوئیچ کننده‌های سرعت بالا دارد [47]. برای بررسی و تحلیل دقیق‌تر، مقادیر جریان و ترابرد قطعات پیشنهادی برحسب ولتاژهای اعمالی در دو جدول 2 و 3 گزارش شده است.

نتیجه گیری

در مطالعه حاضر خواص ساختاری، الکترونی و تراپردی برخی از نانولوله‌های ترکیبات گروه III-V همچون نانولوله‌های زیگزاگ (۵،۰) بورن نیتراید (BN)، گالیم آرسناید (GaAs)، گالیم نیتراید (GaN)، گالیم فسفاید (GaP)، ایندیوم نیتراید (InN) و ایندیوم فسفاید (InP) با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفت. محاسبات ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی نشان می‌دهد که کلیه ساختارهای مورد بررسی دارای ماهیت نیم‌رسانایی هستند. در میان ساختارها، ساختار نانولوله زیگزاگ (۵،۰) گالیم فسفاید (GaP) دارای باند گاف غیرمستقیم می‌باشد که این ساختار را می‌تواند مناسب برای به‌کارگیری در نمایشگرهای تمام رنگی سازد و ساختار نانولوله زیگزاگ (۵،۰) گالیم آرسناید (GaAs) دارای کمترین باند گاف انرژی است که می‌تواند کاندیدای مناسبی در به‌کارگیری آشکارسازهای فوتونی باشد در حالی که دیگر ساختارها با باند گاف انرژی بزرگتر می‌توانند در ساخت دیودهای گسیلنده نوری، لیزرهای نیم‌رسانا و سوئیچ کننده‌ها به‌کار گرفته شوند. محاسبات تراپردی انجام شده روی ساختارها نشان داد که مشخصه NDR مشاهده شده در نانولوله زیگزاگ (۵،۰) گالیم آرسناید (GaAs) چنین ساختاری را مناسب برای به‌کارگیری در قطعات اپتوالکترونیکی سرعت بالا، نوسانگرهای فرکانس بالا و سوئیچ کننده‌های سرعت بالا ساخته و افزایش جریان و تراپرد کوانتومی در ساختاری مانند نانولوله زیگزاگ (۵،۰) ایندیوم نیتراید (InN) این ساختار را گزینه‌ای برای طراحی قطعات شدت بالا، پردازنده‌های سرعت بالا و قطعات حسابگر سرعت بالا معرفی می‌نماید.

تشکر و قدردانی

تحقیق فوق برگرفته از طرح پژوهشی (بررسی خواص اپتوالکترونیکی نانولوله‌های ترکیبات III-V) می‌باشد که با حمایت مالی دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره) شهرری، به اجرا در آمده است، بدینوسیله از آن واحد دانشگاهی، تقدیر و تشکر به‌عمل می‌آید.

مرجع‌ها

- [1] J.Ch. Charlier, X. Blasé, S. Roche, Electronic and transport properties of nanotube, *Reviews of Modern Physics* **79** (2007) 677. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.79.677>
- [2] J. Zhang, S.A. Meguid, On the piezoelectric potential of gallium nitride nanotubes, *Nano Energy* **12** (2015) 322-330. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2014.12.036>
- [3] Ch. Lee, Sh. Liu, L. Hurtadu, J.B. Wright, H. Xu, T. Shan Luk, J.J. Figiel, I. Berener, S.R.J. Brueck, G.T. Wang, Annular-shaped emission from gallium nitride nanotube lasers, *ACS Photonics* **2** (2015) 1025-1029. <https://doi.org/10.1021/ACSphotonics.5b00039>
- [4] L. Guo, Structural, energetic and electronic properties of hydrogenated aluminum arsenide clusters, *Journal of Nanoparticle Research* **13** (2011) 2029-2039. <https://doi.org/10.1007/S11051-010-9957-7>
- [5] M. Hopkinson, T. Martin, P. Smowton, III-V semiconductor devices integrated with silicon, *Semiconductor Science and Technology* **28** (2013) 090301. <https://doi.org/10.1088/0268-1242/28/9/090301>
- [6] J.C.F. Silva, J.D. Dos Santos, C.A. Taft, J.B.L. Martins, E. Longo, Stability of rolled-up GaAs nanotubes, *Journal of Molecular*

- nanotubes: from ultraviolet to the visible, *Scientific Reports* **3** (2013) 2698. <https://doi.org/10.1038/Srep02698>
- [15] C. Attacalite, L. Wirtz, A. Marini, A. Rubio, Efficient gate-tunable light-emitting device made of defective boron nitride nanotubes: from ultraviolet to the visible, *Scientific Reports* **3** (2013) 2698. <https://doi.org/10.1063/1.1581370>
- [16] D.M. Mitin, A.M. Mozharov, S.A. Raudik, V.V. Fedorov, V.V. Neplokh, P.M. Rajanna, V.V. Nasibulin, I.S. Mukhin, Solar cells based on GaAs and carbon nanotubes, *Journal of physics: Conference Series* **1482** (2020) 012035. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1482/1/012035>
- [17] M.S. Benbouza, D. Hocine, Y. Zid, A. Benbouza, New nanotechnology structures CNTFET GaAs, 8th international conference on renewable energy research and applications (ICRERA) (2019) 799-803. <https://doi.org/10.1109/ICRERA47325.2019.8997103>
- [18] N.V. Vostokov, V.M. Daniltsev, S.A. Kraev, E.V. Skorokhodov, S.S. Strelchenko, V.I. Shashkin, Vertical field-effect transistor with a controlling GaAs based p-n junction, *semiconductors* **53** (2019) 1279-1281. <https://doi.org/10.1134/S1063782619100245>
- [19] B. Chandrasekara, K.A. NarayanAnkuty, Gallium nitride nanotube and its application as transistors, *International journal of computer applications* **47** (2012) 39-44. <https://doi.org/10.5120/7259-0347>
- [20] H. Jiang, Y. Su, J. Zhu, H. Lu, X. Meng, Piezoelectric and pyroelectric properties of intrinsic GaN nanowires and nanotubes: size and shape effects, *Nano Energy* **45** (2018) 359-367. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2018.01.010>
- [21] V.I. Gryadun, Characteristics of GaN nanotube MOS field-effect transistors, 22th *Modeling* **23** (2017) 204. <https://doi.org/10.1007/S00894-017-3371-3>
- [7] S. Kalay, Z. Yilmaz, O. Sen, M. Emanet, E. Kazanc, M. Culha, Synthesis of boron nitride nanotubes and their applications, *Beilstein journal of nanotechnology* **6** (2015) 84-102. <https://doi.org/10.3762/bjnano.6.9>
- [8] D. Jun-Rong, Y.B. Hao, T. Chao, H. Jie, Z. Hai-Ying, A. GaAs planar Schottky varactor diode for left-handed nonlinear transmission line applications, *Chinese Physics B* **21** (2012) 067303. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/21/6/067303>
- [9] G. Ji, L. Hong-Gang, S. Yong-Bo, C. Yu-Xiong, J. Zhi, Physical modeling based on hydrodynamic simulation for the design of InGaAs/InP double heterojunction bipolar transistors, *Chinese Physics B* **21** (2012) 058501. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/21/5/058501>
- [10] Ch. Liang, Q. Yun-sheng, Z. Yi-Jun, Ch. Ben-kang, Comparative research on the transmission-mode GaAs photocathodes of exponential-doping structures, *Chinese Physics B* **21** (2012) 034214. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/21/3/034214>
- [11] G. Li-Ying, L. Yan-Fang, Ch. Wei-Dong, W. Ying-Hui, Topological structure effect on far-infrared spectra in a GaAs/InAs nanoring, *Chinese Physics B* **21** (2012) 037301. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/21/3/037301>
- [12] J.A. Del Alamo, Nanometer-scale electronics with III-V compound semiconductors, *Nature* **479** (2011) 317-323. <https://doi.org/10.1038/nature10677>
- [13] K.B. Dhungana, R. Pati, Boron nitride nanotubes for spintronic, *Sensors* **14** (2014) 17655-17685. <https://doi.org/10.3390/S140917655>
- [14] C. Attacalite, L. Wirtz, A. Marini, A. Rubio, Efficient gate-tunable light-emitting device made of defective boron nitride

- Scientific Reports* **8** (2018) 9454.
<https://doi.org/10.1038/s41598-018-27911-2>
- [29] J. Ajayan, D. Nirmal, R. Mathew, D. Kurian, P. Mohankumar, L. Arivazhagan, D. Ajitha, A critical review of design and fabrication challenges in INP HEMTs for future terahertz frequency applications, *Materials science in semiconductor* **128** (2021) 105753.
<https://doi.org/10.1016/j.mssp.2021.105753>
- [30] F. Zafar, A. Iqbal, Indium phosphide nanowires and their applications in optoelectronic devices, *Proceedings of the royal society A* **472** (2016).
<https://doi.org/10.1098/rspa.2015.0804>
- [31] G. Faroz, A. Malik, M.A. Kharadi, F.A. Kanday, K.A. Shah, Performance analysis of indium phosphide channel based sub-10 nm double gate spin field effect transistor, *Physics Letters A* **384** (2020) 126498.
<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2020.126498>
- [32] J. Klamkin, H. Zhao, B. Song, Y. Liu, B. Isaac, S. Pinna, F. Sang, L. Coldren, Indium phosphide photonic integrated circuits: *Technology and applications, 2018 IEEE BiCMOS and compound semiconductor integrated circuits and technology symposium (BCICTS)* (2018) 8-13.
<https://doi.org/10.1109/BCICTS.2018.8550947>
- [33] J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. Garcia, The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation, *Journal of Physics: Condensed Matter* **14** (2002) 2745.
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/14/11/302>
- [34] J.P. Perdew, A. Zunger, Self-interaction correction to density-functional approximation for many-electron systems, *Physics Review B* **23** (1981) 5048.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.23.5048>
- [35] N. Troullier, J.L. Martins, Efficient pseudopotentials for plan-wave calculations, *international Crimean Conference Microwave & Telecommunication Technology*, (2012) 729-730.
- [22] M. Djavid, X. Liu, Z. Mi, Improvement of the light extraction efficiency of GaN-based LEDs using rolled up nanotube arrays, *Optics Express* **22** (2014) A1680.
<https://doi.org/10.1364/OE.22.0A1680>
- [23] E. De Luca, R. Sanatinia, S. Anand, M. Swillo, Focused ion beam milling of gallium phosphide nanostructures for photonic applications, *Optical Materials Express* **6** (2016) 587-596.
<https://doi.org/10.1364/OME.6.000587>
- [24] G. Grinblat, M.P. Nielsen, P. Dichtl, Y. Li, R.F. Oulton, S.A. Maier, Ultrafast sub-30-fs all-optical switching based on gallium phosphide, *Science Advances* **5** (2019) eaaw3262.
<https://doi.org/10.1126/sciadv.aaw3262>
- [25] O. Malik, F.J.D.L. Hidalgo-Wade, C. Zuniga-Islas, J.H.A. Patino, UV-sensitive optical sensors based on ITO-gallium phosphide heterojunctions, *Physics status solidi C* **7** (2010) 1176-1179.
<https://doi.org/10.1002/pssc.200982697>
- [26] S. Askari, D. Mariotti, J. Eric Stehr, J. Benedikt, J. Kraudy, U. Helmerson, Low-loss and tunable localized mid-infrared plasmons in nanocrystals of highly degenerate InN, *Nano Letters* **92** (2018) 5681-5687.
<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b02260>
- [27] T. Itoh, A. Kobayashi, J. Ohta, H. Fujioka, High-current-density indium nitride ultrathin-film transistors on glass substrates, *Applied Physics Letters* **109** (2016) 142104.
<https://doi.org/10.1063/1.4964422>
- [28] B.A. Andreev, K.E. Kudryavtsev, A.N. Yablonskiy, P.A. Bushuykin, L.V. Krasilnikova, E.V. Skorokhodov, P.A. Yunin, A.V. Novikov, V. Yu Davydov, Z.F. Krasilnik, Towards the indium nitride laser: obtaining infrared stimulated emission from planer monocrystalline InN structures,

- [42] R. Fathi, T. Movlaroooy, Electronic and structural properties of semiconductor GaAs nanotubes, *Journal of Electronic Materials* **47** (2018) 7358-7364. <https://doi.org/10.1007/s1164-018-6675-x>
- [43] L.B. Shi, H.K. Yuan, A study on structure and electronic properties of single-wall GaN nanotubes, *Advanced materials Research* **347-353** (2012) 3489-3492. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MAR.347-353.3489>
- [44] N.T. Tien, P.T.B. Thao, V.T. Phuc, R. Ahuja, Influence of edge termination on the electronic and transport properties of sawtooth penta-graphene nanoribbons, *Journal of physics and chemistry of solids* **146** (2020) 109528. <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2020.109528>
- [45] T. Huo, H. Yin, D. Zhou, L. Sun, T. Tian, H. Wei, N. Hu, Z. Yang, Y. Zhang, Y. Su, self-powered broadband photodetector based on single-walled carbon nanotube/GaAs heterojunctions, *Acs Sustainable chemistry & engineering* **8** (2020) 15532-15539. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.0c04495>
- [46] G. Kang, H.J. Choi, F. Ren, J. Ao, H. Li, Y. Li, W. Du, K. Zhou, H. Tan, D. Huh, P. Li, M. Liang, S. Gao, Ch. Tang, X. Yi, H. Lee, Z. Liu, Fabrication of InGaN/GaN nanotube based photoanode using nano-imprint lithography and secondary sputtering process for water splitting, *Japanese journal of applied physics* **58** (2019). <https://doi.org/10.7567/1347-4065/ab293e>
- [47] W.Q. Hua, Z. Peng, L.D. sheng, Low bias negative differential resistance behavior in carbon/boron nitride nanotube heterostructures, *Chinese Physics letters* **30** (2013) 107304. <http://doi.org/10.1088/025-307X/30/10/107304>
- Physical Review B* **43** (1991) 1993. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.1993>
- [36] M. Melli, M. West, S. Hickman, S. Dhuey, D. Lin, M. Khorasaninejad, Ch. Chang, S. Jolly, H. Tae, E. Poliakov, P. St. Hilaire, S. cabrini, Ch. Peroz, M. Klug, Gallium phosphide optical metasurfaces for visible light applications, *Scientific Reports* **10** (2020) 20694. <https://doi.org/10.1038/S41598-020-77753-0>
- [37] J.F. Jia, H. Sh. Wu, H. Jiao, The structure and electronic property of BN nanotube, *Physica B: Condensed Matter* **381** (2006) 90-95. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2005.12.258>
- [38] D. Dey, D. De, First principle study of structural and electronic transport properties for electrically doped zigzag single wall GaAs nanotubes, *International Journal of Nano Dimansion* **9** (2018) 134-144.
- [39] Kh. Kavita Rao, S. Anurag, K. Rajnish, Electronic properties of GaN nanotube: Ab initio study, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* **10** (2013) 2066-2070. <https://doi.org/10.1166/jctn.2013.3169>
- [40] A. Srivastava, S.K. Jain, P.S. Khare, Ab-initio study of structural, electronic and transport properties of zigzag GaP nanotubes, *Journal of Molecular Modeling* **20** (2014) 2171. <https://doi.org/10.1007/s00894-014-2171-2>
- [41] Z. Tavangar, M. Hamadian, H. Basharnavaz, Variation of the electronic properties of zigzag boron nanotubes by Al-doping: A DFT study, *Molecular Physics* **114** (2016) 2936-2943. <https://doi.org/10.1080/00268976.2016.1210259>