



دانشکده فیزیک و مهندسی هستهای;

پایاننامه کارشناسی ارشد

# بررسی پایداری و خواص الکترونی نانولوله های دوجداره خالص و آلایش یافته نیترید آلومنیوم

نگارنده: سیده راضیه حسینی

استاد (اساتید) راهنما دکترطیبه مولاروی استاد (اساتید) مشاور

دکترسعید حسامی پیله رود

خرداد ۹۸



برای خانوادهام

سمر وقدرداني سپاس فرادان خدای را که مرایاری داد تا بیاموزم آنچه را که نمی دانم و می دانم که پاریم خواهد داد تا بیاموزانم آنچه را که آموختدام . اکنون که این پژوهش به یاری ایزد منان به سرانجام رسیده است برخود می دانم ، ازاساتید گرانقدرم اساد راهما سركار خانم دكتر طيبه مولاروى و تمجنين اساد مثاور جناب آقاى دكترسيد حسامى بيله رود به ماس حايت في راهناني في وزحات بی شانبدشان در طی انجام این پایان نامه، سپاس کذاری نایم. از کلیه اساتید کروه فیزیک حالت جامد دانشگاه صنعتی شاهرود که افغار شاکر دی در محضرشان را داشته ام و دارم، از آقلیان یروفور عثقی، دکتر انصاری راد، دکتر قاضی ، دکتر رحانی و دکتر ایزدی فرد، تفدیر و تشکر فراوان را دارم . و در پایان، از خاله مهربانم و بمه عزیزانی که به نحوی در انجام و پیشرفت این تحقیق نقش بسزایی داشته و ذکر مام آن در ایجا مقدور نبوده ، کال

مشمر وقدردانی را دارم.

سیده راضیه حسینی (خرداد ۹۸)

### تعهد نامه

اینجانب سیده راضیه حسینی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک حالت جامد دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایاننامه بررسی پایداری و خواص الکترونی نانولوله های دوجداره خالص و آلایش یافته نیترید آلومنیوم تحت راهنمائی دکتر طیبه مولاروی متعهد می شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است .
  - در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است .
- مطالب مندرج در پایاننامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ
  جا ارائه نشده است .
  - کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه
    صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید .
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایح اصلی پایاننامه تأثیر گذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایاننامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایاننامه ، در مواردی که از موجود زنده ( یا بافتهای آنها ) استفاده شده است ضوابط
  و اصول اخلاقی رعایت شده است .
  - در کلیه مراحل انجام این پایاننامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است .

#### تاريخ

امضای دانشجو

#### مالکیت نتایج و حق نشر

کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج ، کتاب ، برنامه های رایانه ای ، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است ) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود میباشد . این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود .

استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایاننامه بدون ذکر مرجع مجاز نمیباشد.

نانولولههای نیترید آلومینیوم AlN بهدلیل دارا بودن ویژگیهای خاص، نظیر مقاومت گرمایی و دماي نقطه ذوب بالا، هدايت حرارتي قابل توجه، ضريب انبساط حرارتي پايين مورد توجه قرار گرفته است[۱]. در این پژوهش خواص ساختاری، الکترونی و پایداری نانولولههای دوجداره AIN خالص و آلایشیافته و کپسوله شده با اتم Ga، با استفاده از نظریه تابعی چگالی با در نظر گرفتن نیروهای واندروالس (VDW-DFT) توسط كد محاسباتي SIESTA بررسي شده است. محاسبات روى نانولوله-های دوجداره خالص دستهصندلی (۵،۵)(n.n) با (۵–۱۸) و (n.n)(n.n) و n=(-14) و زیگزاگ (۱٬۰) $\hat{a}(n.)$  با (۱۲–۱۹) و (۵٬۰) $\hat{a}(n.)$  با (۱۹–۱۱) صورت گرفته است. نتایج (۱۸ $\hat{a}(n.)$ حاصل از مطالعه پایداری نانولولههای دوجداره خالص نشان میدهد نانولولههای دوجداره AIN خالص دسته صندلی با اختلاف کایرالیته ۲، ((n,n) ( $(n+\gamma,n+\gamma)$ ) و فاصله درون جداری ۶ Å و نانولوله های زیگزاگ با اختلاف کایرالیته ۱۲، (۰، n+۱۲)@(n+۱۲) و فاصله درونجداری ۴/۰۶ Å از لحاظ پایداری مناسبترین ساختارها هستند. محاسبات ساختار نواری نشان میدهد، تمام نانولولههای خالص دسته-صندلی نیم رسانا با گاف نواری غیر مستقیم و تمام نانولولههای خالص زیگزاگ نیم رسانا با گاف نواری مستقيم ميباشند. گاف نواري نانولولههاي تکجداره AIN ، با افزايش قطر نانولولهها روندي افزايشي دارد و در قطرهای بالاتر، روند تغییرات کندتر می شود. همچنین گاف نواری نانولولههای دوجداره AIN کمتر از گاف نواری تک تک نانولولههای تکجداره تشکیل دهنده آن میباشد. نانولولههای دوجداره زیگزاگ و دسته صندلی AIN با اتم Ga آلایش شدند. نتایج حاصل از آلایش بیانگر کاهش گاف نواری نانولوله ها نسبت به حالت خالص میباشد. با کپسوله کردن نانولولهها مشاهده شد که پایداری نانولوله افزايش مي يابد. نتايج حاصل از اين تحقيق مي تواند جهت مطالعات تجربي آينده مفيد واقع شوند.

چکیدہ

**کلمات کلیدی**: نانو لولههای دوجداره AlN، نظریه تابعی چگالی (DFT) کد SIESTA، خواص الکترونی، پایداری، انرژی تشکیل.

### ليست مقالات مستخرج:

حسینی، سیده راضیه: مولاروی، طیبه: حسامی پیله رود، سعید: (۱۳۹۸) " مطالعه پایـداری نانولولـه-

های دوجداره دستهصندلی آلومینیوم نیترید (m, m)@(m, m) با روش vdW-DFT

# فهرست مطالب

فصل ۱: مقدمه ای بر نیترید آلومنیوم و مروری بر کارهای انجام شده
۱–۱ مقدمه
۲-۱ ساختارهای نیترید آلومینیوم
۱–۳ نانوساختارهای نیترید آلومینیوم۳
۴-۱ نانولوله های نیترید آلومینیوم۴ نانولوله های نیترید آلومینیوم
۱-۵ مروری بر کارهای انجام شده در زمینه نانولوله های AlN
فصل ۲:انواع ساختارهای نانو و نانولوله ها
۱۸۱۸ مقدمه ۱۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰
۲-۲ تاریخچه فناوری نانو در جهان
۲-۳ چرا مقیاس نانو اهمیت دارد
۲۰-۳-۲ تغییر رنگ
۲–۳–۲ تغییر شفافیت
۲-۳-۳ تغییر خواص مغناطیسی
۲-۳-۴ تغییر واکنشپذیری
۲–۴ دستهبندی نانو مواد۲۳۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰
۲۶

۳۲-۱ مقدمه۳۲
۳۲-۳ سیستمهای بس ذرهای
٣-٣ تقريب الكترون مستقل
۳-۴ قضایای هوهنبرگ-کوهن۳۸
۳۹-۵ تقریب کوهن-شم
۳-۶ روش حل خودسازگار معادلات کوهن-شم۴۴
۳–۷ شبه پتانسیل
۴۹SIESTA کد ۸-۳
فصل ۴: نتایج بررسی پایداری و خواص الکترونی نانولوله های دوجداره نیترید آلومینیوم
فصل ۴: نتایج بررسی پایداری و خواص الکترونی نانولوله های دوجداره نیترید آلومینیوم ۴–۱ مقدمه
فصل ۴: نتایج بررسی پایداری و خواص الکترونی نانولوله های دوجداره نیترید آلومینیوم ۲-۴ مقدمه ۲-۴ بهینه سازی و تعیین پارامترهای مطلوب
فصل ۴: نتایج بررسی پایداری و خواص الکترونی نانولوله های دوجداره نیترید آلومینیوم ۹–۱ مقدمه ۵۲۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰
فصل ۴: نتایج بررسی پایداری و خواص الکترونی نانولوله های دوجداره نیترید آلومینیوم ۹–۱ مقدمه۵۲ ۵۲–۲ بهینه سازی و تعیین پارامترهای مطلوب۵۲ ۵۳–۲–۲ بهینه سازی انرژی قطع۵۶ ۵۶–۲–۲ بهینه سازی و تعیین نقاط K در فضای وارون۵۶
فصل ۴: نتایج بررسی پایداری و خواص الکترونی نانولوله های دوجداره نیترید آلومینیوم ۹-۱ مقدمه۵۲ ۵۲-۲-۴ بهینه سازی و تعیین پارامترهای مطلوب۵۲ ۵۳-۲-۲ بهینه سازی انرژی قطع۵۲ ۵۶-۲-۲ بهینه سازی و تعیین نقاط K در فضای وارون۵۶ ۵۸
فصل ۴: نتایج بررسی پایداری و خواص الکترونی نانولوله های دوجداره نیترید آلومینیوم ۴–۱ مقدمه ۲–۲ بهینه سازی و تعیین پارامترهای مطلوب ۴–۲–۱ بهینه سازی انرژی قطع ۴–۲–۲ بهینه سازی و تعیین نقاط K در فضای وارون ۴–۲–۳ مجموعه پایه ها ۸۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰
فصل ۴: نتایج بررسی پایداری و خواص الکترونی نانولوله های دوجداره نیترید آلومینیوم ۴–۱ مقدمه۵۲ ۵۳–۲۰ بهینه سازی و تعیین پارامترهای مطلوب۵۲ ۴–۲–۱ بهینه سازی انرژی قطع۵۲ ۵۶–۲–۲ بهینه سازی و تعیین نقاط K در فضای وارون۵۹ ۵۸–۲–۳ مجموعه پایه ها۵۹ ۵۹–۲–۴ بهینهسازی ساختار و ثابت شبکه۵۹ (دسته صندلی و زیگزاگ)
فصل ۴: نتایج بررسی پایداری و خواص الکترونی نانولوله های دوجداره نیترید آلومینیوم ۴–۱ مقدمه ۴–۲ بهینه سازی و تعیین پارامترهای مطلوب ۴–۲-۱ بهینه سازی انرژی قطع ۴–۲–۲ بهینه سازی و تعیین نقاط K در فضای وارون ۴–۲–۳ مجموعه پایه ها ۴–۲–۲ مجموعه پایه ها ۴–۲–۲ بهینهسازی ساختار و ثابت شبکه ۴–۳–۲ بررسی پایداری نانولوله های دوجداره خالص AIN (دسته صندلی و زیگزاگ)

۴-۴ خواص الکترونی نانولوله های دوجداره زیگزاگ و دسته صندلی خالص نیترید آلومینیوم
۴-۴-۱ بررسی ساختار نواری
۴-۴-۲ محاسبه چگالی حالتهای کلی (DOS) و جزیی (PDOS)۸۱
۴-۵ بررسی خواص ساختاری و الکترونی نانولوله های AIN آلایش یافته با اتم GaGa
۴–۵–۱ پارامترهای ساختاری نانولوله های دوجداره دسته صندلی AlN آلایش یافته با اتم Ga
۴–۵–۲ پارامترهای ساختاری نانولوله های دوجداره زیگزاگ AIN آلایش یافته با اتم Ga
۴–۵–۳ بررسی خواص الکترونی نانولوله های دوجداره دسته صندلی AlN آلایش یافته با اتم Ga
۴–۵–۳–۱ ساختار نواری نانولوله های دوجداره دسته صندلی AIN آلایش یافته۹۹
۴-۵-۴ بررسی چگالی حالتهای نانولوله های دوجداره دسته صندلی AlN آلایش یافته با اتم GaGa
۴–۵–۵ بررسی خواص الکترونی نانولوله های دوجداره زیگزاگ AlN آلایش یافته با اتم Ga
۴–۵–۵–۱ ساختار نواری نانولوله های دوجداره زیگزاگ AlN آلایش یافته
۴–۵–۵–۲ بررسی چگالی حالتهای نانولوله های دوجداره زیگزاگ AIN آلایش یافته با اتم Ga
۴-۶ بررسی خواص ساختاری و الکترونی نانولوله های دوجداره AIN کپسوله شده با اتم Ga
۴–۶–۱ بررسی پایداری و خواص ساختاری نانولوله های دوجداره AIN کپسوله شده با اتم GaGa
۴-۶-۴ بررسی خواص الکترونی نانولوله های دوجداره AIN کپسوله شده با اتم Ga Ga
نتیجه گیری
منابع

## فهرست جداول

جدول ۱-۱: مقادیر ویژه HOMO و LUMO و شکاف بین آنها برای چهار ساختار مورد بررسی۱۱۰۰۰
جدول ۴-۱ انرژی کل بر حسب انرژی قطع برای نانو لوله خالص تک جـداره دسـته صـندلی (۳،۳) و
زیگزاگ( ۶،۰)
جـدول ۴-۲: انـرژی کـل بـر حسـب انـرژی قطـع بـرای نانولولـه خـالص دوجـداره دسـته صـندلی
۵۵۵)@(۹،۹) و زیگزاگ (۵،۰)@(۱۲،۰) د (۵،۰)@(۹،۹)
جدول ۴-۳: انرژی کل بر حسب تعداد نقاط K برای نانولوله خالص تکجـداره دسـته صـندلی (۳،۳) و
زیگزاگ ( ۶،۰)
جدول ۴-۴ : انرژی کل بر حسب تعداد نقـاط K بـرای نانولولـه خـالص ودوجـداره دسـته صـندلی
۵۸۵۸)@(۹،۹) و زیگزاگ (۵،۰)@(۱۲،۰) (۵،۰)
جدول ۴-۵: پارامترهای ورودی محاسبات ساختاری و الکترونی برای نانولوله های دوجداره AIN ۶۰
جدول ۴-۶ :پارامتر ثابت شبکه در راستای محوری C (طـول نانولولـه) میـانگین قطـر لولـه داخلـی و
خارجی ، تعداد اتمهای نانولوله های خالص دوجداره دسته صندلی و زیگزاگ۶۱
جدول۴-۷ : تعداد اتمها، فواصل درون جداری، انرژی پیوندی و تشکیل نانولوله های دوجداره دسته
صندلی و زیگزاگ خالص۶۳
جدول ۴-۸ : فواصل درون جداری انرژی پیونـدی و انـرژی تشـکیل نانولولـه هـای دوجـداره خـالص
زیگزاگ AIN
جدول ۴-۹: گاف نواری، موقعیت تراز فرمی و قطر نانولوله های تک جداره دسته صندلی AIN
جدول ۴-۱۰: گاف نواری، موقعیت تراز فرمی و قطر نانولوله های تک جداره زیگزاگ AIN
جدول ۴–۱۱: گاف نواری نانولوله های دوجداره خالص دسته صندلی AIN و موقعیت تراز فرمـی آنهـا
ΥΥ
جدول۴–۱۲: گاف نواری نانولوله های دوجداره خالص زیگزاگ AIN و موقعیت تراز فرمی آنها۷۸

جدول۴–۱۳: پارامترهای ساختاری بهینه شده نانولوله های دوجداره دسته صندلی آلایش یافتـه AIN
۹۲
جدول۴-۱۴: انرژی کل و انرژی تشکیل نانولوله های دوجداره دسته صندلی AIN آلایش یافته۹۳
جدول۴–۱۵: پارامترهای ساختاری بهینه شده نانولوله های دوجداره زیگزاگ آلایش یافته ۹۶ AlN
جدول۴-۱۶ : انرژی کل و انرژی تشکیل نانولوله های دوجداره زیگزاگ AIN آلایش یافته۹۸
جدول۴–۱۷ : گاف نواری و موقعیت تراز فرمی نانولوله های دوجداره دسته صندلی آلایش یافته AIN
1 • 1
جدول۴–۱۸: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی نانولوله های دوجداره زیگزاگ آلایش یافته ۱۰۵AlN
جدول ۴–۱۹: فاصله درون جداری و ثابت شبکه نانولوله های دوجداره دسته صندلی و زیگزاگ قبل و
بعد از کپسوله شده با اتم Ga ۲۰۹
جدول ۴-۲۰: انرژی تشکیل نانولوله های دوجداره دسته صندلی و زیگزاگ قبل و بعد از کپسوله شده
با اتم Ga Ga
جدول ۴–۲۱: موقعیت تراز فرمی و مقدار گاف نواری برای نانولوله های خالص و کپسـوله شـده AlN
117

## فهرست اشكال

شکل ۱-۱: نمای سلول واحد HCP نیترید آلومینیوم، استقرار اتمها در فضای چهار وجهی، طول
پیوندها و زاویه بین پیوندهای بین اتمی Al-N
شکل۱-۲: تصاویر SEM نانوساختارهای نیترید آلومینیوم در بزرگنمایی های پایین و بـالا، الـف و ب)
نانومخروط ها پ وت)نانومیله ها، ث وج)نانودهانه آتشفشانی۴
شكل۱-۳: تصاوير SEM نانوساختارهای نيتريد آلومينيوم، الف تا ت) گـل گونـه، ث)نـانوفيلم، ج)نـانو
توپ۵
شکل ۱-۴: تصاویر SEM نانوسیم نیترید آلومینیوم، الف) دید عمود از بالا، ب)دید مایل۵
شـكل ۱–۵: الف)تصـوير SCM نانوسـوزن نيتريـد آلومينيـوم[۱۰]. ب)تصـوير TEM نانولولـه نيتريـد
آلومينيوم۶
شکل ۱-۶:نانو سـاختارهای مـورد بررسـی ۱)نانوسـیم المـاس ۲)نانوسـیم AlN ۳)نـانو لولـه کربنـی
۴)نانولوله AIN۴
شکل ۱–۷:متغیرهای هندسی برای اتمهای نماینده در شکل ۱–۶ برای چهار ساختار. (طول پیونـد بـه
آنگستروم و زاویه به درجه)۹
شکل ۱-۸: ساختار نواری و چگالی حالتها a) نانولوله (۵،۵) b) نانولوله (۹،۰)
شکل ۱-۹:ساختار تعادلی a) نانولوله (۵،۵) b AlN (۵،۵) یانولوله (۹۰۰)AlN وc) نانولوله (۵،۵) AlN پس
از قرارگیری در دمای ۱۰۰۰K
شکل ۱-۱۰: تغییرات گاف نواری بر حسب قطـر نانولولـه a) نانولولـه دستهصـندلی b AlN) نانولولـه
زیگزاگAlN
شکل۱–۱۱ : انرژی کششی بر حسب قطر نانولوله برای تولید نانو صفحه به نانولوله بـرای سـاختارهای
مختلف AlN, BN,GaN, C مختلف
شکل۱-۱۲ : تاثیر میدانهای الکتریکی خـارجی در جهـت عمـود بـر محـور نانولولـه الـف) (۵،۰)، ب)
(۱۳،۰). مقادیر میدان الکتریکی برابر با ۰/۱ برای a و b ۹/۳، برای e وb و v/۵ برای c وf
شکل ۲-۱: ریچارد فاینمن، پدر علم نانو

شکل۲-۲: انواع نانوساختارها بر حسب تعداد ابعاد آزاد: به ترتیب از چپ به راست: صفر بعـدی، یـک
بعدی، دو بعدی، سه بعدی
شکل۲-۳: نمایی از نانو لولههای تک جداره و چند جداره۲۷
شکل۲-۴: تصویر طرحواره از انواع بردارهای تولید کننده انواع نانو لوله۲۸
شکل۲-۵: انواع نانو لوله بر اساس جهت لوله شدن صفحه پایه، الف) کایرال ب)زیگزاگ ج)دسته صندل
شکل ۳-۱: طرح واره تفاوت تقریبهای هارتری، هارتری-فوک و نظریه تابعی چگالی۳۷
شکل ۳-۲: طرحواره سامانه کمکی کوهن-شم و سامانه اصلی سیستم بس ذرهای
شکل ۳-۳: الگوریتم خودسازگار برای حل معادلات کوهن-شم
شکل ۴-۱: نمودار انرژی کل بر حسب انرژی قطع (الف) نانولوله دسته صندلی (۳،۳) و (ب) نانولولـه زیگزاگ (۶،۰)
شـکل ۴-۲: نمـودار انـرژی کـل بـر حسـب انـرژی قطـع (الـف) نانولولـه دوجـداره دسـته صـندلی (۹،۹)@(۵،۵) و (ب) نانولوله دوجداره زیگزاگ (۱۲،۰)@(۱۲۰۰).
شـکل ۴-۴ : نمـودار انـرژی کـل بـر حسـب تعـداد نقـاط k الـف: نانولولـه دوجـداره دسـته صـندلی
۵۸ ۵۸)@(۹،۹) ب: نانولوله دوجداره زیگزاگ (۱۲،۰)@(۱۲،۰)
شکل ۴-۵: ساختار پایدار و فروپاشیده نانولوله های دوجداره دسته صندلی AIN
شکل۴-۶: تغییرات انرژی تشکیل بر حسب کایرالیته نانولوله خارجی، نانولولـه هـای پایـدار دوجـداره
دسته صندلی (n,n)@(۵،۵) و (۶،۶)@(۹,n)
شکل ۴-۷: تغییرات انرژی پیوندی بر حسب کایرالیته نانولوله خارجی، نانولوله های پایـدار دوجـداره
دسته صندلی AlN ۶۵
شکل ۴-۸: ساختارهای پایدار و فروپاشیده نانولوله های دوجداره زیگزاگ AIN
شکل ۴–۹: تغییرات انرژی تشکیل بر حسب کایرالیته نانولوله خارجی، نانولوله هـای پایـدار دوجـداره زیگزاگ (۵،۰)@(۵،۰) و (۵،۰)@(۱،۰) AIN
شکل ۴-۱۰: تغییرات انرژی پیوندی بر حسب کایرالیته نانولوله خارجی، نانولوله های پایدار دوجـداره
زیگزاگ( ۵،۰ )@( ۵،۰ ) و ( ۵،۰ )@( ۸۰۰ ) AlN ( ۶،۰ )

شکل ۴–۱۱: ساختار نواری نانولوله های خالص تکجداره دسته صندلی۷۱
شکل۴–۱۲ : ساختار نواری نانولوله های خالص تکجداره زیگزاگ AIN
شکل.۴–۱۴: ساختار نواری نانولوله های AlNدوجداره دسته صندلی خالص(n,n)@(۵،۵) ۷۵
شکل۴–۱۵: ساختار نواری نانولوله های AlN دوجداره دسته صندلی خالص(n,n)@(۶،۶)۷۵
شکل ۴–۱۶: ساختار نواری نانولوله های دوجداره زیگزاگ (۱٬۰)@(۵٬۰)
شکل۴–۱۷: ساختار نواری نانولوله های دوجداره زیگزاگ (۱٬۰)@(۴٬۰)
شکل۴–۱۸ : تغییرات گاف نواری نانولوله های دوجداره بـر حسـب کایرالیتـه نانولولـه خـارجی بـرای نانداداه های نبگناگ بـد. ته م ندا
فلولوله های ریکرات و ناسته صندی . شکل۴–۱۹: تغییرات ساختار نواری نانولوله ها از تکجداره به دوجداره بـرای نانولولـه هـای زیگـزاگ و
دسته صندلی AlN
شکل ۴-۲۰ :چگالی حالتهای کلی(DOS) نانولوله های تکجداره و دوجداره دسته صندلی خالص AIN
۸۲
شکل ۴-۲۱ :چگالی حالتهای کلی(DOS) نانولوله های تکجداره و دوجداره دسته صندلی خالص AIN
۸۳
شکل ۴-۲۲ :چگالی حالتهای کلی(DOS) نانولوله های تکجداره و دوجداره زیگزاگ خالص A۱۳۹۱۲
شکل ۴-۲۳ :چگالی حالتهای کلی(DOS) نانولولههای تکجداره و دوجداره زیگزاگ خالص AIN ۸۵
شکل۴-۲۴: سهم چگالی حالتهای اتمهای Al وN در نوار انرژی بـرای نانولولـه هـای دوجـداره دسـته
صندلی خالص AlN Alv
شکل۴–۲۵: سهم چگالی حالتهای اتمهای Al وN در نوار انرژی برای نانولوله هـای دوجـداره زیگـزاگ
خالص AlN
شکل۴–۲۶: چگالی حالتهای جزئی اتمهای Al و N در نانولوله های خالص دسته صندلی۸۸
شکل۴–۲۷: چگالی حالتهای جزئی اتمهای Al و N در نانولوله های خالص زیگزاگ۸۸
شکل۴–۲۸: ساختارهای دوجداره دسته صندلی (n،n)@(۵،۵) بهینه شده آلایش یافته بـا اتـم Ga در
لوله داخلي و خارجي ۹۰

شکل۴–۲۹: ساختارهای دوجداره دسته صندلی (n،n)@(۶٬۶) بهینه شده آلایش یافته بـا اتـم Ga در
لوله داخلي و خارجي۹۱
شکل ۴-۳۰: تغییرات انرژی تشکیل برحسب کایرالیته برای حالت آلایـش داخلـی و خـارجی نانولولـه
های دوجداره دسته صندلی(n,n)(۶،۶) AlN مای دوجداره دسته صندلی(n,n)
شکل۴–۳۱: ساختارهای دوجداره زیگزاگ (۵،۰ )@(۵،۰) بهینه شده آلایش یافته بـا اتـم Ga در لولـه
داخلی و خارجی۹۵
شکل۴–۳۲: ساختارهای دوجداره زیگزاگ ( n،۰ )@( ۴،۰) بهینه شده آلایش یافته بـا اتـم Ga در لولـه
داخلی و خارج ۹۶
شکل ۴-۳۳: تغییرات انرژی تشکیل برحسب کایرالیته برای حالت آلایـش داخلـی و خـارجی نانولولـه
های دوجداره زیگزاگ ( ۸،۰ )@(n،۰) AlN (۶،۰) های دوجداره زیگزاگ ( ۸۰۰
شکل ۴-۳۴: ساختار نواری نانولوله های دوجداره دسته صندلی (n،n)@(۵،۵) خالص و آلایش یافتـه
با اتم Ga
شکل ۴–۳۵: ساختار نواری نانولوله های دوجداره دسته صندلی (n،n)@(۶،۶) خالص و آلایـش یافتـه
با اتم Ga
شکل۴–۳۶: نمودار چگالی حالت ها در نانولوله دوجداره دسته صـندلی(۱۳٬۱۳)@(AlN (۶،۶) آلایـش
یافته
شــکل۴–۳۷: نمــودار چگــالی حالتهــای جزئــی اتمهــای Ga,N,AI در نانولولــه دوجــداره دســته
صندلی(۱۳،۱۳)@(AlN (۶،۶) آلایش یافته الف) آلایش داخلی ب) آلایش خارجی ۱۰۳
شکل۴–۳۸: ساختار نواری نانولوله های دوجداره زیگزاگ (۰،۰)@(۵،۰) خالص و آلایش یافته بـا اتـم
۱۰۴Ga
شکل۴–۳۹: ساختار نواری نانولوله های دوجداره زیگزاگ (۰،۰)@(۶،۰) خالص و آلایش یافته بـا اتـم
۱۰۵ Ga
شـــکل ۴-۴۱: نمـــودار چگـــالی حالتهـــای جزئـــی اتمهـــای Ga,N,Al در نانولولـــه دوجـــداره
زیگزاگ( ۱۸،۰)@( ۶،۰) AlN آلایش یافته الف) آلایش داخلی ب) آلایش خارجی ۱۰۷
شکل ۴-۴۲: طرحواره نانولوله های دوجداره دسته صندلی وزیگزاگ AIN کپسوله شده با اتم ۱۰۸ Ga

شکل ۴-۴۲: ساختار نواری نانولوله دسته صندلی و زیگزاگ AIN قبل و بعد از کپسوله شدن ۱۱۱
شـکل۴-۴۴: نمـودار چگـالی حالتهـا در نانولولـه دوجـداره زیگـزاگ (۱۶،۰)@(۶۰۰) و دسـته
صندلی(۱۱،۱۱)@AlN(۶،۶) کپسوله شده
شـــکل ۴–۴۵: نمــودار چگــالی حالتهــای جزئــی اتمهــای Ga,N,Al در نانولولــه دوجــداره
زیگزاگ( ۱۶،۰)@(۶،۰) و دسته صندلی (۱۱،۱۱)@AlN(۶،۶) کپسوله شده

فس ۱

مقدمهای برینترید آلومنوم و مروری بر کارای انجام شده

۱–۱ مقدمه

نیترید آلومینیوم یک ترکیب دوتایی شناخته شده گروه III و گروه V جدول تناوبی با فرمول AIN میباشد. در سالهای اخیر نیتریدهای گروه III توجه زیادی را به خود جلب کرده اند، زیرا نیتریدها یک زیر گروه خاص از ترکیبات V-III هستند که با پایداری دمای بالا، طول پیوند بسیار کوتاه، تراکم پذیری پایین، هدایت گرمایی بالا به دست می آیند. با خواص فوق العاده ای مانند گاف نواری پهن و استحکام نواری قوی، می توان آنها را برای دستگاه های انتشاراتی بنفش، ابی و ترانزیستورهای با درجه حرارت بالا استفاده کرد. AIN به عنوان یک ماده نیمرسانا با گاف نواری بزرگ دارای خواص برتر است و بدین ترتیب بهترین ماده برای ساخت قطعه در منطقه فرا بنفش است و همچنین در دیسکهای نوری، ماسکهای لیتوگرافی نیز کاربرد دارد[۱]. نیترید آلومینیوم در سال ۱۸۶۲ میلادی توسط بریگر و گوتر کشف گردید و اولین روش ساخت آن در سال ۱۸۷۷ توسط مالتز به واقعیت پیوست[۲].

۱–۲ ساختارهای نیترید آلومینیوم

نیترید آلومینیوم در دو ساختار بلوری مختلف متبلور میشود که عبارتند از : الف) ساختار بلوری شش گوشی فشرده (HCP) از نوع ورتزیت<sup>۱</sup> که ساختار بلوری معمول نیترید آلومینیوم در فشار یک اتمسفر است، ب) ساختار بلوری مکعبی با سطوح مرکزدار (FCC) از نوع سنگ نمک (کلیرید سدیوم)[۳]. بنابراین در نیترید آلومینیوم معمولی، ساختار بلوری مکعبی فقط تحت فشارهای بالا میتواند وجود داشته باشد. پیوند اتمی بین نیتروژن و آلومینیوم در هر دو نوع ساختار بلوری از نوع پیوند کوالانسی میباشد[۴]. در ساختار بلوری ورتزیت، آنیونها (در اینجا اتمهای نیتروژن) در مکان-های اتمی ساختار PCP قرار داشته و نیمی از مراکز فضاهای چهار وجهیهای موجود در شبکه ورتزیت توسط کاتیونها (در اینجا اتمهای آلومینیوم) اشغال شده است. در شکل ۱–۱ نمای شبکه ورتزیت نیترید آلومینیوم، فضای چهار وجهی و محل استقرار اتم آلومینیوم در آن، فاصلههای پیوندهای بین

<sup>&#</sup>x27; Wurtzite

کریستالی [۲۰۰۱] جمع شده است. پارامترهای c و a شبکه HCP نیتریدآلومینیوم به ترتیب برابر nm کریستالی (۲۰۰۱] جمع شده است. پارامترهای c و a=۰/۳۱۱۲۷n و c=۰/۴۹۸۱۶ و ae-۱/۳۱۱۲۷n یعنی ae-۱/۳۱۲ کمتر میباشد[۴]. همان گونه که ذکر شد نیترید آلومینیوم سلول واحد HCP ورتزیت یعنی ۱/۶۳۳ کمتر میباشد[۴]. همان گونه که ذکر شد نیترید آلومینیوم تحت فشارهای بسیار بالا میتواند در سیستم بلوری FCC از نوع کلرید سدیوم متبلور شود. اما در نانوساختارهای نیترید آلومینیوم، تبلوری FCC از نوع کلرید سدیوم متبلور شود. اما در میدوم تحت فشارهای بسیار بالا میتواند در سیستم بلوری FCC از نوع کلرید سدیوم متبلور شود. اما در سدیوم تحت شرایط متعارفی (دمای اتاق و فشار یک اتمسفر) نیز مشاهده شده است. برخی محققین علاوه بر شبکه HCP، وجود ساختار بلوری FCC از نوع کلرید سدیوم را در شرایط متعارفی برای نانوساختارهایی مانند: نانولولهها[۵]، نانوذرات[۷–۵]، نانوسیمها[۷] و نانوفیلمها [ ۸،۸]گزارش کردهاند.



شکل ۱–۱: نمای سلول واحد HCP نیترید آلومینیوم، استقرار اتمها در فضای چهار وجهی، طول پیوندها و زاویه بین پیوندهای بین اتمی Al-N [۴].

#### ۱–۳ نانوساختارهای نیترید آلومینیوم

گزارشهای منتشر شده در منابع علمی حاکی از تولید نانوساختارهای مختلف AIN توسط محققین با استفاده از روش های متنوع ساخت و کنترل شرایط تولید است. نانوساختارهایی که تا کنون معرفی شدهاند عبارتند از: نانوذرهها، نانوسیمها، نانوتسمهها، نانوفیلمها، نانولولهها، نانوبرسها، نانوساختارهای خارپشت گونه و گل گونه، نانومیلهها، آرایههای نانوسوزنی، نانومخروطها، نانولولهها و

<sup>&</sup>lt;sup>\</sup>Zinc blend

نانودهانههای آتش فشانی. در شکل ۱-۲ تصاویر SEM سه نوع از نانوساختار AIN شامل نانومخروط-ها، نانومیلهها و نانودهانه آتش فشانی در دو بزرگنمایی کم و زیاد ارائه شده است. این نانوساختارها با کنترل دمای نیتریداسیون مستقیم ذرات آلومینیوم و نسبت گازهای دمش حامل آمونیاک و نیتروژن تهیه شدهاند.



شکل۱-۲: تصاویر SEM نانوساختارهای نیترید آلومینیوم در بزرگنماییهای پایین و بالا، الف و ب) نانومخروطها پ وت)نانومیلهها، ث وج)نانودهانه آتشفشانی[۴].

در شکل ۱–۳ تا ۱–۵ تصاویر SEM و TEM نانوساختارهای نیترید آلومینیوم آورده شده است.



شكل۱-۳: تصاوير SEM نانوساختارهاى نيتريد آلومينيوم، الف تا ت) گل گونه، ث)نانوفيلم، ج)نانو توپ[۱۰].



شكل ۱-۴: تصاوير SEM نانوسيم نيتريد آلومينيوم، الف) ديد عمود از بالا، ب)ديد مايل [۱۰].



شكل ۱-۵: الف)تصوير SCM نانوسوزن نيتريد آلومينيوم[۱۰]. ب)تصوير TEM نانولوله نيتريد آلومينيوم[۵].

#### ۱–۴ نانولولههای نیترید آلومینیوم

از روزهای اولیه کشف و تولید نانولوله های کربنی <sup>۱</sup> (CNT) مطالعات متعددی بر روی این مواد نوین اختصاص داده شده است. برنامه های کاربرد CNT از نانوالکتریک تا فناوری نانو می باشد. از آنجا که خواص الکتریکی CNT عمدتا وابسته به کایرالیتی و قطر نانولوله است بنابراین جایگزینی آنها با دیگر نانولوله های غیر کربنی با خواص مستقل از این عوامل، مزیت تولید نانو لوله های مورد نظر است. برای این منظور نانولوله های نیترید گروه سوم نیترید بور (BN) ، و نیترید الومینیوم (AIN) به عنوان جایگزین های ممکن و مناسب CNT در نظر گرفته می شود. در مقایسه با CNT تمام نانولوله های نیتریدی گروه III نیمرسانا با گاف بزرگ هستند و خواص الکترونی آنها مستقل از کایرالیتی و قطر نانولوله است. در میان آنها AIN دارای بزرگترین گاف نواری است و ماده خوبی برای الکترونیک و پتوالکترونیک آینده است[۱۱]. بنابراین این نانولولهها به عنوان موادی هستند که مناسبتر از CNT ها برای کاربردهای خاص در دستگاه های الکترونیکی و مکانیکی هستند. به تازگی نانولولههای نیترید آلومینیوم با روشهای مختلف ساخته شدهاند. این مواد به خاطر مقاومت گرمایی و دمای نقطه ذوب بالا، هدایت حرارتی قابل توجه، ضریب انبساط حرارتی پایین و خواص دی الکتریک قابل اعتماد شناخته

<sup>&</sup>lt;sup>\</sup> Carbon nunotube

شدهاند[۱۲]. نانولولههای AIN با موفقیت سنتز شده اند[۱۳]. و به عنوان رساناهای ذخیره سازی هیدروژن پیشنهاد شدهاند[۱۴]. اخیرا نشان داده شده است که این نوع نانولولهها به عنوان حسگر NO<sub>2</sub> مورد استفاده قرار میگیرد[۱۵]. نانولولههای نیترید آلومینیوم از طریق آزمایشگاهی، توسط جریان مستقیم (DC) قوس پلاسمای ناشی از ذوب آلومینیوم در محیط N-A ، یا با فراوری پودر آلومینیوم آغشته به سولفات کبالت در محیط <sub>2</sub>*N*<sub>1</sub>*N*، در کورههای لولهای مانند مخصوص توسط وو<sup>(</sup>[۶]] و همکاران و سپس با طول چند میکرومتر و با قطر ۳۰–۸۰ نانومتر در مقیاس گرمی توسط تندر<sup>7</sup> و همکارانش[۱۳] سنتز شد. گاف نواری این نانولوله ها زیاد و مشخصا به کایرالیته آنها وابسته است (بر میباشد. از موارد استفاده این نانوساختارها میتوان به لحاظ انرژی مطلوبتر از آلایش دسته صندلی میباشد. از موارد استفاده این نانوساختارها میتوان به لامپهای LED جهت صرفه جویی در مصرف برق، لیزرهای آبی در دیسکهای چند رسانهای، ترانزیستورهای الکترونهای پر تحرک<sup>۳</sup> و

AIN مروری بر کارهای انجام شده در زمینه نانولولههای AIN

در سال ۲۰۰۳ ژانگ <sup>۵</sup>و دونگ جو<sup>۶</sup> [۱۸] در یک تحقیق برای بررسی امکان ایجاد نانو لوله-های نیترید آلومینیوم ویژگی چهار ترکیب نانو ساختار از جمله نانو سیم الماس، نانو سیم نیترید آلومینیوم، نانو لوله ی کربنی و نانو لولهی نیتریدآلومینیوم را با استفاده از روش اصول اولیه مورد مقایسه و بررسی قرار دادند. در این کار یک نانولولهی نیتریدآلومینیوم با قطر یکنواخت به خوبی شکل گرفت که حتی رقابت با نانو لوله های کربنی هم دارد. گاف نواری تخمین زده شده از نانو لوله های

۱ Wu.

<sup>&</sup>lt;sup>r</sup> Tondare.

<sup>&</sup>lt;sup>r</sup> High Electron Mobility Transistors (HEMT).

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup> Field Effect Transistors (FET).

۵ Dongju

<sup>&</sup>lt;sup>°</sup> R.Q.Zhang

نیتریدآلومینیوم بزرگتر از ساختارهای نانو سیم مربوطه است که متفاوت از نانولوله های کربنی در مقایسه با نانو سیم الماس میباشد. گاف نواری ساختارهای مورد بررسی در جدول ۱–۱ آورده شده است. نانو ساختارهای یک بعدی بهینه سازی شده که در این مقاله بررسی شدهاند در شکل ۱–۶ نشان داده شده است، که در آن یک یا دو اتم در بخش میانی هر مدل به عنوان اتم های نماینده در شکل ۱–۶ انتخاب شده است و جزئیات متغیرهای هندسی برای اتم های نماینده در شکل ۱–۷ نشان داده شده است. از شکل ۱–۶ واضح است که تمام نانو ساختارها در مقایسه با ساختارهای چهارتایی استاندارد و ساختارهای نانو لوله ای تحریف قابل توجهی ندارند و دارای محور تقریبا مستقیم و دیواره های صاف برای نانو لوله های تحریف قابل توجهی ندارند و دارای محور تقریبا مستقیم و دیواره مختلف وجود دارد. در نانوسیم الماس طول پیوند C-C حدود Å ۱۹۵/۱ برای پیوندهایی که کم و بیش عمود بر محور سیم میباشند و حدود Å ۱۸۵۰ برای اتم هایی که در جهتهای دیگر میباشند. این جابجایی طول پیوند تنها ۸۱/۱۱ میباشد. در مقابل برای پیوند ۸۱/۱۰ در ساختار ۲ شکل ۱–۶ بیش عمود از محور سیم میباشند و حدود Å ۱۸۵۰ برای اتم هایی که در جهتهای دیگر میباشند. این جابجایی طول پیوند تنها ۱۰/۱۰۱۱ میباشد. در مقابل برای پیوند ۲۰–۱۸ در ساختار ۲ شکل ۱–۶ بیشتر از پیوند ۲–۲۰ در شکل ۱–۶ میباشد.



شکل ۱-۶:نانو ساختارهای مورد بررسی ۱)نانوسیم الماس ۲)نانوسیم AIN ۳)نانو لوله کربنی ۴)نانولوله AIN [۱۸].



شکل ۱-۲:متغیرهای هندسی برای اتمهای نماینده در شکل ۱-۶ برای چهار ساختار. (طول پیوند به آنگستروم و زاویه به درجه)[ ۱۸].

تفاوت در تغییرات طول پیوند برای دو نانو ساختار میتواند به شرح زیر باشد. ۱ – اتم های کربن در نانو سیم های الماس هیبریداسیون  $sp^3$ را نسبت به یکدیگر جذب میکنند در حالی که هر دو اتم های آلومینیوم و نیتروژن در ساختار نیترید آلومینیوم مکعبی از هیبریداسیون  $sp^3$  غیر قابل انطباق استفاده میکنند. چون به ترتیب سه و پنج الکترون در نوار چهار ظرفیت آنها وجود دارد.

۲- دو ساختار یک و دو پیچیدگی های مختلفی از نظر اجزای شیمیایی دارند. شرایط مرزی اتم های آلومینیوم و نیتروژن در ساختار ۲ شکل ۱-۶ به وضوح متفاوت میباشد. با این حال برای سادگی تمام اتم های آلومینیوم و نیتروژن با استفاده از اتم هیدروژن اشباع شده است. به هر حال یک شکل متقارن با محوری صاف از ساختار نانو سیم آلومینیوم با استفاده از این تقریب بدست آمد. پس نتیجه گیری میشود که خطای ناشی از این تقریب نمیتواند برای توصیف ساختار نانو سیم نیترید آلومینیوم بسیار مهم باشد.

همچنین در ساختارهای لوله ای طول پیوند برای C-C بین Å ۱/۳۷۴ تا گ ۱/۴۴۶ برای نانولولههای کربن و طول پیوند NAI-N بین Å ۱/۷۷۱ تا گ ۱/۷۷۱ برای نانو لولههای نیترید آلومینیوم متغیر می-باشد. این تغییرات طول پیوند کوچک(Å ۲/۰۷۲ برای C-C و Å ۲۰۰۵ برای پیوند Al-N) نشان می -دهد که پیوند  $\pi$  در تمام ساختار گسترده میباشد. به خوبی شناخته شده است که نانولوله های کربنی شامل حلقه های شش گوشی از اتم های کربن هستند که این اتم ها هیبریداسیون  $sp^2$  را برای تشکیل پیوند  $\pi$  ایجاد می کنند و موجب طول پیوند تقریبا متوسط C-C میشوند. محاسبات انجام شده در این مقاله با چنین مفهوم رایج توافق دارد بنا بر این محاسبات میتواند نانو لوله های کربنی را توصیف کند. برای نانولوله های Al-N تمام طول های پیوند از این محاسبات میتواند نانو لوله های کربنی را پیوند Al-N حتی کمتر از پیوند C-C درساختار ۳ شکل ۱-۶ میباشد که نشان دهنده هیبریداسیون پیوند Al-N حتی کمتر از پیوند C-C درساختار ۳ شکل ۱-۶ میباشد که نشان دهنده هیبریداسیون پیوند Al-N حتی کمتر از پیوند C-C درساختار ۳ شکل ۱-۶ میباشد که نشان دهنده هیبریداسیون پیوند Al-N حتی کمتر از پیوند C-C درساختار ۳ شکل ۱-۶ میباشد که نشان دهنده هیبریداسیون پیوند Al-N حتی کمتر از پیوند C-C درساختار ۳ شکل ۱-۶ میباشد که نشان دهنده هیبریداسیون ۰/۱۱۹ تا نزدیکی ۱۲۰ متغیر میباشد (زاویه بین دو اربیتال هیبریدی sp<sup>2</sup>) بدست آورد. لازم به ذکر است که نانو لولههای نیترید آلومینیوم طراحی شده در اینجا دارای قطر بسیار کم و انرژی کرنش زیاد هستند. انتظار میرود که یک نانولوله با قطر بزرگتر انرژی تشکیل کمتری داشته باشد و بنابر این پایداری افزایش پیدا کند[۱۸].

E <sub>HOMO</sub> (a.u.)	E <sub>LUMO</sub> (a.u.)	$\Delta E = E_{\rm HOMO} - E_{\rm LUMO} $ (eV)
-0.31632	0.23580	15.02
-0.19696	-0.00611	5.19
-0.28399	0.01163	8.04
-0.34226	0.05823	10.09
	$E_{\rm HOMO} \\ (a.u.) \\ -0.31632 \\ -0.19696 \\ -0.28399 \\ -0.34226$	$\begin{array}{c} E_{\rm HOMO} & E_{\rm LUMO} \\ ({\rm a.u.}) & ({\rm a.u.}) \\ \\ -0.31632 & 0.23580 \\ -0.19696 & -0.00611 \\ -0.28399 & 0.01163 \\ -0.34226 & 0.05823 \end{array}$

جدول ۱-۱: مقادير ويژه HOMO و LUMO و شكاف بين آنها برای چهار ساختار مورد بررسی [۱۸].

همچنین در تحقیق دیگری در سال ۲۰۰۳ [۱۵] پایداری و ساختار الکترونی نانولولههای نیترید آلومینیوم با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار داده شد، و مشاهده شد که انرژی مورد نیاز کمتر برای تبدیل ورق نیترید آلومینیوم به یک نانولوله نیتریدآلومینیوم و همچنین پایداری حرارتی بالا، امکان تشکیل نانولولههای AIN را نشان میدهد. تمام نانولولههای نیترید آلومینیوم نیم-رسانا با گاف نواری بین ۲/۸۴ تا ۲/۹۵ الکترون ولت هستند. همچنین مشاهده شد که تمام نانولوله-های زیگزاگ نیم هادی با گاف نواری مستقیم هستند در حالی که نانولولههای دستهصندلی نیم هادی با گاف نواری غیر مستقیم هستند. در شکل ۱–۸ ساختار نواری و چگالی حالتهای نانولوله (۵،۵) از نوع دستهصندلی و نانولوله (۹،۰) از نوع زیگزاگ آورده شده است. بر خلاف نانولولههای کربنی گاف نواری نانولولههای نیترید آلومینیوم با افزایش قطر افزایش پیدا میکنند. در شکل ۱–۱۰ تغییرات گاف نواری بر حسب قطر نانولوله آورده شده است. متوسط طول پیوند ۸۱۸ ۸۸ ۸۲ محاسبه شده که کمی نواری بر حسب قطر نانولوله آورده شده است. متوسط طول پیوند ۱۸۸۸ محاسبه شده که کمی کوتاه تر از مقادیر محاسبه شده برای ساختار زینک بلند ۸۱۸۰ ۸۸ می باشد. که شبیه به نانولوله-های ۸۲ و ۸۸ می باشد.



شکل ۱-۸: ساختار نواری و چگالی حالتها a) نانولوله (۵،۵) b) نانولوله (۹۰۰) [۱۵].



شکل ۱-۹:ساختار تعادلی a) نانولوله (۵،۵) b AlN (۵،۵) نانولوله (۹،۰)d AlN وc) نانولوله (۵،۵) AlN پس از قرارگیری در دمای ۱۰۰۰K [۱۵].

یک انحراف جزئی در دیواره لولههای AIN رخ میدهد، جایی که اتمهای آلومینیوم به سمت محور لوله حرکت میکنند و اتمهای N بعد از آرام شدن به سمت مخالف حرکت میکند که موجب خم شدن می شود. این جابجایی برای نانولوله های (۵،۵)، ۰/۰۳۷Å و برای نانولوله (۹،۰)، ۰/۰۳۵Å می-باشد که در مقایسه با نانولولههای BN وGaN با قطر مشابه انقباض در نانولولههای AlN کوچکتر است. هرچقدر که قطر نانولوله بزرگتر می شود این انحراف کوچکتر می باشد. برای نانولوله های (۱۰،۱۰) این انحراف تنها ۱۸۸٬۱۰/است. در دمای ۱۰۰۰K و فشار ۲ Ps شکل نانولولهها حفظ شده و انحراف در دیوارهها بسیار کوچک می باشد. با توجه به نرمی لوله در دمای بالا، مقطع عرضی به بیضی تبدیل شده است. این انحراف که ناشی از حرکت حرارتی میباشد بعد از بازسازی مجدد میتواند بهبود یابد که این موضوع به وضوح پایداری حرارتی نانولولههای AIN را نشان میدهد. همچنین مشاهده می شود که اتمها در هر دو طرف به سمت محور لوله حرکت می کنند و لولهها به پایان می-رسند. بنابراین انتظار می رود پس از اینکه در یک دمای بالاتر برای مدت زمان بیشتری حرارت داده شود، لوله آلومینیوم تبدیل به یک لوله با انتهای بسته میشود که مشابه نتایج حاصل شده برای نانولولههای BN است[۱۵]. همچنین نانولولههای تکجداره نیترید آلومینیوم از دو دسته زیگزاگ و دسته صندلی با قطرهای بین ۵ تا ۱۵Å تحت تاثیر میدانهای الکتریکی عمود بر محور نانولوله، با استفاده از اصل اول محاسبات<sup>۲</sup> مورد مطالعه قرار گرفته شد. مشاهده می شود که میدان الکتریکی تا V/A ۲/۵ تاثیر کمتری بر پایداری نانولولههای نیتریدآلومینیوم دارد. در شکل۱–۱۲ تاثیر میدانهای الکتریکی ۰/۳،۰/۱ و ۰/۵ بر روی ساختار نواری دو نانولوله (۵،۰) و (۱۳،۰) مشاهده می شود. موقعیت تراز فرمی با خطوط نقطه چین نشان داده شده است. با توجه به این شکل میدان الکتریکی بر روی گاف نواری نانولولههای با قطر بزرگتر تاثیر بیشتری دارد تا جایی که گاف نواری را تا ۲/۵ الکترون ولت کاهش میدهد[۱۹].

<sup>&</sup>lt;sup>\</sup>Close-ended

<sup>&</sup>lt;sup>r</sup> First principles



AIN شکل ۱−۱: تغییرات گاف نواری بر حسب قطر نانولوله a) نانولوله دستهصندلی b AIN) نانولوله زیگزاگAIN [۱۵].



AIN, شکل ۱–۱۱ : انرژی کششی بر حسب قطر نانولوله برای تولید نانو صفحه به نانولوله برای ساختارهای مختلف AIN, شکل ۱–۱۱ : انرژی کششی بر حسب قطر نانولوله برای تولید نانو صفحه به نانولوله برای ا

در تحقیق دیگری در سال ۲۰۱۷ جذب سرب بر روی سطح و درون نانولولههای (۱۰،۰) نیترید آلومینیم با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفت که مقایسه خواص الکتریکی این نانولولهها قبل و بعد از جذب سرب نشان دهنده تغییرات این نانولولهها از نیمه هادی به فلز میباشد. بنابر این نانولوله نیترید آلومینیوم ماده بسیار مناسبی برای تشخیص ماده سمی و خطرناک سرب می-باشد[۱۲].



شکل۱–۱۲ : تاثیر میدانهای الکتریکی خارجی در جهت عمود بر محور نانولوله الف) (۵،۰)، ب) (۱۳،۰). مقادیر میدان الکتریکی برابر با ۰/۱ برای a و h ۰/۳، برای e وb و ۰/۵ برای c وf. [۱۹].



# انواع ساختار پای مانو و مانولوله کا

فن آوری نانو توانمندی تولید مواد، ابزارها و سیستمهای جدید با در دست گرفتن کنترل در سطوح ملکولی و اتمی و استفاده از خواصی است که در آن سطوح ظاهر میشود. از همین تعریف ساده برمیآید که فن آوری نانو یک رشته جدید نیست، بلکه رویکردی جدید در تمام رشته هاست. برای نانوتکنولوژی کاربردهایی را در حوزه های مختلف از غذا، دارو، تشخیص پزشکی و بیوتکنولوژی تا الکترونیک، کامپیوتر، ارتباطات، حملونقل، انرژی، محیط زیست، مواد، هوافضا و امنیت ملی برشمرده اند. کاربردهای وسیع این عرصه به همراه پیامدهای اجتماعی، سیاسی و حقوقی آن، این فن-آوری را بهعنوان یک زمینه فرا رشتهای و فرابخش مطرح نموده است. هر چند آزمایشها و تحقیقات پیرامون نانوتکتولوژی از ابتدای دهه ۸۰ قرن بیستم بطور جدی پیگیری شد، اما اثرات تحول آفرین، معجزه آسا و باورنکردنی فن آوری نانو در روند تحقیق و توسعه باعث گردید که نظر تمامی کشورهای بزرگ به این موضوع جلب گردد و فناوری نانو را به عنوان یکی از مهمترین اولویتهای تحقیقاتی خویش طی دهه اول قرن بیست و یکم محسوب نمایند. استفاده از این فن آوری در کلیه علوم پزشکی، پتروشیمی، علوم مواد، صنایع دفاعی، الکترونیک، کامپوترهای کوانتومی و غیره باعث شده که تحقیقات در زمینه نانو بهعنوان یک چالش اصلی علمی و صنعی پیش روی جهانیان باشد که در کلیه علوم تحقیقات در زمینه نانو بهعنوان یک چالش اصلی علمی و صنعتی پیش روی جهانیان باشد[۲۰].

#### ۲-۲ تاریخچه فناوری نانو در جهان

چهل سال پیش ریچاردفاینمن<sup>۱</sup>، متخصص نظریه کوانتوم و دارنده جایزه نوبل، درسخنرانی معروف خود در سال ۱۹۵۹ با عنوان ( آن پایین فضای بسیاری هست) به بررسی بعد رشد نیافته علم مواد پرداخت. وی درآن زمان اظهار داشت : اصول فیزیک، تا آنجایی که من توانایی فهمش را دارم، بر خلاف امکان ساختن اتم به اتم چیزها، حرفی نمیزنند. او فرض را بر این قرار داد که اگر دانشمندان

<sup>&</sup>lt;sup>\</sup> Richard Feynman
فرا گرفتهاند که چگونه ترانزیستورها و دیگر سازهها را با مقیاسهای کوچک بسازند، پس ما خواهیم توانست که آنها را کوچک و کوچکتر کنیم. در واقع آنها به مرزهای حقیقیشان در لبههای نامعلوم کوانتوم نزدیک خواهند بود بهطوری که یک اتم را در مقابل اتم دیگری به گونهای قرار دهیم که بتوانیم کوچکترین محصول مصنوعی و ساختگی ممکن را ایجاد کنیم. فاینمن در ذهن خود یک "دکتر مولکولی" تصور کرد که صدها بار از یک سلول منحصربه فرد کوچکتر است و میتواند به بدن انسان تزریق شود و درون بدن برای انجام کاری یا مطالعه و تایید سلامتی سلولها و یا انجام اعمال کلمه "بزرگ" از اهمیت ویژهای برخوردار بود. مثل علوم بزرگ، پروژههای مهندسی بزرگ و غیره حتی کامپیوترها در دهه ۱۹۵۰ تمام طبقات ساختمان را اشغال میکردند. ولی از وقتی فاینمن نظرات و منطق خود را بازگو کرد، جهان روندی به سوی کوچک شدن در پیش گرفت[۲۰].

۲–۳ چرا مقیاس نانو اهمیت دارد

نانومتر یک واحد اندازه گیری است برابر با <sup>۹</sup>-۱۰ متر و تمام اشیاء و موجوداتی که اندازه آنها در حد ۱ تا ۱۰۰ نانومتر است، اشیاء و موجودات نانو مقیاس نامیده میشوند. این روزها نام نانو را بسیار میشنویم: علوم و فناوری نانو، دانشمندان نانو، ستاد نانو، باشگاه نانو، سمینار نانو، کارگاه نانو، کتاب نانو و ... . به نظر شما چرا این "نانو"ی بسیار کوچک اینقدر مهم شده و نامش بر سر زبانها افتاده است؟



شکل ۲-۱: ریچارد فاینمن، پدر علم نانو[۲۰].

خواص مواد را می توان به دو بخش خواص فیزیکی و خواص شیمیایی تقسیم بندی کرد. رنگ، شفافیت، خواص الکتریکی، خواص مغناطیسی، سختی، حلالیت، نقطه ذوب و ... ویژگیهایی هستند که آنها را با نام خواص فیزیکی می شناسیم و سرعت واکنش، واکنش پذیری و ... از جمله خواص شیمیایی هستند. تجربه چند هزار ساله زندگی انسان به او نشان داده که در شرایط عادی، ویژگیهای یک ماده خاص تا حد قابل قبولی ثابت است و به این دلیل است که ما می توانیم مواد را از روی خواصشان شناسایی کنیم.

موضوع جذابیت مقیاس نانو نیز مربوط به خواص مواد است. یافتههای دانشمندان نشان میدهد که خواص مواد در مقیاس نانو بسیار متفاوت از مقیاس بزرگ است. به عبارت دیگر اگر ذرات ِ یک ماده خاص را در حد چند نانومتر (۱ تا ۱۰۰ نانومتر) کوچک کنیم، این ذرات ویژگیهای متفاوتی با ذرات بزرگ اولیه خواهند داشت. این در حالی است که کوچک کردن ذرات یک تغییر فیزیکی است و ما انتظار نداریم که با این تغییر فیزیکی، ویژگیهای اصلی ماده تغییر کند. این امر سبب گردیده مقیاس نانو بیش از سایر مقیاسها مورد توجه قرار گیرد.

### ۲-۳-۲ تغییر رنگ

حتما بارها خردههای یک شیشه شکسته شده را دیدهاید. ذرات حاصل از شکستن یک شیشه هر چه قدر هم که کوچک باشند، باز به بیرنگی و شفافیت شیشه اولیه هستند. اما این قاعده در مقیاس نانو صادق نیست. یعنی موادی وجود دارند که رنگ ذرات چند نانومتری آنها، با رنگ ذرات بزرگترشان متفاوت است. طلا و نقره شناخته شدهترین نمونههای این مواد هستند. این پدیده در دنیای ماکرومقیاس ما یک اتفاق غیر معمول است اما از آن غیرعادیتر این است که نانو ذرات نقره با تغییر شکل هندسی هم تغییر رنگ میدهند.

۲-۳-۲ تغيير شفافيت

شفافیت، یک خاصیت فیزیکی است و نشاندهنده میزان توانایی یک ماده در عبود دادن نور مرئی از خود است. یک پرتو نور در برخورد با سطح ماده میتواند از آن عبور کند، جذب آن گردد یا بازتابیده شود. اگر مادهای پرتوهای نور را جذب کند و یا آنها را باز تاباند، نور را مسدود کرده است. مواد مختلف بسته به عملکردشان در برابر تابش نور، میتوانند کاربردهای فراوانی داشته باشند. به عنوان مثال اکسید روی و اکسید تیتانیوم نور ماورای بنفش را کاملا جذب میکنند و نور مرئی را بازتاب میکنند. این مواد که به رنگ سفید دیده میشوند، گزینههای بسیار مناسبی برای کرمهای ضد آفتاب هستند. البته افراد بسیاری رنگ سفیدی را که این کرمها بر روی پوست ایجاد میکنند، دوست ندارند. خوشبختانه این مشکل را میتوان با کوچک کردن اندازه ذرات این مواد حل کرد .

نانوذرات اکسید روی و اکسید تیتانیوم، با وجود اینکه نور ماورای بنفش را کاملا جذب می کنند، اما برخلاف ذرات بزرگتر کاملا شفاف هستند. البته این امر ناشی از عبور نور مرئی از این ذرات نیست، بلکه به سبب آن است که اندازه نانوذرات اکسید روی و اکسید تیتانیوم کوچکتر از طول موج نور مرئی (۴۰۰–۷۰۰ نانومتر) است و از این رو این ذرات توانایی بازتابش نور مرئی را ندارند.

# ۲-۳-۳ تغيير خواص مغناطيسي

کمی براده آهن را در یک لیوان آب حل کنید و آن را خوب به هم بزنید. قبل از اینکه برادهها تهنشین شوند، یک آهنربا را به لیوان نزدیک کنید. چه اتفاقی میافتد؟ آیا مخلوط آب و براده نسبت به میدان مغناطیسی آهنربا عکسالعملی نشان میدهد؟ اگر این آزمایش را خیلی خوب انجام داده باشید، بهترین نتیجه حاصل جذب ذرات براده توسط آهنربا است. اما اگر همین آزمایش را توسط ذرات نانومتری آهن (یا کبالت) تکرار کنیم، نتیجه متفاوت خواهد بود.

سیال مغناطیسی (یا فروفلوید) مایعی است متشکل از نانوذرات فرومغناطیس (مانند آهن و کبالت) که در آب یا یک حلال آلی معلق شدهاند. این مایع در حضور یک آهنربا (یک میدان مغناطیسی) خاصیت مغناطیسی بسیار قوی از خود نشان میدهد، به نحوی که با حرکت آهنربا در اطراف این مایع می توان آن را به شکلهای سهبعدی زیبایی در آورد. البته این سیال تا زمانی از خود چنین خاصیتی نشان می دهد که ذرات نانومتری آن (تحت نیروهای بین مولکولی) به یکدیگر نچسبند.

### ۲-۳-۴ تغییر واکنشپذیری

خواص شیمیایی یک ماده، خواصی هستند که به طور مستقل نمی توان آنها را اندازه گیری کرد. به این معنا که مقدار یک کمیت شیمیایی در طی واکنش و برهم کنش یک ماده با مواد دیگر مشخص می شود. واکنش پذیری یا تمایل یک ماده برای واکنش با سایر مواد، از جمله مهم ترین خواص شیمیایی است. بیشتر ما صحنه شعلهور شدن سدیم، لیتیم یا پتاسیم را در تماس با آب دیدهایم همه این ها عناصری هستند که به شدت واکنشپذیرند. تا آنجا که نمی توان آنها را مانند سایر عناصر در تماس با هوا نگه داشت. اما در مقابل با انداختن یک انگشتر طلا در یک لیوان آب اتفاقی نمی افتد و یا پنجرههای آلومینیومی بدون هرگونه مشکلی در مجاورت هوا استفاده می شوند (البته این به مدد لایه مقاوم اکسیدی است که بر روی سطح آلومینیوم تشکیل میشود). اما همین مواد در مقیاس نانو رفتار متفاوتی از خود نشان میدهند. واکنش پذیری مواد در مقیاس نانو افزایش چشمگیری پیدا میکند. در این مقیاس ذرات طلا نه تنها واکنشپذیری بالایی دارند، بلکه برای افزایش سرعت واکنش مواد دیگر (به عنوان کاتالیزگر) نیز استفاده می شوند. نانوذرات آلومینیوم در هوا آتش می گیرند و می توان از آنها به عنوان سوخت موشک استفاده کرد. افزایش واکنش پذیری مواد در این مقیاس، امکان ساخت کاتالیزگرهای بسیار قویتری را برای ما فراهم کرده است. تا آنجا که پیشبینی میشود بتوانیم با استفاده از نانوکاتالیز گرها واکنشهای بازگشتناپذیر بسیاری را (مانند تشکیل گازهای سمی No و Co )در دما و فشار محیط بر گشتیذیر کنیم.

آنچه گفته شد تنها مثالهای محدودی از تغییر ویژگیهای یک ماده در مقیاس نانو است. نقطه ذوب، خواص حرارتی، خواص الکتریکی، خواص مکانیکی و دهها خاصیت فیزیکی و شیمیایی شناخته شده دیگر نیز در این مقیاس تغییر می کنند. گویا دیگر نمی توانیم بدون در نظر گرفتن اندازه ذرات یک ماده، آنرا از روی خواصش شناسایی کنیم. برخی برای حل این مشکل پیشنهاد دادهاند که یک بُعد دیگر به جدول تناولی مندلیف اضافه کنیم. بدین معنی که برای مشخص کردن خواص یک عنصر، علاوه بر اینکه باید نام آن عنصر و جایگاه آن را در جدول مندلیف مشخص کنیم، لازم است که معلوم کنیم خواص عنصر را در چه ابعادی میخواهیم.

ما در دنیای ماکرومقیاس اطرافمان، مواد را با توجه به خواصشان دستهبندی میکنیم و سپس متناسب با این خواص، آنها را برای انجام کارهای مختلف انتخاب میکنیم. برای ساخت پنجره از شیشه استفاده میکنیم، زیرا شفاف است و نور را از خود عبور میدهد؛ برای ساخت زیورآلات ماندگار از طلا استفاده میکنیم، زیرا واکنش پذیری پایینی دارد و اکسید نمی شود؛ برق را با رشتههای مسی انتقال میدهیم چرا که پس از طلا و نقره بیشترین ضریب انتقال الکتریکی را در بین عناصر مختلف دارد و از آنجا که فولاد یکی از سخت ترین مواد دنیای ماست، ابزارهای بزرگی صنعتیمان را از آن می سازیم[۲۰].

#### ۲–۴ دستهبندی نانو مواد

موادی که در سطح نانو در این فناوری به کار می رود، را نانومواد می گویند. مادهی نانوساختار، به هر مادهای که حداقل یکی از ابعاد آن در مقیاس نانومتری (زیر ۱۰۰ نانومتر) باشد اطلاق می شود. برای شناخت و مطالعه نانو مواد دسته بندی آنها بر اساس مشخصات فیزیکی، بسیار حائز اهمیت میباشد. نانو مواد را می توان از نظر ساختار هندسی به چهار دسته اصلی تقسیم کرد[۲۱].

۲-۴-۲ نانومواد صفر بعدی (OD): موادی که در هر سه بعد دارای اندازهی نانومتری میباشند و هیچ بعد آزادی ندارند. بر اساس برخی دستهبندیها به این دسته از نانوساختارها، نانوذرات<sup>۱</sup> نیز گفته میشود. عوامل تاثیرگذار بر خواص نانوذرات، اندازه و جنس ذرات هستند. نانوذرات کاربردهای مختلفی در صنایع مختلف مانند اتومبیل(ضد خش کردن بدنه، ضد بخار کردن شیشهها، لاستیکهای مقاوم و...)، پزشکی (ساخت داروهای جدید، تشخیص علایم بیماریها)، تصفیه آب و فاضلاب، الکترونیک، صنایع نظامی و... دارند. نانوذرات میتوانند بسته به کاربردشان در اشکال مختلف مانند کروی، بیضوی، مکعبی، منشوری، ستونی و ...ساخته شوند. نانوذرات ممکن است از یک جزء تشکیل شده باشند یا اینکه ترکیبی از چند جزء (ماده) باشند. همچنین نانوذرات میتوانند به صورت خالص و یا ترکیبی از چند ماده مختلف باشند.

- ۲-۴-۲ نانومواد تک بعدی (1D): نانومواد تک بعدی دارای دو بعد در مقیاس نانو و یک بعد آزاد می باشند. نانوسیمها<sup>۲</sup>، نانومیلهها، نانولولهها<sup>۳</sup>، نانوالیافها<sup>۴</sup> همگی جز مواد نانوساختار تک بعدی می باشند. عوامل تاثیر گذار روی خواص نانوساختارهای تک بعدی، جنس و نسبت طول به قطر (L/d) آنها می باشند. مهمترین ویژگی نانوساختارهای تک بعدی فلزی هدایت الکتریکی آنها در راستای محور سیم است. نانوسیمها کاربردهای زیادی در بخش-هدایت الکتریکی آنها در راستای محور سیم است. نانوسیمها کاربردهای زیادی در بخش-های مختلف مانند ساخت رایانههای بسیار کوچک با سرعت بسیار بالا، ساخت لیزرهای بسیار کوچک، تشخیص بیماریها، حافظههای مغناطیسی و ... دارند. نانوسیمها نیز می-توانند به صورت خالص و یا ترکیبی از چند نوع ماده مختلف باشند.
- ۲-۴-۳ نانومواد دو بعدی (2D) : این مواد دارای دو بعد آزاد و یک بعد در مقیاس نانو می-باشند. مواد با یک بعد در مقیاس نانو عمدتا شامل لایههای نازک<sup>۵</sup> یا پوششهای سطحی میباشد. عوامل تاثیرگذار در خواص نانوپوششها، جنس و ضخامت آنها میباشد. برای

<sup>&</sup>lt;sup>v</sup> Nanoparticles

<sup>&</sup>lt;sup>r</sup> Nanowire

<sup>&</sup>quot; Nanotube

۶ Nano fibers

<sup>&</sup>lt;sup>a</sup> Thin Films

مثال سلفونهای نگه دارنده مواد غذایی یک نوع پوشش هستند. حال اگر ضخامت آنها در ابعاد نانو باشد، به آنها نانوپوشش گفته می شود. نانوپوشش ها لایه هایی با ضخامت ۱ تا ۱۰۰ نانومتر هستند که به صورت پوشش روی مواد دیگر قرار می گیرند و باعث تغییر خواص و ویژگی های آنها می شوند.

۲-۴-۴ نانومواد سه بعدی (3D): یعنی هر سه بعد آنها در مقیاس آزاد است. همانطور که مشاهده میکنید این تعریف با تعریف مواد نانوساختار در تناقض است، زیرا هیچ یک از سه بعد آن در مقیاس نانو نیست. این دسته شامل نانوکامپوزیتها<sup>(1)</sup> (مواد مرکبی که شامل چند ماده است) و مواد حجیم نانوساختار (یا مواد تودهای نانوساختار) میباشد. مواد حجیم نانوساختار (یا مواد تودهای نانوساختار) میباشد. مواد حجیم نانوساختار (یا مواد یک سری خواص را ندارند، برای مثال در یک بعد کمتر از ۱۰۰ نانومتر باشد. بعضی مواد یک سری خواص را ندارند، برای مثال یک بعد کمتر از ۱۰۰ نانومتر باشد. بعضی مواد یک سری خواص را ندارند، برای مثال پلاستیک خاصیت رسانایی الکتریکی ندارد. اما اگر مادهای همانند ذرات فلزی که خاصیت رسانایی دارند را به آن اضافه کنیم، ماده مخلوط تولید شده میتواند خاصیت رسانایی داشته باشد. به این مواد کامپوزیت یا ماده مرکب گفته میشود. ماده مرکب مکن است از بیش از دو ماده تشکیل شده باشد که هر یک از مواد اضافه شده میتواند فاصیت ممکن است از بیش از دو ماده تشکیل شده باشد. در صورتی که حداقل یکی از اجزای ممکن است از بیش از دو ماده تشکیل شده باشد. در صورتی که حداقل یکی از اجزای که میتواند نانوساختار باشد، به آن نانوکامپوزیت میگوییم. به عنوان مثال میتوان میتوان میتوان میتوان می از ایزی که میتواند زیر به آن نانوکامپوزیت میگوییم. به عنوان مثال میتوان رسانایی پلیمرها را با استفاده از نانولولولههای کربنی افزایش داد[۲۲].

<sup>&</sup>lt;sup>\</sup>Nano composite



شکل۲– ۲: انواع نانوساختارها بر حسب تعداد ابعاد آزاد: به ترتیب از چپ به راست: صفر بعدی، یک بعدی، دو بعدی، سه بعدی[۲۲].

### ۲-۵ نانولولهها

نانولولهها به نانو ساختارهایی اطلاق میشود که در یک بعد خارج از مقیاس نانو هستند و قطر آنها تا حدود ۱۰۰ نانومتر میباشد. صرفنظر از استحکام کششی بالا، نانولولهها خواص الکتریکی مختلفی از خود نشان میدهند. استحکام کششی ۱۰۰ برابر فولاد، رسانایی حرارتی و رسانایی الکتریکی بسیار بالا، توانایی حمل جریانی بالاتر از مس، ممان مغناطیسی بسیار بزرگ و قابلیت گسیل و جذب نور از ویژگیهای برجسته نانولولهها است. ویژگیهای ناشی از فضای خالی درون آنها، از دلایل توجه به این فرم ساختاری از نانو مواد شده است. لفظ نانولوله در حالت عادی در مورد نانولولههای کربنی به کار میرود اما در سالهای اخیر اشکال دیگر نانولوله همچون نانولولههای نیتریدبور BN گالیوم نیتراید GaN، سیلیکونکارباید SiC و ... نیز ساخته شدهاند. نانولولهها را بهطورکلی میتوان به صورت صفحات گرافیتی درنظر گرفت که به دور یک استوانه پیچیده شده باشند. با توجه به شکل(۲-۳) اگر تنها یک صفحه گرافیت را حول محور یک استوانه بچرخانیم شکل حاصل به صورت یک نانولولهی تکجداره، و اگر چندین صفحه گرافیت را حول محور استوانه بچرخانیم یک حاصل به صورت



شکل۲-۳: نمایی از نانو لولههای تک جداره و چند جداره[۲۳].

در شکل (۲- ۴)، اتم O را به عنوان مبدا انتخاب واز این اتم به وسیله بردارکایرال ch به اتم A می-رسانیم

$$\overrightarrow{ch} = n\overrightarrow{a_1} + n\overrightarrow{a_2} \tag{1-1}$$

در رابطه بالا  $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \overline{a_1} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right) = \overline{a_1} = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right)$  و انتهای محور را نقطه a ثابت شبکه می باشد. اگر از اتم o محوری عمود بر بردار کایرال رسم کنیم و انتهای محور را نقطه B بنامیم، و همچنین این کار را در نقطه A نیز انجام دهیم و انتهای محور را نقطه X بنامیم و سپس نقاط g همچنین این کار را در نقطه A نیز انجام دهیم و انتهای محور را نقطه X بنامیم و سپس نقاط B و X را به هم متصل کنیم، شکل حاصل یک مستطیل با طولی برابر بردار کایرال میباشد (شکل ۲-۴). کا را ا به هم متصل کنیم، شکل حاصل یک مستطیل با طولی برابر بردار کایرال میباشد (شکل ۲-۴). حال اگر این مستطیل را به صورت یک استوانه دربیاوریم یک نانولوله تک جداره خواهیم داشت که محیط آن برابر طول بردار کایرال میباشد. [۳]. بردار محیط آن برابر طول بردار کایرال میباشد. [۳]. بردار متفاوت، نظیر هدایت الکتریکی<sup>1</sup>، استقامت مکانیکی و خواص نوری متفاوت می باشند [۳]. بردار کایرال بدوسیله دو مولفه (n،m) مشخص میشود، که درآن n و m اعداد صحیح بوده و نانولوله ا را بر اساس همین اعداد نامگذاری میکند. بر اساس انتخاب بردار کایرال متفاوت سه نوع نانولوله میرابر بردار کایرال این نمونه مقدار بردار کایرال میباشد (شکل ۲-۹).

<sup>&</sup>lt;sup>\</sup> The electrical conductivity

<sup>&</sup>lt;sup>r</sup> Armchair

n=m میباشد. دسته بعدی نانولوله زیگزاگ<sup>۱</sup> میباشد، که در آنها مقدار m=1 است. در سایر حالات نانولوله را کایرال<sup>۲</sup> یا نامتقارن مینامند. در شکل (۲–۴) و (۲–۵) به ترتیب این سه نوع بردار و نانولوله-های حاصل از آنها نشان داده شده است. با استفاده از روابط زیر اندازه بردار کایرال ( $\left| \vec{C}_{h} \right|$ ) و قطر نانولوله (b) به دست میآیند:

$$\left|\vec{C}_{h}\right| = a(n^{2} + m^{2} + nm)^{\frac{1}{2}}$$
 (Y-Y)

$$d = \frac{|\vec{c}_h|}{\pi} \tag{(T-T)}$$

-۲) زاویه کایرال ، به صورت زاویه بین محور زیگزاگ و بردار کایرال تعریف می شود، که در شکل (۲-

$$\cos\theta = \frac{2n+m}{2\sqrt{n^2+m^2+nm}} \tag{(f-r)}$$



شکل۲-۴: تصویر طرحواره از انواع بردارهای تولید کننده انواع نانو لوله[۲۳].

مقدار زاویه کایرال بین ۰ تا ۳۰ درجه قرار دارد که این مقدار برای بردار زیگزاگ برابر صفر و برای

بردار دسته صندلی بیشترین میزان میباشد.

<sup>&</sup>lt;sup>\</sup>Zigzag

<sup>&</sup>lt;sup>r</sup> Chiral



شكل٢-٥: انواع نانو لوله بر اساس جهت لوله شدن صفحه پايه، الف) كايرال ب)زيگزاگ ج)دسته صندلي [٢٣].

بردار انتقال  $ec{T}$  نیز همان بردار پایه شبکه یک بعدی نانولوله است، بطوریکه اگر در جهت محور نانولوله به اندازه بردار انتقال حرکت کنیم به موقعیت هندسی مشابه خواهیم رسید. بردار انتقال بر حسب بردارهای پایه  $ec{a}_1$  و  $ec{a}_2$  به صورت زیر نوشته می شود.

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 \tag{(\Delta-Y)}$$

برای بهدست آوردن اعداد t<sub>1</sub> و t<sub>2</sub> از شرط عمود بودن بردار انتقال بر بردار کایرال استفاده می کنیم لذا داریم:

$$(t_1\vec{a}_1 + t_2\vec{a}_2).(n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2) = 0 \qquad (9-7)$$

با حل معادله بالا به رابطههای زیر برای مقادیر  $t_1$  و  $t_2$  می سیم:

$$t_1 = n + 2m \tag{Y-Y}$$

$$t_2 = -(2n+m) \tag{A-Y}$$

با محاسبه اعداد بالا و جایگذاری در رابطه (۲–۵) برداری موازی بردار انتقال خواهیم داشت.

فس ۳

نطریہ مایعی چگالی

نظریههای مکانیک کلاسیک و کوانتومی دو نظریه اصلی مورد استفاده برای توصیف اکثر قریب به اتفاق سیستمهای فیزیکی هستند اما محدودیت اصلی آنها این است که تنها مسالههای تک ذرمای و دو ذرمای در این چارچوب دارای حل تحلیلی دقیق هستند و برای بررسی سیستم های بیش از دو ذره در حالت کلی باید از نظریهها و تقریبهای توسعه یافته و روشهای محاسباتی استفاده کرد. راهکارهای متعددی برای توصیف محاسباتی سیستم بس ذرمای توسعه یافته و روشهای محاسباتی استفاده کرد. راهکارهای متعددی برای توصیف محاسباتی سیستم بس ذره کرد. در حالت کلی باید از نظریهها و تقریبهای توسعه یافته و روشهای محاسباتی استفاده کرد. راهکارهای متعددی برای توصیف محاسباتی سیستم بس ذرمای توسعه یافته است که هر یک از آنها بسته به مسائل و خواص مورد مطالعه از تقریبها و مدلهای نظری مختلفی استفاده می کنند. یکی از نظریههای مهم و پایه برای بسیاری از محاسبات دستگاههای بس ذره ای نظیر مولکولها و بلورها، نظریه تابعی چگالی<sup>1</sup> است. استفاده از این نظریه به همراه رهیافت کوهن\_شم<sup>7</sup> منجر به یک توصیف نظریه تابعی چگالی<sup>1</sup> است. استفاده از این نظریه به همراه رهیافت کوهن\_شم<sup>7</sup> منجر به یک توصیف تکره می نظریه تابعی چگالی<sup>1</sup> است. استفاده از این نظریه به همراه رهیافت کوهن\_شم<sup>7</sup> منجر به یک توصیف تکره مان از می است که می و پایه برای بسیاری از محاسبات دستگاههای بس ذره ای نظیر مولکول ها و بلورها، نظریه تابعی چگالی<sup>1</sup> است. استفاده از این نظریه به همراه رهیافت کوهن\_شم<sup>7</sup> منجر به یک توصیف تک ذرمای از سیستم های بس ذره ای می شود که نقش بسزایی در ساده سازی محاسبات مربوط به آنها دارد. این روش به دلیل ساده سازی مسئله امروزه مبنای اکثر محاسبات کوانتومی بلورها که جز تسائل اساسی فیزیک ماده چگال هستند به شمار می رود. امروز نرم افزارهای مختلفی بر مبنای نظریه تابعی چگالی کار می کنند[۲۲].

# ۲-۳ سیستمهای بس ذرمای

حل دستگاه های بس ذرهای به علت هامیلتونی پیچیده، بسیار مشکل است. برای حل چنین سیستمهای پیچیدهای، معادله شرودینگر برای همه الکترونها و هستههای موجود درون ساختار نوشته شده و تلاش میشود با اعمال برخی تقریبها معادله شرودینگر حل شود. نظریه تابعی چگالی یکی از نظریههایی است که از آن برای حل دستگاههای بسذرهای استفاده میشود. این نظریه به همراه رهیافت کهن-شم منجر به معادله شرودینگر تک ذرهای میشود که تأثیر بسزایی در کاهش

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Density Functional Theory (DFT)

<sup>&</sup>lt;sup>r</sup> Kohan-sham scheme

حجم محاسبات دارد. در این بخش درباره این نظریه و رهیافت کهن-شم توضیحات مختصری ارائه شده است[۲۵].

بلورهای یک سیستم بس ذرهای شامل تعداد بسیار زیادی (از مرتبه عدد آووگادرو) الکترون و یون مختلف هستند. این ذرات در چارچوب مکانیک کوانتومی غیر نسبیتی با هامیلتونی زیر توصیف می شوند.

$$H = \sum_{i} -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla_{i}^{2} + \sum_{I} -\frac{\hbar^{2}}{2M_{1}} \nabla_{I}^{2} - \sum_{i,I} \frac{Z_{I}e^{2}}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{R}_{I}|} + \sum_{i,j} \frac{-e^{2}}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} + \sum_{I,J} \frac{e^{2}}{|\mathbf{R}_{I} - \mathbf{R}_{J}|}$$

 $Z_I$  که  $\hbar$  ثابت پلانک تقسیم بر  $\pi$ ، ۲ $\pi$  و $M_1$  به ترتیب جرم الکترون و جرم یون I ام e بار الکترون و  $I_I$ عدد اتمی یون I ام است. جملات طرف راست رابطه ۳-۱ به ترتیب توصیف کننده انرژی جنبشی الكترونها، يونها برهم كنشهاى الكترون- يون، الكترون- الكترون و يون - يون هستند. اين هامیلتونی به طور همزمان دینامیک الکترونها و یونهای را توصیف میکند (جفت شدگی معادلات الكتروني و يوني). با توجه به اينكه سرعت حركت الكترون ها خيلي بيشتر از سرعت حركت يونها است. تحت تاثیر یک نیروی یکسان، الکترون شتابی حدود دو هزار برابر نسبت به یونها احساس مىكنند لذا مىتوان فرض كرد كه الكترونها در هر لحظه حركت يونها را دنبال مىكنند. از طرفى يونها در هر لحظه پتانسيل موثري ناشي از الكترونها احساس ميكنند اما با توجه به اين كه جرم يونها خيلي بيشتر از الكترونها است (۲۰۰۰برابر) از يک تقريب مهم و مشهور به نام تقريب بورن-اپنهایمر(آدیاباتیک)<sup>۱</sup> برای سادهسازی آنها استفاده می شود. این تقریب هر چند به لحاظ نظری دارای اثبات دقیقی نیست اما تاثیر بسزایی در کاهش حجم محاسبات مورد نیاز برای حل سیستمهای بس ذرهای دارد. تقریب بورن- اپنهایمر به دلیل سنگینی یونها، تحریک پذیری آنها را بسیار کمتر از الكترونها در نظر مي گيرد. بنابراين در مقياس زماني حركت الكترون ها مي توان يونها را ثابت فرض كرد. به عبارت دقیق تر دینامیک یون ها تأثیری در دینامیک الكترون ها ندارد و معادلات حركت حاكم

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Born-Openhaimer (adiabatic) approximation

بر الکترون ها تنها بوسیله مکان یونها مشخص می شود. بنابراین هامیلتونی حاکم بر بخش الکترونی یک سیستم بس ذرهای را می توان به صورت زیر ساده کرد:

معادله حالت بخش الکترونیک سیستم بس ذرهای با حل معادله شرودینگر  $^{\alpha} = E\Psi^{\alpha} > 4$  که  $^{\alpha}$  عدد کوانتومی اسپینی است، استخراج میشود. با قرار دادن این رابطه در معادله شرودینگر مربوط به کل سیستم، معادلات حاکم بر دینامیک یونها (حل مسئله الکترونی با ثابت گرفتن مکان یون ها و حل مسئله یونی تحت پتانسیل موثر ناشی از الکترونها) استخراج خواهد شد. نکته قابل توجه اینکه با توجه به جرم زیاد یونها دینامیک آنها را میتوان به روش کلاسیک نیز مورد مطالعه قرار داد.

هرچند اعمال تقریب آدیاباتیک، هامیلتونی بسذرهای را بس الکترونی سادهسازی میکند، اما حل بخش الکترونی سیستمهای بسذرهای نیز بسیار دشوار است. با استفاده از روشهای محاسباتی برهم-کنشی آرایشی<sup>۱</sup> و مونت کارلوی کوانتومی<sup>۲</sup> و رایانههای پیشرفته امروزی، مستقیماً میتوان بدون اعمال تقریب جدیدی هامیلتونی بخش الکترونی را فقط برای سیستم های چند ده الکترونی حل کرد. منشاء پیچیدگی این هامیلتونی نیز در جمله سوم آن است که مربوط به برهمکنش دو به دو الکترون ها با هم است و اگر بتوان این جمله را از هامیلتونی حذف کرد، هامیلتونی به صورت جمع هامیلتونی های تک الکترونی نوشته خواهد شد و به این ترتیب حل سیستم N الکترونی به حل N سیستم تک الکترونی کاهش مییابد. حضور برهم کنش الکترون–الکترون مانع از جداسازی سیستم به بخشهای تک الکترونی میشود. به عبارت دقیق تر این جمله منشاء پدیده مهم همبستگی<sup>۳</sup> بین الکترونها است. این جمله موجب نوعی حرکت و دینامیک جمعی در الکترون ها شده و توصیف سیستم را با استفاده از معادلات تک الکترونی غیر ممکن میسازد. همبستگی الکترونی هر چند به لحاظ نظری موجب

<sup>&</sup>lt;sup>\</sup> Configuration intraction

<sup>&</sup>lt;sup>r</sup> Quantum mont carlo

<sup>&</sup>quot; Correlation

دردسرهای فراوانی برای حل سیستمهای بس ذرهای میشود اما به لحاظ عملی به وجود آورنده پدیدههای فیزیکی مهمی نظیر گذار فلز-نیم رسانا، اثر کوندو و سیستمهای فرمیونی سنگین، ابررسانایی دمای بالا، اثر کوانتومی هال و بسیاری پدیدههای دیگر است[۲۶].

# ۳-۳ تقريب الكترون مستقل

یکی از راهکارهای مهم برای غلبه بر مشکلات ناشی از حضور جمله همبستگی در هامیلتونی بس الکترونی، جایگزینی آن با جمله هایی از نوع برهمکنش الکترون با یک پتانسیل خارجی است. در این راهکار فرض میشود که هر الکترون با پتانسیل موثر ناشی از بقیه الکترونها برهم کنش میکند دو روش برای تبدیل معادلات بسذرهای به معادلات تک ذرهای وجود دارد. در روش اول متغیر اساسی تابع موج است، مانند روش هارتری و هارتری-فوک. در روش دوم متغیر اساسی چگالی الکترونی یا چگالی حالت الکترونی است که نظریه توماس-فرمی و فرمول بندی کوهن-شم بر این پایه کار میکنند. در روش توماس-فرمی به جای تابع موج، متغیر اساسی چگالی الکترونی است. کار با چگالی الکترونی بسیار راحت را ز تابع موج است زیرا تابع موج به مختصههای تک تک الکترون ها بستگی دارد در حالی که چگالی فقط به یک مختصه مکان بستگی دارد. در این روش چگالی را از روی پتانسیل میسازند و نقش تابع موج را حذف میکنند. حذف تابع موج یعنی اینکه نیازی به حل دسته معادلات تک ذرهای نداریم. در روش توماس-فرمی انرژی تبادلی در نظر گرفته نشده است که دیراک با اضافه کردن انرژی تبادلی، معادله توماس-فرمی را کاملتر کرد اما نتایج حاصل از این نظریه هنوز

اولین مدل در چارچوب روش پتانسیل موثر را نیز هارتری در سال ۱۹۲۸ ارائه داد[۲۷]. در تقریب الکترون آزاد از برهمکنش الکترون با ذرات دیگر صرف نظر می شود اما در تقریب الکترون مستقل فقط از برهم کنش الکترون با الکترون های دیگر صرف نظر می شود. اگر هر دو بر هم کنش الکترون-الکترون و الکترون-یون را در نظر بگیریم به معادله شرودینگر الکترونی می رسیم. هارتری برای حل این معادله شرودینگر تابع موج کل الکترون ها را برابر با حاصل ضرب تمام توابع موج تک الکترونی گرفت، با فرض اینکه تابع موج تک الکترونی نرمال هستند. سپس با فرض ثابت بودن تعداد ذرات، نسبت به تابع موج وردش گیری نمود و به یک دسته معادلات تک ذرهای رسید. البته این تابع موج هار تری به دلیل متقارن بودن برای دستگاههای فرمیونی مناسب نیست. که در آن برهم کنش الکترون الکترون با معادل آن در الکترومغناطیس کلاسیک که پتانسیل هارتری ( $V_H$ ) نامیده می شود، جایگزین شد.

با جایگذاری این پتانسیل در رابطه هامیلتونی داریم.

در این رابطه (r) چگالی الکترونی است. این هامیلتونی به راحتی قابل جداسازی است و میتوان آن را به بخشهای تک الکترونی تقسیم کرد. به همین دلیل به این تقریب و (همه تقریبهای مبتنی بر روش پتانسیل موثر) تقریب الکترون مستقل (یا غیر برهمکنشی)<sup>۱</sup> گفته میشود که به خاطر حذف برهمکنش الکترون- الکترون حاصل شده است. هامیلتونی هارتری با توجه به حذف برهمکنش الکترون-الکترون قادر به تولید تابع موج واقعی سیستم نیست اما با قبول این فرض که پتانسیل هارتری بخش اعظم پتانسیل برهمکنش الکترون-الکترون را شامل میشود میتوان انتظار داشت که

لازم به ذکر است که در تقریب هارتری-فوک تابع موج به صورت دترمینان اسلیتر نوشته می شود، یعنی در این تقریب، حالات بیشتری نسبت به تابع موج هارتری در نظر گرفته می شود. در این روش، نیز با وردش گیری نسبت به تابع موج، انرژی حالت پایه سیستم محاسبه خواهد شد. در این روش، تابع موج پادمتقارن، علاوه بر نرمال بودن، متعامد نیز می باشند. در معادله هارتری-فوک یک جمله که

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Independent (or noninteracting) electron approximation

دربردارنده برهم کنش الکترون ها با اسپین موازی است مشاهده می شود، که در آن انرژی تبادلی گویند. تفاوت انرژی واقعی دستگاه و انرژی حاصل از روش هارتری-فوک را که ناشی از برهمکنش الکترونها با اسپین مخالف است، انرژی همبستگی گویند. هامیلتونی کاملتری که در چارچوب تقریب الکترون مستقل ارائه شده و امروز مبنای بسیاری از کارهای نظری و محاسباتی است، هامیلتونی کوهن-شم است. این هامیلتونی بر پایه نظریه تابعی چگالی و برای توصیف حالت پایه سیستمهای بس الكتروني توسعه پيدا كرده است. شكل هايي از هاميلتوني كهن-شم براي توصيف حالتهاي برانگيخته نیز ارائه شده است. تفاوت اساسی بین نظریه تابعی چگالی و تقریبهای هارتری و هارتری-فوک این است که در نظریه تابعی چگالی برای رسیدن به N دستگاه تک الکترونی هیچ تقریبی به کار نمی ود و تقریب زمانی استفاده می شود که قصد محاسبه N دستگاه تک الکترونی را داریم. نمایی از تفاوت تقریبهای هارتری، هارتری-فوک و نظریه تابعی چگالی در شکل ۳-۱ نشان داده شده است. بر اساس این شکل، ساده سازی و حل معادلات بسذرهای در دو مرحله انجام خواهد شد. در نظریه تابعی چگالی برای تبدیل دستگاه N الکترونی به N دستگاه تک الکترونی، از تقریب استفاده نمیشود اما در روش هارتری و هارتری-فوک در این مرحله از تقریب استفاده خواهد شد. در عوض برای حل معادلات تک الکترونی، نظریه تابعی چگالی از تقریب استفاده میکند در حالی که روش هارتری و هارتری-فوک بدون استفاده از تقریب مسئله را حل می کنند.



شکل ۳-۱: طرح واره تفاوت تقریبهای هارتری، هارتری-فوک و نظریه تابعی چگالی

۳-۴ قضایای هوهنبرگ-کوهن

نظریه تابعی چگالی از دو اصل اساسی (قضایای اساسی هوهنبرگ-کوهن) تشکیل شده است که اصل اول ان بیان میدارد که چگالی حالت پایه، یک متغیر اساسی در سیستمهای بس الکترونی است و با استفاده از آن كليه خواص سيستم استخراج مي شود. هوهنبر گ وكوهن در قضيه اول به راحتي ثابت کردند که چگالی حالت پایه به صورت یکتایی، هامیلتونی حاکم بر سیستم بس الکترونی را تعیین می کند و با داشتن هامیلتونی یک سیستم تمام ویژه حالتهای آن (توابع موج حالت پایه و حالتهای برانگیخته) قابل شناسایی بوده و متعاقب آن تمام خواص سیستم قابل استخراج است. ارزش اصلی این قضیه این است که به ما اجازه میدهد تا هنگام حل سیستمهای بس ذرمای به جای جستجو برای یافتن توابع موج سیستم، به دنبال چگالی حالت پایه سیستم باشیم که به مراتب پیچیدگیهای ریاضی کمتری از تابع موج بس ذرهای دارد. نکته قابل توجه این است که تابع موج یک سیستم بس الكتروني به مختصات فضايي تمام الكترونها وابسته است در حالي كه چگالي فقط به مختصه مكان بستگی دارد. در قضیه دوم هوهنبرگ-کهن این مطلب اثبات می شود که انرژی کل هر سیستم بس الکترونی نسبت به چگالی حالت پایه آن از یک اصل وردشی تبعیت میکند. به عبارتی دیگر، برای هر سیستم بس الکترونی یک تابع انرژی جهان شمول بر حسب چگالی الکترونی وجود دارد که کمینه مطلق آن انرژی حالت پایه سیستم است و چگالی حالت پایه سیستم، تابعی انرژی را کمینه میکند. این تابعی جهان شمول انرژی را میتوان به شکل زیر نوشت:

$$E[n] = T[n] + \int d^3 r V_{ext}(r) + E_{int}[n] \qquad \qquad \Delta - \mathcal{V}$$

جملات اول، دوم و سوم به ترتیب سهم انرژی جنبشی برهمکنش الکترون-میدان خارجی و برهم کنش الکترون-الکترون هستند. طبق اصل دوم نظریه تابع چگالی، برای حل هر سیستم دلخواه الکترونی کافی است پتانسیل خارجی آن را در رابطه ۳-۵ قرار داده و سپس تابعی انرژی را نسبت به چگالی کمینه کنیم تا انرژی چگالی الکترونی حالت پایه به دست آید. بنابراین برای توصیف سیستمهای بس الکترونی، نظریه تابعی چگالی روش بسیار راحت تری را نسبت به حل هامیلتونی بس الکترونی ارائه میدهد. در این نظریه ابتدا چگالی حالت پایه به عنوان توصیف کننده تمام خواص سیستم معرفی میشود و سپس روش استخراج آن در اصل دوم ارائه میشود. مانع اصلی عملی شدن این نظریه، ناشناخته بودن تابعیهای انرژی جنبشی و برهم کنش الکترون-الکترون در رابطه ۳-۵ است که در بخش بعد مهمترین راهکار ارائه شده برای حل این مشکل توضیح داده میشود.

# ۳-۵ تقریب کوهن-شم

کوهن و شم در سال ۱۹۶۵ روشی هوشمندانه را برای کاربردی کردن نظریه تابعی چگالی ابداع کردند. آنها با توجه به قضیه اول هوهنبرگ-کوهن که چگالی حالت پایه را توصیف کننده همه خواص سیستم معرفی میکند، یک سیستم کمکی برای حل مسئله بس الکترونی در نظر گرفتند که چگالی حالت پایه آن با چگالی حالت پایه مسئله اصلی یکی است اما تابع موج آن متشکل از ذرات مستقل (غیر برهمکنشی) بوده و به مراتب از تابع موج سیستم اصلی که متشکل از الکترونهای همبسته است سادهتر است. با توجه به یکسان بودن چگالی های حالت پایه با حل سیستم کمکی چگالی حالت پایه سیستم اصلی استخراج شده و متعاقب آن طبق نظریه تابعی چگالی کلیه خواص سیستم قابل استحصال است. مزیت سیستم کمکی این است که ذرات تشکیل دهنده آن، هم جرم الکترون هستند اما از طریق یک پتانسیل موثر با هم برهم کنش میکند و برهمکنش جفتی در این سیستم وجود ندارد. بنابراین هامیلتونی کوهن-شم به بخش های تک الکترونی، جدا پذیر بوده و ویژه حالت های ندارد. بنابراین هامیلتونی کوهن-شم به بخش های تک الکترونی، جدا پذیر بوده و ویژه حالت های ندارد. بنابراین مستقل <sup>۵</sup>م ومیند میستم خواهند بود. اگر سهم انرژی برهمکنش الکترونها از خواهد بود

که T<sub>ks</sub> سهم انرژی جنبشی ذرات غیر برهمکنشی سیستم کمکی، E<sub>ext</sub> سهم انرژی برهمکنش این ذرات با میدان خارجی است و به صورت زیر محاسبه می شوند:

$$T_{ks} = \frac{-\hbar^2}{2m} \sum_{i,a} \langle \varphi_i^{\alpha} | \nabla^2 | \varphi_i^{\alpha} \rangle = \frac{-\hbar^2}{2m} \sum_{i,a} | \nabla \varphi_i^{\alpha} |^2$$
  $Y_{-} Y_{-} Y_$ 

در نظریه هارتری دیدیم که پتانسیل موثر برهم کنش بین الکترونها با پتانسیل هارتری تقریب زده میشود. بنابراین انتظار بر این است که سهم عمده  $E_{eff}$  در سیستم کوهن-شم، از انرژی پتانسیل میشود. بنابراین انتظار بر این است که سهم عمده  $E_{eff}$  و سیستم کوهن-شم، از انرژی پتانسیل هارتری تشکیل شود. به همین دلیل، انرژی موثر به صورت جمع انرژی پتانسیل هارتری ( $E_H$ ) و یک هارتری تشکیل شود. به همین دلیل، انرژی موثر به صورت جمع انرژی پتانسیل هارتری ( $E_H$ ) و یک میله تصحیحی کوچک نوشته میشود:  $E_{eff} = T_H + E_{xc}$  این جمله تصحیحی کوچک نوشته میشود:  $E_{eff} = T_H + E_{xc}$  این جمله تصحیحی انرژی (تبادلی همبستگی) نام دارد و توصیف کننده وجوه کوانتومی برهمکنش الکترون-الکترون است که در پتانسیل کلاسیک هارتری لحاظ نشده است. با تو به توضیحات داده شده، انرژی کل سیستم کهن-شم (رابطه) به صورت زیر به دست می آید:

$$T_{ks} + E_{ext} + E_H + E_{xc} = T + E_{ext} + E_{int}$$

$$E_{XC}(T - T_{ks}) + (E_{int} - E_H)$$
  $\gamma_{-}\gamma$ 

همان گونه که مشاهده می شود،  $E_{XC}$  از دو سهم (تفاضل انرژی جنبشی سیستم کمکی و اصلی و تفاضل انرژی برهم کنش الکترون –الکترون با انرژی هارتری) تشکیل شده است. انرژی تبادلی معناصل انرژی سهم کوچکی از انرژی کل است که شکل دقیق آن ن $\pm$ امشخص است و روشهای متنوعی برای تقریب زدن آن توسعه پیدا کرده است. برای به دست آوردن هامیلتونی کوهن-شم، با توجه به

اصل وردشی ریلی-ریتز در مکانیک کوانتوم، با در نظر گرفتن تعامد ویژه توابع و با قید ثابت بودن تعداد ذرات، از تابعی انرژی کوهن-شم وردش گرفته می شود:

با استفاده از رابطه ۳-۱۰ وردش جملات مختلف انرژی کوهن-شم را به شکل زیر می توان انجام داد. برای انرژی جنبشی داریم:

$$\frac{\delta T_{ks}}{\delta \varphi_i^{\alpha*}} = \frac{\delta}{\delta \varphi_i^{\alpha*}} \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \sum_{k,\sigma} \langle \varphi_k^{\sigma} | \nabla^2 | \varphi_k^{\sigma} \rangle \right) = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi_i^{\alpha}$$
 if -Y

اما چون بقیه جملات، تابع چگالی الکترونی هستند برای وردش گیری آنها از قانون و مشتق گیری زنجیره ای استفاده می شود:

$$\frac{\delta}{\delta\varphi_{i}^{\alpha*}} = \frac{\delta n}{\delta\varphi_{i}^{\alpha*}} \frac{\delta}{\delta n} = \frac{\delta}{\delta\varphi_{i}^{\alpha*}} (\sum_{k,\sigma} \varphi_{k}^{\sigma*} \varphi_{k}^{\sigma}) \frac{\sigma}{\delta n} = \varphi_{i}^{\alpha} \frac{\delta}{\delta n}$$

$$10-7$$

$$\frac{\delta}{\delta n}$$

$$10-7$$

$$\frac{\delta}{\delta n}$$

$$10-7$$

$$\frac{\delta}{\delta n}$$

$$rac{\delta}{\delta \varphi_i^{lpha^*}} (E_{ext}[n(r)]) = \varphi_i^{lpha} rac{\delta E_{xc}}{\delta n} = \varphi_i^{lpha}(r) V_{xc}(r)$$
 ۱۷–۳  
مشاهده میشود که پتانسیل تبادلی-همبستگی از وردش، تابعی انرژی  $V_{xc} = \delta E_{xc}/\delta n$  نسبت به  
چگالی الکترونی بدست میآید. با جایگزینی نتایج بدست آمده در رابطه ۳–۱۴، ۳–۱۶ و ۳–۱۷ در  
رابطه ۳–۲۱ دسته معادلات تک ذره کوهن-شم به صورت زیر به دست می آید:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r)\right)\varphi_i^{\alpha} = \epsilon\varphi_i^{\alpha}$$

$$V^{-m}$$

$$V_{ext}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r)$$

$$V_{ks} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r)$$
 19-7

در شکل ۳-۲ نمایی از تبدیل سیستم اصلی به سیستم کمکی با استفاده از رهیافت کوهن-شم نشان داده شده است.



شکل ۳-۲: طرحواره سامانه کمکی کوهن-شم و سامانه اصلی سیستم بس ذرهای.

تنها جمله ناشناخته هامیلتونی کوهن-شم، پتانسیل تبادلی-همبستگی است که رابطه دقیقی برای آن وجود ندارد و به همین خاطر روشهای مختلفی برای تقریب زدن آن توسعه یافته است. به عنوان مثال در تقریب چگالی موضعی (LDA) که تقریبی نسبتاً ساده اما کارا و مورد استفاده از بخش تبادلی از انرژی تبادلی-همبستگی با حل دقیق یک گاز الکترونی همگن در چارچوب نظریه هارتری-فوک فرمول بندی می شود و بخش همبستگی آن با روش محاسباتی مونت کارلوی کوانتومی که روش دقیق برای حل سیستم های بس ذرهای است استخراج می شود. به عبارت دیگر در تقریب LDA یک دستگاه غیر یکنواخت، با یک سیستم گاز الکترونی یکنواخت به اضافه چگالی بخش غیر یکنواخت توصیف می شود (این روش مبتنی بر خواص گاز الکترونی همگن است و به همین دلیل چگالی الکترونی آن معمولاً هموارتر از چگالی دقیق سیستم به دست می آید. نکته دیگر اینکه در این تقریب پیوندها کمی قویتر از واقعیت در نظر گرفته می شوند لذا پیوندهای ضعیفی مثل هیدروژنی و

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Local Density Approximation

LDA این است که ناهمگنی چگالی در آن لحاظ نمی شود، به عبارتی انرژی تبادلی-همبستگی به تغییرات چگالی حساس نیست، همچنین غیر موضعی بودن حفره xc در آن لحاظ نشده است، خود بر همکنش جمله هارتری را کامل از بین نمی برد، آثار همبستگی قوی در LDA خوب توصیف نمی شود و مرکز حفره xc را جابجا می کند.

تقریب پر استفاده دیگری که نسخه تعمیم یافته و بهبود یافته لز آن توسعه پیدا کرده است. در گرادیان تعمیم یافته (GGA) نام دارد و فرمول بندی های مختلفی از آن توسعه پیدا کرده است. در این تقریب انرژی تبادلی-همبستگی علاوه بر اینکه به چگالی الکترونی بستگی دارد به گرادیان های آن نیز وابسته میباشد. بنابراین انتظار بر این است که برای سیستم هایی که تغییرات چگالی الکترونی در آنها زیاد است، مناسب تر باشد. از گرادیان چگالی استفاده می شود برای اینکه آثار ناهمگنی را در آن لحاظ کرد. نمونههای توسعه یافته دیگری از این تقریب مانند YBE با PBE و PBE تیز معرفی شدهاند. BLYB علاوه بر ویژگیهای خوب ADL ناهمگنی چگالی را نیز در نظر میگیرد و برای شدهاند. علام علاوه بر ویژگیهای خوب ADL ناهمگنی چگالی را نیز در نظر میگیرد و برای محاسبات ساختارهای بلوری مناسب به نظر می رسد. BPBE که بهبود یافته BPB است، برای توصیف پیوندهای هیدروژنی و پدیدههای جذب مولکولی مناسب به نظر میرسد وBLYB از راه محاسبات ساختارهای بلوری مناسب به نظر می رسد. BLYB که بهبود یافته عاط است، برای محدود نظیر مولکولها و خوشههای اتمی مناسب است. به طور کلی GGA برای توصیف طول پیوند، انرژی بستگی و خواص ارتعاشی مناسب تر است و تقریب ADL برای توصیف برخی ویژگی های نیم انرژی بستگی و خواص ارتعاشی مناسب تر است و تقریب ADL برای توصیف برخی ویژگی های نیم رساناها مناسبتر میباشد.

امروزه هامیلتونی کوهن-شم برای مطالعه خواص گوناگون طیف وسیعی از مواد و ترکیبات به کار میرود اما با توجه به عدم حضور اثر اسپینی یا مغناطیسی، به نظر میرسد که نمیتوان از آن برای

<sup>&#</sup>x27; Generalized Gradient Approximation

<sup>&</sup>lt;sup>r</sup> Perdew-Burke-Enzerhof

مطالعه سیستمهای مغناطیده استفاده کرد. با این وجود، بررسیهای نظری نشان میدهد که نظریه تابعی چگالی در شکل اولیه آن (فرمول بندی ارائه شده در بالا) قادر به توصیف سیستمهای مغناطیسی نیز میباشد. زیرا مغناطش سیستمهای بس ذرهای نیز مانند همه خواص آنها یک تابعی از چگالی کل حالت پایه است ([n(r)]). اما استفاده از DFT برای مطالعه سیستمهای مغناطیسی با در نظر گرفتن چگالی کل حالت پایه به عنوان تنها توصیف کننده سیستم، نیاز به تابعیهای بسیار غیر جایگزیده برای انرژی تبادلی-همبستگی دارد[۲۸].

# ۳-۶ روش حل خودسازگار معادلات کوهن-شم

معادلات اصلی در DFT معادلات و اوربیتال های کوهن-شم است. در این معادلات پتانسیل موثر  $V_{ks}$  مخور دارد که از طریق وردش گیری از تابعی انرژی به دست میآید. جواب این معادلات، انرژی شبه ذرات و اوربیتالهای کوهن-شم را به دست میدهد. برای حل خودسازگار معادلات کوهن-شم در حالت اسپین پلاریزه مطابق آنچه که در شکل ۳-۳ نشان داده شده است ابتدا پتانسیل موثر ( $T_{ks}^{\sigma}(r)$  بر  $V_{ks}^{\sigma}(r)$  بر  $V_{ks}^{\sigma}(r)$  معادلات کوهن-شم در حالت اسپین پلاریزه مطابق آنچه که در شکل ۳-۳ نشان داده شده است ابتدا پتانسیل موثر ( $T_{ks}^{\sigma}(r)$  بر حصب چگالی الکترونی ورودی ساخته میشود. در مرحله بعد معادله کوهن-شم برای این پتانسیل موثر این پتانسیل موثر کاری حصب چگالی الکترونی ورودی ساخته میشود. در مرحله بعد معادله کوهن-شم برای این پتانسیل حل خواهد شد و از آن توابع موج الکترونی سیستم به دست میآید. از این مرحله اگر شرط خود سازگاری را ارضا کند، فرایند محاسبه خاتمه میابد و توابع موج الکترونی به دست آمده در این مرحله اگر شرط خود سازگاری را ارضا کند، فرایند محاسبه خاتمه میابد و توابع موج الکترونی به دست آمده پاسخ دقیق مسئله در را ارضا کند، فرایند محاسبه خاتمه میابد و توابع موج الکترونی به دست آمده پاسخ دقیق مسئله در را ارضا کند، فرایند محاسبه خاتمه میابد و توابع موج الکترونی به دست آمده پاسخ دقیق مسئله در را ارضا کند، فرایند محاسبه خاتمه میابد و توابع موج الکترونی به دست آمده پاسخ دقیق مسئله در را ارضا کند، فرایند محاسبه خاتمه میابد و توابع موج الکترونی به میشود. اگر شرط خود سازگاری برقرار نشود، نرم افزار ترکیبی از چگالی ورودی و خروجی را به عنوان چگالی ورودی اولیه جدید، بکار میبرد و از آن برای ساختن پتانسیل موثر جدید کوهن-را به استفاده می کند. سادهترین روش برای ساخت چگالی جدید رابطه ۳-۰۲ است که میتواند برای شرود. برای شاخت پیانسیل موثر برای

$$n_i^{i+1} = \alpha n_i^{out} + (1-\alpha) n_i^{in} \qquad \qquad \forall \cdot -\forall$$

در حل معادلات کوهن-شم روشهای متفاوتی برای بسط تابع موج وجود دارد که تفاوت آنها در استفاده از نوع توابع پایه میباشد. باید توجه داشت که این توابع باید متعامد باشند.

در پایه امواج تخت، تعداد اعضای این پایه زیاد خواهد بود به خصوص در ناحیه مغزه که تابع موج به صورت جایگزیده قرار دارد بنابراین جملات بسط، بسیار زیاد می شوند، از این رو با توجه به اینکه تعداد زیادی توابع پایه لازم است، قطری سازی هامیلتونی و به دست آوردن ویژه توابع آن نیازمند وقت و محاسبات کامپیوتری زیادی است. از آنجایی که حالتهای مغزه در پیوندهای شیمیایی معمولاً شرکت ندارند می توان توابع موج ناحیه مغزه را کنار گذاشت و تنها تعدادی از امواج تخت که در بسط تابع موج والانس شرکت دارند را در نظر گرفت بنابراین به جای پتانسیل واقعی از شبه پتانسیلها استفاده می شود.



شکل ۳-۳: الگوریتم خودسازگار برای حل معادلات کوهن-شم

۳-۷ شبه پتانسیل

هر اتم از یک هسته و تعدادی الکترون تشکیل شده است. به الکترون های ترازهای کاملا پر الکترونهای مغزه و الکترونهای ترازهای نیمه پر الکترونهای والانس می گویند. ناحیهای که الکترون-های مربوط به لایههای کاملا پر در آن قرار دارند به علت نزدیکی به هسته و در نتیجه برخورداری از پتانسیل قوی هسته، توابع موج نسبتاً جایگزیدهای اطراف هسته دارند. رفتار الکترون های مغزه اثر چندانی بر خواص بلور ندارند و تنها الکترونهای والانس در پیوند اتمها با یکدیگر شرکت می کنند لذا در بررسی خواص فیزیکی سیستم های الکترونی رفتار الکترونهای والانس مهم است و برای انجام محاسبات بلوری باید توابع موج الکترونهای والانس را محاسبه کرد. برای محاسبه تابع موج الکترون های والانس هر اتم بر پایه نظریه تابعی چگالی باید دسته معادلات کوهن-شم حل شود. این دسته معادلات به طور خود سازگار حل و توابع موج و ویژه مقادیر انرژی الکترونها استخراج می شود. برای محاسبه توابع موج الکترونهای والانس بر حسب امواج تخت و یافتن ضرایب بسط با توجه به کمینه شدن انرژی است. این بسط سری نیز در صورتی سودمند است که تعداد ضرایب غیر صفر یعنی تعداد امواج تخت لازم برای آن زیاد نباشد.

الکترونهای والانس در نواحی داخل مغزه به دلیل پتانسیل قوی هسته، انرژی جنبشی زیادی دارند. از أنجايي كه انرژي جنبشي به مشتق دوم تابع موج بستگي دارد بنابراين نوسانات تابع موج الكترون-های والانس در ناحیه مغزه زیاد است. پتانسیل نسبتا قوی در ناحیه مغزه یونی، باعث افزایش تعداد امواج تخت مورد نیاز و در نتیجه افزایش حجم محاسبات می شود. یک راه مناسب برای کاهش حجم محاسبات، استفاده از پتانسیل جایگزین برای الکترونهای مغزه است. این پتانسیل که هامیلتونی را به هامیلتونی جدیدی تبدیل میکند به گونهای انتخاب میشود که ویژه مقادیر انرژی را ثابت نگه دارد و منجر به تابع موج هموارتری شود، به این ترتیب حجم محاسبات کاهش می یابد. این پتانسیل و تابع موج جدید را شبه پتانسیل و شبه تابع موج مینامند. به دلیل اهمیت شبه پتانسیل، روشهای مختلفی برای تولید این شبه پتانسیل توسعه یافته است. شبه پتانسیل ها به دو روش تجربی (با استفاده از نتایج تجربی) و ابتدا به ساکن (با استفاده از اصول اولیه کوانتوم) تولید می شوند. روش ابتدا به ساکن با توجه به بنیان علمی محکمتر به تدریج جایگزین روش تجربی شده است. نظریه تولید اولین نوع از این شبه پتانسیلها توسط هامن و همکارانش ارائه شد[۲۹]. در این نوع شبه پتانسیل ها محاسبات برای یک اتم منزوی انجام می گیرد که در نهایت پس از لخت کردن <sup>۱</sup> برای کلیه ساختارهای بلوري آن عنصر، بسته به چگالی ابر الکترون آن بلور ۲ مورد استفاده قرار می گیرد.

<sup>&</sup>lt;sup>\</sup> Unscreen

<sup>&</sup>lt;sup>r</sup> Screen

یک روش تعریف شبه پتانسیل، روش بار پایسته است. در این نوع شبه پتانسیلها مقدار باری که توسط شبه تابع موج در داخل مغزه توزیع می شود با مقدار بار ناشی از تابع موج اصلی در ناحیه مغزه برابر است. باید توجه داشت که شبه پتانسیلها، به دو بخش موضعی و غیر موضعی تقسیم می شوند. در شبه پتانسیل موضعی، شبه تابع موج علاوه بر فاصله از مرکز یون به عدد کوانتومی الکترون نیز بستگی دارد. یعنی برای هر الکترون با اندازه حرکت زاویهای ا یک شبه پتانسیل خاص در نظر گرفته می شود. در شبه پتانسیل غیرموضعی، پتانسیل از دو بخش تشکیل می شود و این دو بخش شدن برایر استان مارد. یعنی برای هر الکترون با اندازه حرکت زاویهای ا یک شبه پتانسیل خاص در نظر گرفته می شود. در شبه پتانسیل غیرموضعی، پتانسیل از دو بخش تشکیل می شود و این دو بخش شدن برایر استان مارد می شود ماتریس شبه پتانسیل می شود. این ماتریس در محاسبه انرژی کل بلور مورد استفاده قرار می گیرد و منجر به ساخت راحت ر ماتریس شبه پتانسیل می شود. شبه پتانسیل ابتدا به ساکن به دو روش تولید می شوند.

۱- شبه پتانسیلهایی که در محاسبه آنها با به کار بردن پتانسیل و تابع موج واقعی اتم منزوی ابتدا شبه پتانسیل و سپس شبه تابع موج تولید می شود مانند روشBHS.

۲- شبه پتانسیل هایی که با به کار بردن پتانسیل و تابع موج واقعی اتم منزوی ابتدا شبه تابع موج و سپس به کمک معادله شرودینگر وارون شبه پتانسیل تولید می شود مانند روش کرکر.

تابع موج الکترون های اوربیتال m و 1 اتم منزوی به سهولت قابل محاسبه است و به کمک آن می توان شبه پتانسیل مورد نیاز را برای عناصر مختلف تولید کرد. اما این شبه پتانسیل را نمیتوان برای محاسبات بلوری به کار برد. تفاوت پتانسیل اتم منزوی و اتم واقع در بلور ناشی از توزیع ابر الکترونی آنهاست. از آنجا که پتانسیل های تبادلی- همبستگی و هارتری به چگالی ابر الکترونی وابستهاند باید سهم این بخش را از شبه پتانسیل کم کرد تا بتوان این شبه پتانسیل را در محاسبات بلوری به کار برد.

یکی از پارامتر هایی که در افزایش دقت شبه پتانسیل مورد توجه قرار می گیرد، اندازه شعاع مغزه است. این شعاع مغزه تا حد امکان باید کوچک انتخاب شود تا ناحیهای که در آن تابع واقعی بر شبه تابع منطبق نیست کوچک شود و خطای محاسبات کاهش یابد. کوچک بودن شعاع از سوی دیگر منجر به افزایش نوسانات شبه تابع موج می شود و این مسئله منجر به افزایش تعداد امواج پایه می شود که حجم محاسبات را زیاد می کند. در صورتیکه شعاع مغزه بزرگ انتخاب شود، ناحیهای که در آن شبه تابع موج بر تابع موج واقعی منطبق نخواهد شد و محاسبات خطای زیادی خواهد داشت [۳۰].

### SIESTA کد ۸-۳

سیستا یک روش به همراه یک برنامه کامپیوتری برای انجام محاسبات ساختار الکترونی موثر و شبیه سازی های دینامیکی مولکولی ابتدا به ساکن برای مولکول ها و جامدات است. کارایی سیستا ناشی از استفاده از مجموعه های پایه موضعی و اجرای الگوریتم های از مرتبه خطی است که می تواند به سیستم های مناسب اعمال نمود. یک ویژگی مهم این کد این است که دقت و هزینه آن را می توان در یک محدوده وسیع تغییر داد، از محاسبات سریع اکتشافی تا شبیه سازی های بسیار دقیق منطبق بر روش های محاسباتی سنگین مانند روش های تمام الکترونی و امواج تخت[۳].

فس ع

شایج: بررسی بایداری و خواص الکترونی مانولوله کای دوجداره نیترید آلومینیوم

#### ۴–۱ مقدمه

در سالهای اخیر نیتریت های گروه III توجه زیادی را به خود جلب کرده اند، زیرا نیتریت ها یک زیر گروه خاص از ترکیبات V-III هستند که با پایداری دمای بالا، طول پیوند بسیار کوتاه، تراکم پذیری پایین، هدایت گرمایی بالا به دست میآیند.[۱]. ظرفیت جذب بالقوه بسیار زیاد نانولولهها باعث میشود که آنها نامزدهای خوبی برای استفاده در ذخیره سازی و کاربردهای سنسوری امیدوار کننده باشد. با توجه به کاربردهای بالقوه نانولولهای نیترید آلومینیوم، و کاربرد نیترید آلومینیوم در صنعت میکرو الکترونیک مطالعات نظری بر خواص الکترونیکی نانولولههای AIN با فازهای مختلف بسیار مطلوب میباشد[ ۳۲–۳۳]. ما در این فصل قصد داریم پایداری وخواص الکترونی نانولولههای دوجداره SIESTA یا کند و آلایش یافتهی نیترید آلومینیوم را بر مبنای نظریه تابعی چگالی با کد محاسباتی AIST بر پایه تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) مورد بررسی قرار دهیم.

# ۴-۲ بهینه سازی و تعیین پارامترهای مطلوب

انجام محاسبات بر پایه DFT و بهدست آوردن تغییرات انرژی کل نیازمند دو پارامتر مهم و اساسی از جمله انرژی قطع و بردار شبکهبندی (تعداد نقاط در شبکه وارون) می باشد. که افزایش انرژی قطع و بردار شبکه بندی منجر به افزایش زمان و کاهش حافظهی مورد نیاز برای انجام محاسبات می گردد. با بهینه سازی این دو پارامتر کم ترین مقداری که دارای نتیجه یمطلوب است، و در پی آن منجر به کاهش زمان محاسبات می شود، به دست می آید. از این مقادیر بهینه سازی شده، در محاسبات مراحل بعدی استفاده می شود.

۴-۲-۴ بهینه سازی انرژی قطع

در برخی از کدهای محاسباتی نظیر کوانتوم اسپرسو<sup>۱</sup> به منظور کاهش دادن بسط جملات امواج تخت، توابع موج بر حسب امواج پایه تخت بسط داده می شوند. می توان دسته ای از جملات بسط امواج تخت را به ازای بردار موجهایی که انرژی آنها از یک مقدار که اصطلاحا انرژی قطع نام دارد بیشتر شود را صفر در نظر گرفت، که با این کار تعداد توابع پایه تخت در بسط امواج تخت کم می شود و حجم محاسبات کاهش می یابد. برای محاسبه ی بسیاری از کمیتهای فیزیکی مانند چگالی بار، پیشتر شود را صفر در نظر گرفت، که با این کار تعداد توابع پایه تخت در بسط امواج تخت کم می شود بیشتر شود را صفر در نظر گرفت، که با این کار تعداد توابع پایه تخت در بسط امواج تخت کم می شود و حجم محاسبات کاهش می یابد. برای محاسبه ی بسیاری از کمیتهای فیزیکی مانند چگالی بار، پتانسیل و انرژی در ساختارهای متناوب، همچنین تبدیل فوریه کمیتهای فیزیکی از فضای حقیقی به وارون و بلعکس نیازمند به محاسبه ی برخی انتگرال گیریها در این فضاها می باشیم که به منظور محاسبه ی این انتگرالها، ما این فضاها را شبکهبندی می کنیم. در فضای حقیقی اگر فاصله ی بین این نقاط در فضای شدی شده را با xΔ نمایش دهیم، رابطه آن با انرژی قطع به صورت زیر است:

$$K_c = \frac{\pi}{\Delta x} \rightarrow E_{cut} = \frac{h^2 k^2}{2m_e} \rightarrow \text{ if } m, h = 1 \rightarrow \frac{\pi}{\sqrt{2E_{cut}}}$$
 (1-4)

در رابطه بالا Ecut انرژی قطع و kc بردار موج تخت قطع میباشد. مقدار انرژی قطع با فاصله نقاط در فضای حقیقی رابطه عکس و با تعداد نقاط رابطه مستقیم دارد یعنی هرچه مقدار انرژی قطع بیشتر شود، در شبکهی حقیقی فاصلهی نقاط کمتر و تعداد آنها بیشتر می شود. در نتیجه با بالا بودن انرژی قطع تعداد بیشتری از نقاط در انتگرال گیری مشارکت می کنند و این باعث افزایش دقت انتگرال گیری در شبکهی حقیقی می شود.

به دلیل زیاد بودن تعداد نانوساختارهای بررسی شده در این پژوهش امکان بهینهسازی پارامتر انرژی قطع برای تمام این نانوساختارها امکانپذیر نمی باشد لذا با بررسی چند دسته از نانوساختارها به عنوان نمونه، مقدار بهینه را بدست آورده و برای محاسبات دیگر ساختارها از آن استفاده می شود. در

V Quantum ESPRESSO

این پژوهش چهار نانولوله شامل دو نانولوله تک جداره (۳،۳) و (۶،۰)، و دو نانولوله دوجداره (۹،۵) و (۹،۹) و (۹،۹) (0,0) (۵،۵) به عنوان نمونه انتخاب شد.

برای بهینهسازی پارامتر انرژی قطع برای این چهار ساختار نمونه، ابتدا در فایل ورودی همه مقادیر به-غیر از انرژی قطع را ثابت نگه داشته و با تغییر انرژی قطع مقدار انژی کل برای این ساختارها بدست آورده می شود. این کار تا جایی ادامه داده می شود که انرژی کل نانوساختار بهازای انرژی قطع متفاوت همگرا شود. مقادیر انرژی کل بدست آمده بهازای انرژی قطع متفاوت برای نانولولهی تک-جداره خالص در جدول ۴–۱ و برای نانولوله های دو جداره خالص در جدول ۴–۲ نشان داده شده است.

با توجه به نتایج حاصل در جدول و شکل ۴–۱ مشاهده می شود که تغیرات انرژی کل بر حسب انرژی قطع برای هر دو نانو لوله تک جدارهی زیگزاگ و دسته صندلی AIN از مقدار ۴۰۰Ry به بعد روند تقریبا یکنواختی داشته و تغییرات زیادی برای انرژی قطع اتفاق نمی افتد، لذا به منظور بالا رفتن دقت محاسبات و پایین آمدن مدت زمان محاسبات مقدار ۴۰۰Ry به عنوان انرژی قطع بهینه برای نانولوله های تک جداره AIN در تمام روند محاسبات انتخاب گردید.

انرژی قطع(Ry)	1	۲۰۰	۳۰۰	4	۵۰۰	۶۰۰	٧٠٠
انرژی کل(ev )	-1984/242	-1984/848	-1984/809	-1984/880	-1984/887	-1984/888	-1984/8891
(۳.۳)							
انرژی کل (ev)	-8989/888	-3429/201	-8929/048	-3929/001	-8929/088	-8929/088	-8926/088
(۶.۰)							

جدول ۴-۱ انرژی کل بر حسب انرژی قطع برای نانو لوله خالص تک جداره دسته صندلی (۳،۳) و زیگزاگ(۶،۰)

۵۴


شکل ۴-۱: نمودار انرژی کل بر حسب انرژی قطع (الف) نانولوله دسته صندلی (۳،۳) و (ب) نانولوله زیگزاگ (۰،۶)

جدول ۴-۲: انرژی کل بر حسب انرژی قطع برای نانولوله خالص دوجداره دسته صندلی (۹،۹)@(۵،۵) و زیگزاگ (۵،۰)@(۱۲،۰)

انرژی قطع(Ry)	١٠٠	7	۳۰۰	4	۵۰۰	۶
انرژی کل (ev)	-9170/4478	-9170/2900	-9170/901.	-9170/9810	-91VD/99XV	-9178/••1•
(۵.۵)@(۹.۹)						
انرژی کل (ev)	-11147/78•1	-11143/1880	-11147/9780	-11144/•••٣	-11144/011199	-11144/•292
(2)@(17)						



شکل ۴-۲: نمودار انرژی کل بر حسب انرژی قطع (الف) نانولوله دوجداره دستهصندلی (۹،۹)@(۵،۵) و (ب) نانولوله دوجداره زیگزاگ (۱۲،۰)@(۵،۰)

و همچنین نتیجه محاسبات در جدول و شکل ۴-۲ نشان میدهد که برای نانولولهی دوجداره مقدار انرژی کل به ازای انرژی قطع متفاوت برای نانولوله دستهصندلی (۵،۵) (۵،۹) از حدود ۵۰۰R و برای نانولوله زیگزاگ(۱۲،۰) (۵،۰۰) از حدود ۴۰۰Ry مقدار تقریبا ثابتی داشته. پس به منظور داشتن دقت بیشتر در انجام محاسبات و همچنین کمتر شدن زمان انجام محاسبات مقدار انرژی قطع را برای تمام ساختارهای دوجداره دستهصندلی ۵۰۰RY و برای تمامی ساختارهای دوجداره زیگزاگ ۴۰۰ Ry در نظر می گیریم.

# ۴-۲-۲ بهینه سازی و تعیین نقاط K در فضای وارون

تعیین بردار شبکه بندی و تعداد نقاط K در فضای وارون، به منظور کاهش خطا و افزایش سرعت محاسبات انجام میپذیرد. روشی که در کد SIESTA بدین منظور از آن بهره میبریم روش منخارست\_ پک<sup>۱</sup> میباشد[۳۴] که بر مبنای این روش، شبکهبندی در راستاهای آزادی و دورهای ماختار انجام میپذیرد که در حالت کلی به صورت  $X \times M \times N$  میباشد. از آنجا که ساختارهای مورد بررسی نانو لولههای تک بعدی می باشند، شرایط مرزی اعمال شده به گونهای است که فقط در راستای محور لولهها رفتار دورهای در نظر گرفته می شود و مش بندی در راستای که ساختارهای مورد بررسی نانو لولههای تک بعدی می باشند، شرایط مرزی اعمال شده به گونهای است که فقط در راستای محور لولهها رفتار دورهای در نظر گرفته می شود و مش بندی در راستای C به مورت N×10 می شده است که فقط در راستای محور لولهها رفتار دورهای در نظر گرفته می شود و مش بندی در راستای C به مورت N×10 می شده است که فقط در راستای محور لولهها رفتار دورهای در نظر گرفته می شود و مش بندی در راستای C به مورت N×10 می شده است که فقط در راستای محور لولهها رفتار دورهای در نظر گرفته می شود و مش بندی در راستای C به مورت N×10 می شده به گونهای است که فقط در راستای محور لولهها رفتار دوره می داخل گرفته می شود و مش بندی در راستای C به می مورت N×10 می شود و مش بندی در راستای C بازی اعمال شده به گونه می است که فقط در راستای محور لوله از در راستای دیگر به جهت جلوگیری از برهم کنش ها به اندازه گرا خلاء منظور شده است. برای بهینه کردن این پارامتر نیز مثل مرحله قبل ابتدا در فایل ورودی تمامی پارامترها از شده است. برای بهینه شده، ثابت نگه داشته میشود، و با تغییر تعداد نقاط X در هر مرحله و ثبت برژی کل به ازای Xهای متفاوت، مقدار بهینه این پارامتر محاسبه میشود.

<sup>&#</sup>x27; Monkhorst-Pack

تععداد نقاط K	٣	٩	١٩	۲۹	٣٩	49
انرژی کل(ev )	_	-1984/880018	-1984/380028	-1984/880077	-1984/880077	-1984/880020
(۳.۳)						
انرژی کل (ev)	-3929/00010	-۳۹۲۹/۵۵۷۸۶۹	-۳۹۲۹/۵۵۷۸۶۹	-۳۹۲۹/۵۵۷۸۶۹	-۳۹۲۹/۵۵۷۸۶۹	-۳۹۲۹/۵۵۷۸۶۹
(۶.•)						

جدول ۴-۳: انرژی کل بر حسب تعداد نقاط K برای نانولوله خالص تکجداره دسته صندلی (۳،۳) و زیگزاگ (۶،۰)



شکل۴–۳ : نمودار انرژی کل بر حسب تعداد نقاط k الف: نانولوله تکجداره دستهصندلی (۳،۳) ب: نانولوله تکجداره زیگزاگ (۶۰۰)

باتوجه به جدول و شکل ۴–۳ تغییرات انرژی کل بر حسب تعداد نقاط K برای نانولولهی دستهصندلی (۳،۳)از حدود ۲۹ به بعد و برای نانولولهی زیگزاگ (۶،۰) از حدود ۹ به بعد تغییرات چشمگیری نداشته پس این دو مقدار بدست آمده به عنوان مقدار بهینهی تعداد نقاط K برای این ساختارها درنظر گرفته میشود. در نتیجه در محاسبات بعدی برای تمامی نانولوله های تک جداره دسته صندلی مقدار K را ۲۹ و برای تمامی نانولوله های تکجداره زیگزاگ مقدار K را ۹ در نظر می گیریم.

تعداد نقاط K	٣	۵	٩	١٩	۲۹	۳۹
انرژی کل (ev)	-9170/7897	-9170/9745	-9170/9988	-9170/9908	-9170/9907	-9170/9980
(۵،۵)@(۹،۹)						
انرژی کل (ev)	-11147/987	-11147/१११४	-11144/•••٣	-11144/•••7	-11144/•••۲	-11144/•••
(۵.・)@(۱۲.・)						

جدول ۴-۴ : انرژی کل بر حسب تعداد نقاط K برای نانولوله خالص ودوجداره دسته صندلی (۹،۹)@(۵،۵) و زیگزاگ (۱۲۰۰)@(۵،۰)



شکل ۴-۴ : نمودار انرژی کل بر حسب تعداد نقاط k الف: نانولوله دوجداره دسته صندلی (۹،۹)  $\widehat{(0,0)}(0,0)$  ب: نانولوله دوجداره زیگزاگ (۵،۵) (۵،۰)

برای ساختارهای دوجداره نیز با توجه به جدول و شکل ۴-۴ تعداد نقاط K بهینه برای نانولوله دسته صندلی و زیگزاگ ۹ در نظر گرفته می شود.

#### ۴-۳-۲ مجموعه پایه ها

با انتخاب یک پایه مناسب به ازای اوربیتالهای اتمهای تشکیل دهنده ساختار می توان تا حد زیادی در زمان انجام محاسبات صرفهجویی کرد و نتایج را با دقت بیشتری محاسبه کرد. اوربیتالهای اتم را میتوان به صورت حاصلضرب یک تابع شعاعی در هماهنگهای کروی در نظر گرفت.

کد محاسباتی SIESTA تابع موج تکذرهای کوهن-شم را بر حسب ترکیب خطی از پایههای اوربیتالهای اتمی بسط میدهد که این پایهها توسط تعدادی از پایه های چندگانه زتا بسط داده می شود. پایههای زتا به سه بخش زتای یگانه، دوگانه و سه گانه برای یک، دو و سه تابع شعاعی متفاوت با هماهنگهای کروی مشترک تقسیم می شوند [۳۵]. در این پژوهش از تابع زتای دوگانه قطبیده (DZP)<sup>۱</sup> که در آن هم زمان انجام محاسبات کم و هم نتایج با دقت بیشتری بدست می آید، استفاده شده است.

#### ۴-۲-۴ بهینهسازی ساختار و ثابت شبکه

گام بعدی بعد از بهینه سازی پارامترهای ورودی بهینه سازی ساختار و موقعیت اتم ها برای پرداختن به خواص الکترونی می باشد. بر اساس رهیافت دینامیک مولکولی موقعیت اتمها دائما در حال تغییر می باشند تا جایی که انرژی کل ساختار به حالت کمینه برسد. بعد از این که اتمها به حالتی رسیدند که انرژی کل ساختا به کمینه مقدار رسید موقعیت اتمها و ثابت های شبکه به حالت تعادلی می رسند که از این جایگاه اتمی و ثابت شبکه تعادلی برای بررسی خواص الکتورونی استفاده می شود. با توجه به اینکه سیستم مورد بررسی در این پژوهش نانو لولههای تک بعدی می باشد، در دو راستای a وd در حدود ۱۰ آنگستروم خلا داده شده است، و راستای محور نانولولهها یعنی راستای ع به عنوان راستای دورهای در نظر گرفته شدهاست. در اینجا برای واهلش ساختارها از روش شیب همیوغ استفاده شده تا جایی که نیروی بین اتمی کمتر از مقدار AV و ای الات روش شیب

در جدول ۴–۵ پارامترهای ورودی مورد استفاده برای بررسی نانو لوله های دوجداره خالص و آلایش یافته نیترید آلومینیوم آورده شده است. طول پیوند برای تمامی نانولولههای مورد بررسی ۱/۸۳Å در نظر گرفته شده است[۱۵]. پارامتر ثابت شبکه و قطر نانولههای مورد نظر در جدول ۴–۶ آورده شده است.

<sup>&</sup>lt;sup>\</sup> Double zeta polarize

$rs^r$ , $rp^r$	آلایش لایه ظرفیت اتم Al
۱ <i>s</i> <sup>2</sup> , ۲ <i>s</i> <sup>۲</sup> , ۲ <i>p</i> <sup>۳</sup>	آلایش لایه ظرفیت اتم N
شبه پتانسیل	تقريب كد
VDW(BH)	تابع ھمبستگی تعادلی
(CG) شيب هميوغ	روش دینامیک مولکولی
۵۰۰ Ry و ۴۰۰ ۴۰	انرژی قطع
(DZP) دوگانه قطبیده	مجموع پايەھا
/·۴ eV/A	همگرایی نیرو

جدول ۴-۵: پارامترهای ورودی محاسبات ساختاری و الکترونی برای نانولولههای دوجداره AIN

همانطور که در جدول ۴-۶ مشاهده می شود برای نانو لوله های زیگزاگ پارامتر ثابت شبکه با افزایش تعداد اتمها و بزرگ شدن قطر نانولوله خارجی افزایش مییابد تا جایی که این تغییرات تقریبا ثابت و به حدود ۵/۴۵ آنگسترم همگرا می شود. همچنین برای نانولولههای دسته صندلی ثابت شبکه حدود ۳/۱۷ آنگستروم همگرا شده است.

نانولولەھاى دوجدارە	تعداد اتمها در سلول	ميانگين قطر لوله	ميانگين قطر لوله	پارامتر Å)
زیگزاگ	واحد	داخلی(Å)	خارجی(Å)	
(8)@(18)	٧۶	-	-	_
(8)@(14)	٨٠	8/118	14/202	۵/۴۵۴
(8)@(12)	٧۴	۶/•۶٠	10/780	۵/۴۴۷
(8)@(18)	٨٨	۶/۰۲۷	۱۶/۳۱۸	۵/۴۴۷
$(\cdot,\mathcal{F})\widehat{@}(1\vee,\cdot)$	٩٢	۶/۰۴۶	17/202	۵/۴۵۳
(۶)@(١٨)	٩۶	۶/۰۷۵	۱۸/۲۰۴	۵/۴۵۸
(۶)@(١٩)	۱۰۰	۶/۰۷۸	19/197	۵/۴۶۰
نانولولەھاى دوجدارە	تعداد اتمها در سلول	ميانگين قطر لوله	ميانگين قطر لوله	پارامتر Å)
دستەصندلى	واحد	داخلی (Å)	خارجی (Å)	
(۶.۶)@(۱۰.۱۰)	54	-	-	-
(8.8)@(11.11)	۶۸	۱۰/۵۲۸	19/544	٣/١٧١
(8.8)@(17.17)	۷۲	۱ • /۵۲۵	7 1/TVV	٣/١۶٩
(۶.۶)@(1٣.1٣)	٧۶	۱۰/۵۷۴	22/18+	٣/١٧٣
(8.8)@(14.14)	٨٠	۱۰/۵۷۲	74/478	٣/١٧٣
(8.8)@(12.12)	٧٤	۱۰/۵۷۳	78/784	٣/١٧٣
(۶.۶)@(15.18)	٨٨	۱۰/۵۷۳۷	۲٧/٩٨٠۶	٣/١٧٢

جدول ۴-۶ :پارامتر ثابت شبکه در راستای محوری C (طول نانولوله) میانگین قطر لوله داخلی و خارجی ، تعداد اتمهای نانولولههای خالص دوجداره دستهصندلی و زیگزاگ

# ۴-۳ بررسی پایداری نانولولههای دوجداره خالص AIN (دسته صندلی و زیگزاگ)

پایداری در ساختار نانولولههای دوجداره، به دلیل تفاوت تعداد اتمهای لوله داخلی با لوله خارجی و نیز تفاوت در الکترونگاتیوی اتمهای AI و N که باعث ایجاد یک سطح موجدار در محیط لولهها می شوند و نیز اثر پیوندی بین اتمهای لوله خارجی و داخلی که در قطرهای کوچک و بزرگ و در فواصل درون جداری نانولولههای دو جداره نیز متفاوت هستند، یکسان نمی باشد. برای آنکه یک نانولولهی دوجداره پایدارترین ساختار باشد باید ضمن حفظ شکل لولهای هم محور خود، دارای انرژی

$$\Delta E = E[(m,m) @ (n,n)] - E(m,m) - E(n,n)$$
 (7-%)

که (n,n) ، انرژی کل لوله داخلی و (E(m,m)، انرژی کل لوله خارجی و [ (n,n ) @ (m,m)، انرژی کل نانولوله دوجداره یعنی مزدوج لوله داخلی و خارجی میباشد. همچنین انرژی پیوندی ساختار به ازای هر اتم طبق رابطه (۴–۳) بدست میآید.

$$E = [aE(Al) + bE(N) - E(AlN)] / (a+b)$$
(\vec{m}-\vec{m})

# ۴-۳-۴ پایداری نانولولههای دوجداره خالص دستهصندلی نیترید آلومینیوم

برای بررسی پایداری نانولوله های دوجداره خالص دسته صندلی دو دسته از این نانولوله ها به عنوان نمونه انتخاب شده که شامل نانولوله های (n.n)(0.4) که n از  $\Lambda$ تا ۱۵ و نانولولههای (n.n)(0.4) که n از ۹ تا ۱۶ تغییر می کند می باشند. در جدول ۴–۷ انرژی تشکیل، انرژی پیوندی و فاصله درون جداری برای این نانولوله ها آورده شده است. برای اینکه بخواهیم نانو لولهی پایدارتری داشته باشیم علاوه بر اینکه شکل ظاهری نانولوله باید حفظ شود، نانو لوله باید دارای انرژی تشکیل کمینه و انرژی پیوندی بیشینه باشد. همان گونه که در شکل ۴–۵ مشاهده می شود برای هر دو دسته از نانولوله ها دو ساختار اول (۸۰۸)(0.4) و (۹۰۹)(0.4) و (۹۰۹)(0.4) و (۱۰۰۱)(0.4) و (۱۰۰۱) شکل ظاهری خود را از دست داده و از حالت نانولولهای خارج شده اند. و نانولوله داخلی و خارجی با هم پیوند برقرار کردهاند. ولی هرچه قطر نانولوله ی خارجی بزرگتر شده فاصله دو نانولولهی داخلی و خارجی از هم بیشتر شده دو نانولوله دیگر با هم پیوند برقرار نمیکنند.



شکل ۴-۵: ساختار پایدار و فروپاشیده نانولولههای دوجداره دستهصندلی AIN

نانولولەى خالص	وضعيت	انرژی کل	فاصله درون جدارى	انرژی پیوندی	انرژی تشکیل
		eV	Å	eV	eV
(۵.۵)@(۸.۸)	فروپاشی کرد	-8028/822818	-	-	-
(۵.۵)@(۹.۹)	فروپاشی کرد	-9187/987887	-	-	-
(۵.۵)@(۱۰.۱۰)	پايدار	-9,170/71,0071	۳/۹۴۸۵	Y/Y ) YY	+1/137.584
(۵.۵)@(۱۱.۱۱)	پايدار	-1•497/777974•	۵/۳۱۱	٧/٧٣٧۴	+•/١•٣٣٩
(۵.۵)@(۱۲.۱۲)	پايدارترين	-11148/809774	۶/۰۸۴	۷/۷۴۵۵	-•/٣•۶٢٣
(۵.۵)@(۱۳.۱۳)	پايدار	-118•4/448844	۶/٩٠۵۵	V/V۴۵۳	-•/٢•٩٧۴٨
(6.6)@(14.14)	پايدار	-1748+/787199	Y/XY 1	٧/٧۴۵۵	-•/119••۴
(۵.۵)@(۱۵.۱۵)	پايدار	-18118/11880	٨/۶٩۴	Y/YF۶1	_•/•¥۶١٩٩
(6.6)@(9.9)	فروپاشی کرد	-912411	-	-	_
(8.8)@(11.)	فروپاشی کرد	-1•494/878879	-	-	-
(8.8)@(11.11)	پايدار	-11144/122121	۴/۵۰۸	٧/٧٢٣۴	+ 1/811885
(8.8)@(17.17)	پايدار	-111.44/2708822	۵/۳۵۱	४/४६८४	+•/1•۶٩٩٢
(8.8)@(18.18)	پايدارترين	-1746+/848874	6/+920	٧/٧۵٠۴	-•/٣۶٧٩•٣
(8.8)@(14.14)	پايدار	-18118/89888	۶/۹۵۸	V/V۴٩۶	-•/777817
(8.8)@(10.10)	پايدار	-17777/7•7451	۷/۸۳۰۵	٧/٧۴٩۴	-•/١٣۶۴٢٩
(8.8)@(18.18)	پايدار	-14478/•4468	۸/۷۰۳۴۵	V/VF9V	-•/•Å١٩Y

جدول۴-۷ : تعداد ات<sub>م</sub>ها، فواصل درون جداری، انرژی پیوندی و تشکیل نانولولههای دوجداره دستهصندلی و زیگزاگ خالص

همان طور که در جدول ۴-۷ نشان داده شده است برای هر دو نانولولهی دستهصندلی با بزرگتر شدن ابعاد نانولوله انرژی تشکیل کوچکتر میشود تا جایی که به یک مقدار تقریبا ثابت میرسد. نانولوله های با فاصله درون جداری ۶Å و اختلاف کایرالیته ۷ یعنی نانولوله (۱۲،۱۲)@(۵،۵) با انرژی تشکیل مای با فاصله درون جداری ۴٫۶۹) با انرژی تشکیل ۳۰۶۷۹۰۳ - دارای کمترین انرژی تشکیل در دستهی خود می باشند.



شکل۴-۶: تغییرات انرژی تشکیل بر حسب کایرالیته نانولوله خارجی، نانولولههای پایدار دوجداره دستهصندلی ((n,n)@(۵,۵) و (۶٫۶).



شکل ۴-۲: تغییرات انرژی پیوندی بر حسب کایرالیته نانولوله خارجی، نانولولههای پایدار دوجداره دستهصندلی AIN

و همچنین انژی پیوندی در دو دسته نانو لوله با بزرگتر شدن ابعاد ابتدا روند افزایشی داشته سپس تقریبا ثابت میشود. هرچه قطر نانولوله بزرگتر میشود انحنای آن کمتر شده و انرژی کمتری برای تشکیل نانولوله نیاز داریم تا جایی که قطر نانولوله آنقدر زیاد میشود که انحنای آن کم شده و نانولوله به نانوصفحه نزدیک میشود. در قطرهای بزرگ که نانولوله به نانوصفحه نزدیک میشود خصوصیات آن مثل انرژی تشکیل و انرژی پیوندی نیز شبیه نانوصفحه میشود به همین خاطر در قطرهای بزرگ انرژی تشکیل و انرژی پیوندی تقریبا ثابت و با انرژی تشکیل و انرژی پیوندی نانوصفحه تقریبا برابر میشود[۳۸]. به طوری که بیشترین انرژی پیوند باز هم برای نانولولههای با اختلاف کایرال ۷ یعنی نانولولههای (۱۲،۱۲) (۵،۵۵) و (۱۳،۱۳) (۶،۶۶) که با ترتیب دارای انرژی پیوندی ۷/۷۴۵۵ و ۷/۷۵۰۴ هستند، میباشد. پس دو نانولولهی دستهصندلی (۱۲،۱۲) (۵،۵۵) و (۱۳،۱۳) (۶،۶۶) با اختلاف کایرالیته ۷ با توجه به داشتن کمترین انرژی تشکیل و بیشترین انرژی پیوند از پایداری بیشتری نسبت به بقیه ساختارها در دستهی خود برخوردار هستند. فاصله درون جداری برای دو ساختار (۱۲،۱۲) (۵،۵۵) و (۱۳،۱۳) (۶،۶۶) به ترتیب برابر با ۴۸۸۴۸ و ۸۹۲۸۶ میباشد که ساختار (۱۲،۱۲) (۵،۵۵) و (۱۳،۱۳) (۶۰۶) به ترتیب برابر با ۴۸۸۴۸ و ۸۹۲۸۶ میباشد که پایدارترین حالت وقتی میباشد که فاصله درون جداری تقریبا برابر با ۴۸۸۸۸ و ۸۹۲۸۶

# ۴-۳-۴ پایداری نانولولههای خالص دوجداره زیگزاگ نیترید آلومینیوم

در این قسمت نیز مانند قسمت قبل دو دسته از نانولولههای زیگزاگ به عنوان نمونه مورد بررسی قرار گرفتند. نانولوله های مورد بررسی شامل نانولولههای (۱٬۰).(۵٬۰) با n از ۱۱تا ۱۸ و نانولوله های (۱٬۰).(۹٬۰) با n از ۱۲ تا ۱۹ می باشد. در جدول ۴–۸ انرژی پیوندی و انرژی تشکیل با توجه به فاصله درون جداری و تعداد اتم های تشکیل دهنده برای دو دسته نانولولهی نمونه آورده شده است. همان گونه که در شکل ۴–۸ مشاهده میشود در هر دو دسته نانولولهی زیگزاگ دو ساختار اولشان از حالت نانولولهای خارج شده و نانو لولههای داخلی و خارجی با هم پیوند برقرار کرده-اند. ولی از اختلاف کایرالیته ۸ به بعد نانولوله ها شکل خود را حفظ کرده و پایدار می باشند. با توجه به جدول با افزایش قطر نانولولههای زیگزاگ انرژی پیوندی نیز افزایش پیدا می کند.



شکل ۴-۸: ساختارهای پایدار و فروپاشیده نانولولههای دوجداره زیگزاگ AIN.

کمترین انرژی تشکیل در هر دو دسته نانولولهی زیگزاگ مورد بررسی مربوط به نانولولههای با فاصله درون جداری ۶Å و اختلاف کایرالیته ۱۲ میباشد. بنابراین دو نانولولهی (۱۷،۰)@(۵،۰) و (۱۸،۰)@(۶۰۰) به ترتیب با انرژی تشکیل ۲۹۲۲/۰- و ۱۳۶۱۳۱۸- دارای کمترین انرژی تشکیل و در نتیجه پایدارترین نانولوله در دستهی خود میباشند.

همان گونه که در جدول ۴-۸ مشاهده میشود برای دو نانولولهی پایدارتر یعنی (۱۷،۰) (۵،۰۵) و (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰۰) (۵۰۰) (

نانولولەى خالص	وضعيت	انرژی کلeV	فاصله درون جدارى	انرژی پیوندی	انرژی تشکیل
			(Å)	(eV)	(eV)
(۵.+)@(۱۱.+)	فروپاشی کرد	-1•497/877944	-	-	-
(2)@(17)	فروپاشی کرد	-11187/899889	-	-	-
(2)@(18)	پايدار	-11799/487178	41.820	V/SVS101444	1/422219
(2)@(14)	پايدار	-17400/80171	4/2982	٧/۶٨۴٩٢٩۴٠٨	١/١٨٩٣٧۵
(۵.+)@(۱۵.+)	پايدار	-18117/81008	۵/۰۸۶	V/898668866	•/۴٨۶٢١۵
(۵.・)@(١۶.・)	پايدار	-18788/8840	۵/۵۹۱۵	٧/٧٠٩٣٧٢٣۴۵	-•/١•١٢۵٨
(۵.+)@(۱۷.+)	پايدارترين	-14474/981780	8/+8T	٧/٧١۴٧٠٣	-•/٢٩٢٢
(۵.・)@(۱۸.・)	پايدار	-10+8+/789841	۶/۵۵۶۵	٧/٧١۶٣١١٧٠٧	-•/198447
(۶)@(۱۲)	فروپاشی کرد	-118.4,.818.1	-	-	_
(8.•)@(18.•)	فروپاشی کرد	-17488,88788	-	-	-
(۶.•)@(1۴.•)	پايدار	-18111,78.827	41.580	V/8916846AV	1/8989.1
(۶.•)@(۱۵.•)	پايدار	-18788,082098	4/8180	٧/٧٠٠١٨٤١۶٧	١/٣٣٠۵٧٩
(۶.•)@(1۶.•)	پايدار	-14474,818998	۵/۱۴۵۵	٧/٧١٣٠٧٧٢٩۵	·/۵۱·۳۷۵
(%.)@(14)	پايدار	-10.11,4277.	۵/۶۰۳	٧/٧٢٣٣۵٩۴١٣	-•/147744
(۶.•)@(١٨.•)	پايدارترين	-18727,849142	810840	V/VYVF750VT	-•/861818
(%,•)@(١٩,•)	پايدار	-18898,889818	۶/۵۵۷	Y/YTATA119	-•/785778

جدول ۴-۸ : فواصل درون جداری انرژی پیوندی و انرژی تشکیل نانولولههای دوجداره خالص زیگزاگ AIN



شکل ۴-۹: تغییرات انرژی تشکیل بر حسب کایرالیته نانولوله خارجی، نانولولههای پایدار دوجداره زیگزاگ AlN (۶،۰)@(n،۰) و (۵،۰)



شکل ۴–۱۰: تغییرات انرژی پیوندی بر حسب کایرالیته نانولوله خارجی، نانولولههای پایدار دوجداره زیگزاگ( ۱٬۰)@(۱٬۰) و ( ۵٬۰)( ۸۱N

۴-۴ خواص الکترونی نانولولههای دوجداره زیگزاگ و دسته صندلی خالص نیترید آلومینیوم

پس از بهینه کردن پارامترها و مشخص شدن پایدارترین نانولوله ها، با استفاده از این پارامترهای ساختاری بهینه شده به بررسی خواص الکترونی ازجمله ساختار نواری و چگالی حالتهای کلی و جزئی پرداخته می شود.

#### ۴-۴-۱ بررسی ساختار نواری

با بررسی ساختار نواری می توان اطلاعات مهم یک ساختار از جمله نوع گاف نواری وضعیت رسانندگی و خواص فیزیکی را بدست آورد. در این قسمت به بررسی ساختار نواری نانولولههای تک جداره و دوجداره خالص AIN می پردازیم. در شکل۴–۱۱ و۴–۱۲ ساختارهای نواری محاسبه شده برای نانولولههای تکجداره خالص دستهصندلی و زیگزاگ آورده شده است. در نمودارهای مربوط به ساختار نواری هنگامی که تراز فرمی به نوار رسانش نزدیکتر باشد نشان دهنده یاین است که چگالی الكترون ها بيشتر از چگالي حفرهها مي باشد، در نتيجه نيمه رسانا نوع n مي باشد، و همچنين زماني-که تراز فرمی به نوار ظرفیت نزدیکتر باشد نشان دهندهی این است که نیمه رسانا نوع p و چگالی حفره ها بیشتر از چگالی الکترون ها میباشد. همچنین در نیمرساناهای ذاتی تراز فرمی در وسط گاف نواری بین نوار ظرفیت و رسانش قرار می گیرد و چگالی الکترونها و حفره ها با هم برابرمی باشد. شکل۴–۱۱ ساختار نواری نانولولههای تک جداره دستهصندلی AIN را نشان میدهد بیانگر این مطلب است که تمامی نانولولههای تک جداره دسته صندلی AIN نیم رسانا با گاف نواری غیر مستقیم می-باشند. که گاف نواری بدست آمده برای تمامی ساختارهای دستهصندلی بزرگتر از ۳ الکترون ولت می باشد که همان گونه که در جدول ۴–۹ مشاهده می شود با بزرگتر شدن قطر نانولوله گاف نواری نیز افزایش پیدا می کند و این روند تغییرات در قطرهای بزرگتر کند می شود. در نانولولههای با قطر کوچک اثرات انحناء زیاد، نانولوله باعث می شود که بین اوربیتال های اتم Al و N موجود در لبه یک هیبریداسیون برقرار شده و باعث کوچک شدن گاف نواری نانولوله شود. بل بزرگتر شدن قطر نانولوله-

ها اثرات انحناء و لبه کمتر شده و در نتیجه گاف نواری افزایش مییابد. در قطرهای بزرگتر اندازه گاف نواری تقریبا ثابت شده و به مقدار گاف نواری نانوصفحه AIN نزدیک میشود.



شکل ۴–۱۱: ساختار نواری نانولولههای خالص تکجداره دستهصندلی

نانولوله دسته-	قطرÅ	انرژی کل (eV)	موقعیت تراز فرمی	گاف نواری (eV)
صندلی				
(۴.۴)	۶/٩٩٠١	- 4844/408404	-۴/۵۸۴۴	۳/۰۸۶۴۷ غیر مستقیم
(۵،۵)	٨/٩٩٧١	-۳۲۷۸/۳۳۵۹۹۴	-۴/۵۰۰۴	۳/۲۰۹۹ غیر مستقیم
(۶.۶)	1./6701	-8986/880820	-۴/۳۵۵۴	۳/۳۳۲۳۸ غیر مستقیم
(٧.٧)	12/6162	-409./20.94.	-4/2029	۳/۳۷۴۷۴ غیر مستقیم
(٨.٨)	١٣/٩٨٠٢	-۵۲۴۶/۳۱۱۹۸۳	-۴/۱۹۶۰	۳/۴۰۲۴۶ غیر مستقیم
(٩,٩)	10/8800	-29.7/226.62	-۴/۱・۹۴	۳/۴۲۰۸۷ غیر مستقیم
(1・.1・)	14/4402	-8004/178071	-۴/• ۱۹۲	۳/۴۳۳۸۶ غیر مستقیم
(11.11)	१९/٣८९٣	-7214/1•2728	۵۱۸۸/۳-	۳/۴۷۷۳۹ غیر مستقیم
(17.17)	۲ • /۹۷ • ۲	-444.4.4.4	-٣/ΥΔλλ	۳/۴۷۷۳۹ غیر مستقیم
(17,17)	22/201	-8626/902101	-٣/۶۶٩٢	۳/۴۷۷۳۹ غیر مستقیم
(14.14)	24/0008	-91X1/X•YY•1	-٣/۵٨٠٨	۳/۴۷۷۳۹ غیر مستقیم
(10.10)	78/7984	-912/1412	-٣/۵٠۶٠	۳/۴۷۷۳۹ غیر مستقیم
(18.18)	८८/४४८८	- <b>۱ • ۴</b> ۹۳/۵۹۷ • ۹۷	-٣/۴۴۴•	۳/۴۷۷۴ غیر مستقیم
			1	

جدول ۴-۹: گاف نواری، موقعیت تراز فرمی و قطر نانولولههای تک جداره دستهصندلی AIN



با توجه به شکل ۴–۱۲ تمای نانولولههای زیگزاگ نیم رسانا با گاف نواری مستقیم میباشند. در جدول ۴–۱۰ نتایج گاف نواری و موقعیت تراز فرمی برای نانولولههای تک جداره زیگزاگ AIN خالص گردآوری شده است. که نشان میدهد گاف نواری برای تمامی ساختارهای زیگزاگ بزرگتر از ۲/۵ الکترون ولت میباشد. که با بزرگتر شدن قطر نانولوله ها، گاف نواری نیز افزایش پیدا میکند. روند تغییرات گاف نواری برای نانولوله های زیگزاگ نیز همانند نانولولههای دستهصندلی در قطرهای بزرگتر کند میشود. که نتایج به دست آمده در این پژوهش با سایر تحقیقات در توافق میباشد[۳۹].

قطرÅ	انرژی کل (eV)	موقعیت تراز فرمی	گاف نواری(eV)
۵/۷۴۳۱	-8210/210622	-۴/۱۹۶۷	۲/۷۳۵ مستقیم
۶/• እ۳٩	-4927/611808	-۴/۱۹۵۰	۲/۹۱۴۷ مستقیم
V/&VVY	-4014/19971.	-۴/۱۵۸۷	۳/۱۴۵۵ مستقیم
٨/•٧٩١	-0746/978478	-۴/۱۶・۱	۳/۲۰۷ مستقیم
٩/۴٨۶٢	-09.1/.74.48	-۴/۱۸۵۴	۳/۲۷۵۹ مستقیم
۱۰/۰۹۳۱	-8001/110408	-۴/۲۳۹۳	۳/۳۴۲۲مستقیم
11/4887	-7212/12408.	-۴/۲۳۲۹	۳/۳۴۸۹ مستقیم
17/11	-4864/112489	-۴/۲۲۰۵	۳/۳۶۹۸ مستقیم
17/4.74	-8626/•92910	-۴/۱۷۸۵	۳/۳۹۶۶ مستقیم
14/1798	-9181/•٣٢۵٧•	۹۸۳۱/۶-	۳/۳۹۸۹ مستقیم
10/371	-१ <b>८</b> ۳۶/१८•८११	-۴/۱۰۰۳	۳/۴۰۷۸ مستقیم
18/1448	-1•497/914710	-4/•202	۳/۴۲۳۹ مستقیم
17/77+9	-11148/044128	-4/•28	۳/۴۲۴۸ مستقیم
18/1884	-1116.4/142984	-٣/٩٨١٣	۳/۴۲۸۸ مستقیم
19/8880	-1748•/897777	-٣/٩ • ٧٩	۳/۴۳۸۶ مستقیم
	گطر Å   ۵/۷۴۳۱   ۶/۰۸۳۹   ۷/۵۷۷۲   ۸/۰۷۹۱   ۹/۴۸۶۲   ۱۰/۰۹۳۱   ۱۰/۰۹۳۱   ۱۰/۰۹۳۱   ۱۰/۰۹۳۱   ۱۰/۰۹۳۱   ۱۰/۰۹۳۲   ۱۰/۰۹۳   ۱۲/۱۲۹۳   ۱۵/۳۸۲۱   ۱۶/۱۴۴۸   ۱۷/۳۷۰۹   ۱۸/۱۶۲۴   ۱۹/۳۶۴۵	Å قطر قطر   ۵/۷۴۳۱ -۳۲۲۷۵/۸۱۵۴۳۲   ۵/۷۴۳۱ -۳۹۳۲/۴۱۱۸۵۸   ۶/۰۸۳۹ -۳۹۳۲/۴۱۱۸۵۸   ۷/۵۷۲۲ -۴۵۸۸/۷۹۹۲۸۰   ۷/۵۷۲۲ -۴۵۸۸/۷۹۹۲۸۰   ۸/۰۷۹۱ -۵۲۴۴/۹۸۶۴۸۶   ۹/۴۸۶۲ -۵۹۰۱/۰۷۴۰۴۶   ۱/۰۹۳۱ -۶۵۵۷/۱۱۵۴۰۳   ۱/۰۹۳۱ -۶۵۵۷/۱۱۵۴۰۳   ۱/۰۲۲۲۷ -۷۲۱۳/۱۲۴۵۸۰   ۱۲/۱۲۱۰۰ -۷۸۶۹/۱۱۲۷۸۹   ۱۴/۱۲۹۳ -۹۱۸۱/۰۳۲۵۷۰   ۱۴/۱۲۹۳ -۹۸۳۶/۹۸۰۸۱۹   ۱۶/۱۴۴۸ -۱۰۴۹۲/۹۱۷۲۱۵   ۱۷/۳۷۰۹ -۱۱۱۴۸/۵۴۴۱۲۸   ۱۸/۱۶۲۴ -۱۱۸۰۴/۷۷۵۹۶۷   ۱۹/۳۶۴۵ -۱۲۴۶۰/۶۹۲۷۳۲	$\hat{A}_{0}$ $iz_{0}$ $iz_$

جدول ۴-۱۰: گاف نواری، موقعیت تراز فرمی و قطر نانولولههای تک جداره زیگزاگ AIN



شکل۴-۱۳ : تغییرات گاف نواری در نانولولههای خالص تکجداره AIN بر حسب قطر نانولوله



شکل۴-۱۵: ساختار نواری نانولولههای AIN دوجداره دستهصندلی خالص(n,n)@(۶،۶)



شکل۴-۱۷: ساختار نواری نانولولههای دوجداره زیگزاگ (۳،۰)@(۳،۰)

نانولوله دوجداره دستهصندلي	موقعیت تراز فرمی	Ec-Ef (eV)	Ef-Ev (eV)	گاف نواری (eV)
$(\Delta \cdot \Delta) \widehat{(0)} (1 \cdot \cdot 1 \cdot )$				۲/۴۴۵۶۴ غیر مستقیم
	-۴/••٩٨۴٣٨٣	•/VX9798	1/80880	
(۵.۵)@(۱۱.۱۱)				۲/۶۷۴۹۲ غیر مستقیم
	-4/299.1042	1/3222/1	1/80.84	
(1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1)				
$(\omega,\omega)(\psi)(11,11)$				۱/۱۸۰۶۱ عیر مستقیم
	-4/18•48•14	1/44244	1/24111	
(0.0)@(18.18)				۲/۹۸۰۶۳ غبر مستقبح
	W/00151C11	1,000,000	161670	1° •
		1/11/14	170710	
(6.6)@(14.14)				۳/۲۸۶۳۳ غیر مستقیم
	-٣/٩٢۵٣٩۴۴۶	1/69177	1/89408	
(8.8)@(11.11)				۲/۵۶۰۲۸ غیر مستقیم
	-٣/٩١٧•٧٨۴٨	•/VX9798	•/٧٧•٩٩	
(8.8)@(17.17)				۲/۷۱۳۱۳ غیر مستقیم
	-4/18229118	1/788.8	1/421.1	
(C C)@(\# \#\				
$(\mathcal{F},\mathcal{F})(\mathcal{U}(\mathcal{I}(\mathcal{I},\mathcal{I})))$				۵٬۰۵۵٬۰۵ عیر مستقیم
	-٣/٩٩٣٠۵٠۶۵	1/4	1/90990	
(8.8)@(14.14)				۳/۰۹۵۲۷ غیر مستقیم
	W/19769971	1/88871	\/VV • 9 9	
		1/1111	1/ / / • • • • •	
(8.8)@(12.12)				۳/۱۳۳۴۸ غیر مستقیم
	-3/1002.62	1/3222/	۱/۸۰۹۲	

جدول ۴–۱۱: گاف نواری نانولولههای دوجداره خالص دستهصندلی AIN و موقعیت تراز فرمی آنها

نانولوله دوجداره زیگزاگ	موقعیت تراز فرمی	Ec-Ef (eV)	Ef-Ev (eV)	گاف نواری (eV)
(۵)@(١٣)	-4/292112	1/1•۵٩٩٧۴٣	۰/۹۱۸۵۸۵۰۷	۲/۰۱۴۲ مستقیم
(۵)@(1۴)	-4/8327248	1/17948498	1/• 1814688	۲/۱۳۴۶ مستقیم
(۵.+)@(۱۵.+)	-4/22921224	•/እ۶۳እ۴۹۳۷	١/۴・٩٣۶・٨۴	۲/۲۶۵۶ مستقیم
(b.·)@(18.·)	-۴/۳۵۷۵۱۳۵۹	1/17778784	١/٢٨۶٣٩۶٨١	۲/۴۱۱۹ مستقیم
(a.·)@(1Y.·)	-4/2472102	1/22202602	١/٢٩۴٠۵٣٩۶	۲/۵۱۵۴ مستقیم
(8)@(14)	-4/24202148	1/••\$77977	1/108.5.10	۲/۱۵۰۸ مستقیم
(۶.•)@(١۵.•)	-۴/۶۵۵۸۳۶۸۳	1/29118089	•/989889•1	۲/۲۷۳۱ مستقیم
(۶.•)@(١۶.•)	-۴/۳۱۵۲۰۸۴۹	1/+9741474	१/٣٢۶۴٣٩٨١	۲/۴۱۱۴ مستقیم
(۶.•)@(۱۷.•)	-۴/۲۹۳۴лллд	١/٢٢٣•٩٨٧٣	1/80110881	۲/۵۶۷۵ مستقیم
(F.·)@(\L.·)	-4/78908184	1/8160781	1/77075887	۲/۶۷۷ مستقیم

جدول۴–۱۲: گاف نواری نانولولههای دوجداره خالص زیگزاگ AIN و موقعیت تراز فرمی آنها

در شکلهای ۴–۱۴و۴–۱۵ ساختار نواری برای نانولولههای دوجداره دستهصندلی(n,n) (۵،۵۵) n از ۹تا ۱۴ و (n,n)((۹,۳)) از ۱۰ تا ۱۵ نشان داده شده است و در جدول ۴–۱۱ گاف نواری، موقعیت تراز فرمی و فاصله آن از نوار ظرفیت و رسانش آورده شده. همانطور که در این جدول مشاهده می شود، تمامی این نانولولههای دستهصندلی دارای گاف نواری غیر مستقیم بوده و مقدار این گاف نواری برای تمام ساختارها بیشتر از ۲ الکترن ولت میباشد که با افزایش قطر نانولولهها میزان گاف نواری هم افزایش پیدا می کند. این تغییرات ابتدا دارای شیب بیشتری بوده ولی در قطرهای بالاتر این روند کمتر می شود.



شکل۴–۱۸: تغییرات گاف نواری نانولولههای دوجداره بر حسب کایرالیته نانولوله خارجی برای نانولولههای زیگزاگ و دستهصندلی

همچنین در شکل ۴–۱۶و۴–۱۷ ساختار نواری برای نانولولههای دو جداره زیگزاگ نشان داده شده است و در جدول ۴–۱۲ گاف نواری موقعیت تراز فرمی و فاصله آن از نوار ظرفیت و رسانش آورده شده. که با توجه به شکل تمامی این نانولولهها دارای گاف نواری مستقیم میباشند. که همانند نتیجه مشاهده شده برای نانولولههای دستهصندلی، گاف نواری برای این دسته از نانولولهها نیز بزرگتر از ۲ الکترن ولت میباشد و همچنین منحنی گاف نواری بر حسب قطر در ابتدا یک روند صعودی داشته و با افزایش قطر نانولوله افزایش پیدا میکند و در قطرهای بالاتر ثابت و به مقدار گاف نانوصفحه AIN نزدیک میشود. در قطرهای بالاتر به دلیل اینکه برهم کنش درون جداری نانولولهها کمتر میشود گاف نانولوله دوجداره نیز تقریبا ثابت میشود. در شکل ۸۸–۴ تغییرات گاف نواری بر حسب کایرالیته نانولوله خارجی برای نانولولههای دوجداره زیگزاگ و دستهصندلی نشان داده شده است.

در نانولولههای خالص AIN گاف نواری برای ساختارهای دوجداره کمتر از گافنواری تکتک ساختارهای تشکیل دهنده آن میباشد، زیرا در نانولولههای دوجداره برهم کنش بین نانولوله داخلی و خارجی باعث ایجاد یک سری نوارهای اضافی اطراف تراز فرمی شده و در نتیجه باعث کاهش گاف نواری نانولوله دوجداره نسبت به نانولولههای تکجداره سازنده آن میشود. در شکل۴–۱۹ تغییرات ساختار نواری از تکجداره به دوجداره برای دو ساختار دستهصندلی (۱۲،۱۲))(۵،۵) و زیگزاگ (۱۲،۰) (۵،۵)) (۱۲،۰))(۵،۰)) به عنوان نمونه نشان داده شده است. گاف نواری محاسبه شده برای نانولوله (۵،۵) (۱۲،۱۲) به ترتیب ۹۲/۲۵۴ و ۹۲ ۳/۴۵ میباشد که نشاندهنده افزایش گافنواری با بزرگتر شدن قطر نانولولهها میباشد، در حالی که گاف نواری محاسبه شده برای مزدوج آنها یعنی قطر نانولولهها میباشد، در حالی که گاف نواری محاسبه شده برای مزدوج آنها یعنی کمتر شده است.که این تغییر گاف نواری ناشی از برهمکنشهای درونجداری نانولولههای دوجداره میباشد.



شکل۴–۱۹: تغییرات ساختار نواری نانولولهها از تکجداره به دوجداره برای نانولولههای زیگزاگ و دستهصندلی AIN.

### ۴-۴-۲: محاسبه چگالی حالتهای کلی (DOS) و جزیی (PDOS)

یکی دیگر از کمیتهای مهم برای بررسی خواص الکترونی، چگالی حالتها میباشد. چگالی حالتهای سیستم؛ به تعداد حالتهای الکترونی قابل دسترس در واحد حجم در واحد انرژی گفته میشود که با استفاده از آن چگونگی توزیع حالت های الکترون ها در نوار ظرفیت و رسانش مشخص میشود. در یک ترکیب چگالی حالتهای کل(DOS)، مجموعهای از چگالی حالتهای جزئی اتمهای تشکیل دهنده ی آن ترکیب، و چگالی حالتهای کلی یک اتم(PDOS)، مجموع چگالی حالتهای کلی جزئی اوربیتالهای آن اتم میباشد. با مقایسه چگالی حالتهای کلی اتم و چگالی حالتهای کلی ترکیب میتوان به نقش اتمها در شکل گیری نوارهای انرژی پی برد. همچنین از روی چگالی حالت-های جزئی اتمها میتوان سهم اوربیتالهای آنها در شکل گیری نوارهای انرژی اتمها انرژی اتمها را مشخص نمود. چگالی حالت های زیاد در یک نوار انرژی، بیانگر آن است که تعداد حالت های زیادی برای اشغال شدن توسط الکترونها قابل دسترس می باشند. در نتیجه زمانی که چگالی حالت ها صفر باشد، یعنی در نوار انرژی مورد نظر هیچ حالت قابل دسترسی برای اشغال وجود ندارد.

در نمودار DOS تراز فرمی با خطچین عمودی نشان دادهشدهاست که در سمت راست ترازفرمی، چگالی حالتهای نوار رسانش، و در سمت چپ ترازفرمی، چگالی حالتهای نوارظرفیت واقع شده اند. در دمای صفر مطلق چگالی حالتهای نوار ظرفیت کاملا پر و اشغال شده میباشد. در حالی که چگالی حالتهای نوار رسانش در این دما کاملا خالی و اشغال نشده میباشد. در مواد عایق و نیمرسانا چگالیحالتهای نوار ظرفیت و رسانش با گاف انرژی از هم جدا میشوند که برای مواد عایق این گاف انرژی بزرگتر میباشد. رسانش الکتریکی ساختارها به چگالی حالتهای اطراف تراز فرمی وابسته می باشد. تراز فرمی در همهی ساختارها دارای سطح انرژی صفر میباشد.

چگالی حالتهای کلی شش ساختار از نانولولههای دوجداره دسته صندلی و شش ساختار از نانولوله-های دوجدارهی زیگزاگ نیترید آلومینیوم به تفکیک نانولولههای سازندهی آنها در شکلهای ۴-۲۰،



شکل ۴-۲۰ :چگالی حالتهای کلی(DOS) نانولولههای تکجداره و دوجداره دسته صندلی خالص AIN



شکل ۴-۲۱ :چگالی حالتهای کلی(DOS) نانولولههای تکجداره و دوجداره دسته صندلی خالص AIN

بر اساس نمودارهای DOS نشان داده شده برای تمام ساختارهای دسته صندلی در شکل های ۴-۲۰ و۴–۲۱ با افزایش قطر نانولوله گاف نواری نیز افزایش مییابد. گاف نواری بدست آمده برای نانولولههای دوجداره از گاف نواری تک تک نانولولههای تشکیل دهنده آنها کمتر میباشد. که با نتیجهی بدست آمده برای ساختارهای نواری در قسمت قبل مطابقت دارد.



شکل ۴-۲۲ :چگالی حالتهای کلی(DOS) نانولولههای تکجداره و دوجداره زیگزاگ خالص AIN



شکل ۴-۲۳ : چگالی حالتهای کلی(DOS) نانولوله های تک جداره و دوجداره زیگزاگ خالص AIN

بر اساس نمودارهای DOS نشان داده شده برای تمام ساختارهای زیگزاگ در شکل های ۴-۲۲ و ۴-۲۳ نیز همانند نانولولههای دسته صندلی، با افزایش قطر نانولوله، گاف نواری افزایش مییابد. و همچنین گاف نواری بدست آمده برای نانولولههای دوجداره از گاف نواری تک تک نانولولههای تشکیل دهنده آنها کمتر میباشد. با استفاده از چگالی کلی هر اتم میتوان پی برد که هر یک از اتمهای تشکیل دهنده به چه اندازه در شکل گیری نوار انرژی سهیم هستند.



شکل۴-۲۴: سهم چگالی حالتهای اتمهای AI وN در نوار انرژی برای نانولولههای دوجداره دستهصندلی خالص AIN



شکل۴-۲۵: سهم چگالی حالتهای اتمهای Al و N در نوار انرژی برای نانولولههای دوجداره زیگزاگ خالص AlN

در هر دو شکل ۴-۲۴و ۴-۲۵و ۶۸مچگالی حالتهای تفکیکی برای هر یک از اتمهای Al و N در نوار ظرفیت و رسانش برای نانولولههای دوجداره خالص AlN نشان داده شده است. همان گونه که برای هر دو دسته نانولوله مشاهده می شود هر دو نوع اتم در دو نوار ظرفیت و رسانش سهمی در ایجاد چگالی حالتها دارند اما طبق نمودارها، برای تمامی ساختارهای دسته صندلی و زیگزاگ در نوار رسانش سهم اتم Al در ایجاد چگالی حالتهای کلی بیشتر از اتم N می باشد و در مقابل سهم اتم N در شکل گیری نوار ظرفیت بیشتر از اتم Al است.

در شکل ۴–۲۶و۴–۲۷ برای مشخصتر شدن سهم اوربیتالی تک تک اتمها در شکل گیری چگالی حالتهای ایجاد شده در نوارها چگالی حالتهای جزئی برای دو اتم AI و N مربوط به نانولولههای دستهصندلی و زیگزاگ خالص رسم شده است. برای هر دو دسته نانولوله دستهصندلی و زیگزاگ بیشترین سهم در چگالی حالتها در نوار ظرفیت مربوط به اوربیتال ۲۲ اتم N و سپس اوربیتال ۳ اتم AI و اندکی نیز مربوط به اوربیتالهای ۳۶ اتم AI و ۲۶ اتم N میباشد. در نوار رسانش نیز بیشترسن سهم در چگالی حالتها به ترتیب مربوط به اوربیتال ۳۵ اتم N میباشد. در نوار رسانش نیز ۲۶ اتم N میباشد. در نوار ظرفیت اوربیتال ۳۵ اتم AI و ۲۶ اتم N میباشد. در نوار رسانش نیز بیشترسن سهم در چگالی حالتها به ترتیب مربوط به اوربیتال ۳۵ اتم AI میباشد. در نوار رسانش نیز رسانش بسیار کم میباشد و میتوان نتیجه گرفت که این حالتها در ناحیه مغزی توزیع شدهاند.



شکل۴-۲۶: چگالی حالتهای جزئی اتمهای Al و N در نانولولههای خالص دستهصندلی



شکل۴-۲۷: چگالی حالتهای جزئی اتمهای AI و N در نانولولههای خالص زیگزاگ

4-4 بررسی خواص ساختاری و الکترونی نانولولههای AIN آلایش یافته با اتم Ga

ناخالصی سازی به عنوان راهی برای تغییرات ساختاری، شیمیایی یا فیزیکی به جهت کاربردی تر کردن نانو ساختارها در نظر گرفته می شود. کنترل خواص فیزیکی و شیمیایی از یک طرف و تغییرات این خواص از طرف دیگر در کاربردهای نانولوله ها از اهمیت بسیاری برخوردار می باشد. به همین جهت آلایش نانوساختارها به منظور ایجاد این تغییرات شیوه ای عملی در رسیدن به این هدف می باشد.

نوع آلایش از نظر الکترون دهندگی یا الکترون گیرندگی آلایش، میتواند به نوبه خود تغییرات متفاوت فیزیکی ایجاد کند. ما در این بخش با افزودن ناخالصی به نانولولههای دوجداره نیترید آلومینیوم پایداری و خواص الکترونی این نانولولهها را مورد بررسی قرار میدهیم. به این منظور در تمامی نانولولههای مورد بررسی یک اتم Ga جایگزین یک اتم AI با شرایط مشابه(از نظر مکان قرار گیری) شده است. اتم Ga یک بار در لولهی داخلی و یک بار در لولهی خارجی جایگذاری شده است. برای بالا رفتن دقت محاسبات در این قسمت از پارامترهای بهینه شده در بخشهای قبلی استفاده شده است.

#### ۴–۵–۱ پارامترهای ساختاری نانولولههای دوجداره دستهصندلی AIN آلایش یافته با اتم Ga

به منظور بررسی تغییرات ناشی از آلایش نانولولههای دوجداره دسته صندلی نیترید آلومینیوم در این بخش دو خانواده از نانولولههای دوج داره دسته صندلی (n،n) (۵،۵)، با ۱۶–۹=nو و همچنین (n،n) (۶،۶)، با ۱۶–۱۰=n با اتم گالیم آلایش داده شدهاند. آلایش به این صورت انجام گرفت که ابتدا به عنوان نمونه در نانولوله (۱۱،۱۱) (۵،۵۵) یک اتم گالیم را ابتدا به جای اتم آلومینیم و سپس به جای نیتروژن قرار دادیم انرژی تشکیل به دست آمده برای این دو حالت به ترتیب ۸/۱۳۳۲۲ و به جای نیتروژن قرار دادیم انرژی تشکیل به دست آمده برای این دو حالت به ترتیب ۹/۱۳۳۲۲ و کمتر و در نتیجه پایدارتر شد پس در کل محاسبات اتم گالیم به جای آلومینیم انرژی تشکیل نانولوله (۹،۹) (۵،۵) و (۱۰،۱۰) (۵،۰۱) (۶،۶) با اختلاف کایرالیته ۴ ،که در حالت خالص فروپاشیدند، پس از ایجاد ناخالصی هم در لولهی داخلی و هـم در لولـهی خـارجی نیـز فروپاشـی کردنـد. دو نانولولـهی (۱۰،۱۰) (۵،۵۵) و (۱۱،۱۱) (۶،۶) با اختلاف کایرالیتهی ۵، که در حالت خالص پایدار بوده بعد از آلایش در نانولولهی داخلی باز هم حالت پایدار خود را حفظ کرده در حالی که بعد از آلایش در لولهی خارجی این دو ساختار شکل لوله ای خود را از دست داده و فروپاشیدند. ساختارهای دیگر با اخـتلاف کایرالیتهی ۶ به بالا در همهی حالتهای خالص و آلایش داخلی و خارجی پایداری خود را حفظ می-کنید. شکل ۴–۲۸ و۴–۲۹ نمایی شماتیک از ساختارهای مورد بررسی را نشان میدهد



شکل۴–۲۸: ساختارهای دوجداره دستهصندلی (n،n)@(۵،۵) بهینه شده آلایش یافته با اتم Ga در لوله داخلی و خارجی


شکل۴–۲۹: ساختارهای دوجداره دستهصندلی (n،n)@(۶،۶) بهینه شده آلایش یافته با اتم Ga در لوله داخلی و خارجی

برای تعیین پارامترهای ساختاری انجام شده، محاسبات در این قسمت روی یک سلول واحد از نانولولههای دوجداره آلایش یافته (۱۱،۱۱)(۵٬۵۵) شامل ۶۴ اتم ونانولولهی دوجدارهی آلایش یافته (۱۲،۱۲)(۵٬۹۶) شامل ۷۲ اتم انجام گرفته است. نتایج حاصل از انجام این محاسبات در جدول ۶-۱۳ آورده شده است. همان گونه که در جدول۴-۱۳ مشاهده میشود پارامتر ۲ (ثابت شبکه) در حالت آلایش داخلی افزایش پیدا کرده است در صورتی که در حالت آلایش خارجی تغییرات چشم گیری صورت نگرفته است. فاصله درون جداری برای هر دو نانولولهی مورد بررسی در حالت آلایش داخلی حدود ۸/۲۰ کاهش یافته است.

نانولوله دوجداره پايدار	تعداد	پارامتر Å c			Å	سله درون جداری ،	فاص
دستەصندلى	اتمها	خالص	آلایش داخلی	آلايش	خالص	آلایش داخلی	آلايش خارجى
				خارجي			
(۵.۵)@(۱۱.۱۱)	54	٣/١۶٨٢٢٣	r/17771r	٣/١٧٠٠٩٠	۵/۳۱۱	۵/۲۳۶۲	۵/۲۹۷۲۵
(5.5)@(17.17)	۲۷	8/189808	٣/١٨٠٢٣٩	٣/١٧٠٧٨۴	۶/٩٠۵۶۵	۶/۸۳۳۷۵	8/9585
(8.8)@(17.17)	۲۲	٣/١۶٩٧۴٣	37/178548	٣/١۶٨٧١۶	۵/۳۵ ۱	۵/۲۹۳۶	۵/۳۹۹۸۵
(8.8)@(14.14)	۸.	٣/١٧٣٨٦١	٣/١٧٧٣۶	٣/١٦٩٧۴۵	۶/۹۵۸۱۵	۶/۸۹۵۳	٧/٠ ٤٠۵

جدول۴–۱۳: پارامترهای ساختاری بهینه شده نانولولههای دوجداره دستهصندلی آلایش یافته AIN

برای بررسی پایداری نانولولههای آلایش یافته دو دسته از نانولولههای دسته صندلی از خانواده (۱٬۸)@(۵٬۵) و (۱٬۸)@(۶٬۶) انتخاب و انرژی تشکیل آنها محاسبه شد. رابطه استفاده شده برای بررسی پایداری نانولولههای آلایش یافته به صورت زیر میباشد[۴۰].

 $E_{FOR} = E(doped \ DWNT) - E(pure \ DWNT) - nE(Ga) + nE(Al) \ (f-f)$ 

E(pure DWNT) انرژی کل مربوط به نانولوله دوجداره آلایش یافته و E(doped DWNT) که (doped DWNT) که جانشین اتمهای Al انرژی کل مربوط به نانولوله دوجداره خالص میباشد. n تعداد اتمهای Ga که جانشین اتمهای Al انرژی کل مربوط به نانولوله دوجداره خالص میباشد. n تعداد اتمهای Ga که جانشین آمهای Al انرژی کل برای اتمGa که جانشین آمهای Al میباشد. n تعداد اتمهای Ga که جانشین آمهای Al انرژی کل برای اتم



شکل ۴–۳۰: تغییرات انرژی تشکیل برحسب کایرالیته برای حالت آلایش داخلی و خارجی نانولولههای دوجداره AIN (۶،۶)@(n,n) دسته صندلی

نانولولەھاى دوجدارە	انرژی کل آرایش	انرژی کل آلایش خارجی	انرژى تشكيل الايش	انرژی تشکیل آلایش
دستەصندلى	داخلی		داخلی	خارجى
(۵.۵)@(٩.٩)	-9187/584145	-9187/781788	فروپاشی کرد	فروپاشی کرد
$(\Delta \cdot \Delta) \widehat{a} (1 \cdot \cdot 1 \cdot)$	-9134/040111	-9,17,176,102	4/888.82	فروپاشی کرد
(۵.۵)@(۱۱.۱۱)	-1•491/098874	-10491/220402	4/032211	4/21180
(2.2)@(17.17)	-11148/+02809	-11148/100922	4/4.2211	4/36109
(2.2)@(18.18)	-118+8/889898	-111.47/228222	4/390279	4/201111
(2.2)@(14.14)	-17409/891779	-18409/418986	4/38881	۴/۳۴۴۹۸۹
(۵.۵)@(۱۵.۱۵)	-17110/04777	-18110/080401	۴/۳۶۶۰۵	4/84210
(۵.۵)@(19.19)	-13771/4•773	-	4/37 • 224	-
$(\mathcal{F},\mathcal{F}) \widehat{a} (1 \cdot . 1 \cdot )$	-1•494/898479	-1•497/208478	فروپاشی کرد	فروپاشی کرد
(8.8)@(11.11)	-11148/818180	-11149/140080	4/821101	فروپاشی کرد
(8.8)@(17.17)	-111.000/07907	-111.07/199714	4/241924	4/2020
(8.8)@(18.18)	-1248./.21047	-1848+/+84190	4/4	۴/۳۵۸۱۹۱
(8.8)@(14.14)	-18110/261628	-13110/22221	۴/۳۵۹ <i>۹۶۶</i>	4/342214
(8.8)@(10.10)	- 1 377 1/83878 1	-18771/828•72	4/37442	4/342144
(8.8)@(18.18)	-14427/471200	-14421/499012	4/389 • 94	4/34 • 124

جدول۴-۴۱: انرژی کل و انرژی تشکیل نانولولههای دوجداره دسته صندلی AIN آلایش یافته

در جدول ۴–۱۴ انرژی کل و انرژی تشکیل برای آلایش داخلی و خارجی نانولوله های دوجداره دسته-صندلی نیترید آلومینیوم آورده شده که با توجه به جدول با افزایش قطر نانولوله انرژی تشکیل برای هر دو حالت آلایش داخلی و خارجی کمتر میشود. و در حالت آلایش داخلی نانولولههای (۱۳،۱۳) (۵،۵۵) و (۱۴،۱۴) (۶،۶۶) با اختلاف کایرالیته ۸ و فاصله درون جداری به ترتیب ۸۵۸۳۷۵Å و ۸۶۸۹۵۴۸۶ ، دارای کمترین انرژی تشکیل در نتیجه پایدارترین نانولوله در این دسته میباشد در حالی که در حالت آلایش خارجی نانولولههای (۱۱،۱۱) (۵،۵۵) و(۱۲،۱۲) ۸۰٫۹۱۴ و ۸۵۹۹۵۶ ، دارای کمترین انرژی تشکیل در نتیجه پایدارترین نانولوله در این دسته میباشد در حالی که در حالت آلایش خارجی نانولولههای (۱۱،۱۱) (۵،۵۵) و(۱۲،۱۲) ۸۰٫۹۱۴ و ۸۵۹۹۹۵۶ ماری و ۲۰٫۹۷۱۶ ماری اندولولههای (۱۱،۱۱) (۵٬۵۵) و(۱۲،۱۲) ۸۰٫۹۱۴ و ۲۰٫۷۱۱ ماری در تاین دسته با دارای کمترین مقدار میباشد در حالی که در حالت آلایش خارجی نانولولههای (۱۱،۱۱) (۵٬۵۸) و(۱۲۰۱) ۸۰٫۹۱۴ و ۸۵۹۹۹۵ ماری در تیجه پایدارترین نانولوله در میان این دسته از نانولولههای نیترید آلومینیوم می-اختلاف کایرالیته ۶ و فاصله درون جداری به ترتیب ۸۵۲۹۷۲۵ و ۸۵۹۹۹۸۵ دارای کمترین مقدار انرژی تشکیل و در نتیجه پایدارترین نانولوله در میان این دسته از نانولولههای نیترید آلومینیوم می-اشد. تغییرات انرژی تشکل بر حسب کایرالیته برای نانولوله های دوجداره دسته صندلی نیترید آلومینیوم برای دو حالت آلایش داخلی و خارجی در شکل ۴–۳۰ آورده شده است. با توجه به این شکل مشاهده می شود که با افزایش قطر نانولوله خارجی تغییرات انرژی تشکیل تقریبا ثابت و به مقدار انرژی تشکیل نانوصفحه AIN نزدیک می شود.

F-۵-۴ پارامترهای ساختاری نانولولههای دوجداره زیگزاگ AIN آلایش یافته با اتم Ga

در این بخش سه ساختار دوجداره از دسته (۱۰،۰) (۵۰۰) و سه ساختار دوجداره از دسته (۱۰،۰) (۲۰۰۹) با اتم گالیم آلایش داخلی و خارجی داده شدهاند. شکل ۴–۳۱ و۴–۳۲ نمای شماتیک از این ساختارها رانشان میدهد. همان گونه که در شکل مشاهده میشود، دو ساختار (۲۰،۱) (۵،۰) (۵،۰) (۲۰،۱) (۲۰،۱) که در حالت خالص خود فروپاشیده بودند پس از ایجاد ناخالصی داخلی و خارجی باز هم از حالت نانولولهای خود خارج شده و فروپاشی کردند. دو ساختار (۲۰،۱) (۵،۰) (۲۰،۱) (۲۰،۱) (۲۰،۱) با اختلاف کایرالیته ۸ که در حالت خالص پایدار بودند پس از اضافه کردن ناخالصی و به نانولولهی خارجی باز هم پایدار بوده ولی در حالت ایجاد ناخالصی درونی فروپاشی کردند. دانولوله-به نانولولهی خارجی باز هم پایدار بوده ولی در حالت ایجاد ناخالصی درونی فروپاشی کردند. نانولوله-آلایش داخلی و خارجی حفظ میکنند.



شکل۴–۳۱: ساختارهای دوجداره زیگزاگ (۱،۰)@(۱،۰) بهینه شده آلایش یافته با اتم Ga در لوله داخلی و خارجی



شکل۴-۳۲: ساختارهای دوجداره زیگزاگ (n،۰)@(n،۰) بهینه شده آلایش یافته با اتم Ga در لوله داخلی و خارج

نانولولەھاى	تعداداتم	ثابت شبکه Å c				له درونجداری <b>لهٔ</b>	فاص
دوجداره زیگزاگ		خالص	آلایش داخلی	آلايش خارجي	خالص	آلایش داخلی	آلايش خارجي
(۵)@(۱۵)	٨٠	۵/۴۳۹۷۷۹	۵/۴۴۸۳۳۷	۵/۴۳۸۸۵۱	۵/۰۸۶	4/98370	۵/۰۶۶۹
(۵.・)@(۲۱.・)	1.4	۵/۴۵۶۹۰۹	۵/۴۶ <b>۷</b> ۷۹۹	۵/۴۵۱۳۵۵	Y/۹۸۸۸۵	٧/٨٩٨۶۵	Y/१V१ I
(8)@(18)	~~	0/447749	۵/۴۵۵۷۳۰	۵/۴۴۴۲۷۲	0/1400	۵/• ۹۶۲	۵/۱۴۳۲۵
(۶.•)@(۲۲.•)	117	0/482210	۵/۴۷۱۳۷۵	۵/۴۵۶۸۵۸	٨/٠ ٧٢٨	٨/٠ ٣ ٣ ٦ ٩	٨/٠ 498

جدول۴–۱۵: پارامترهای ساختاری بهینه شده نانولولههای دوجداره زیگزاگ آلایش یافته AIN

فاصله درون جداری و ثابت شبکه برای ساختارهای دوجداره زیگزاگ (۱۴،۰) (۵،۰) و (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۵۰

در جدول ۴–۱۶ انرژی کل و انرژی تشکیل نانولوله دوجداره زیگزا<sup>ی</sup> نیتریدآلومینیوم در هر دو حالت آلایش داخلی و خارجی آورده شده است. همان گونه که در جدول مشاهده میشود با بزرگتر شدن قطر نانولولهها هم در آلایش داخلی هم در آلایش خارجی انرژی تشکیل کاهش پیدا میکند. در حالت آلایش داخلی نانولولههای زیگزا<sup>ی</sup> (۲۱۰۰) (۵۰۰۵) و (۲۲۰۰) (۴۰۰۹) با اختلاف کایرالیته ۱۶، و فاصله درون جداری به ترتیب ۸۸۸۶۵۵<sup>۸</sup> و ۸۵۰۲۴۶۵۸ و در حالت آلایش خارجی نانولولههای فاصله درون جداری به ترتیب ۸۸۶۶۵<sup>۸</sup> و ۸۸۰۶۴۶۹۸ و در حالت آلایش خارجی نانولولههای و (۱۵۰۰) (۵۰۰۰) و (۱۶۰۰) (۲۰۰۰) با اختلاف کایرالیته ۱۰ و فاصله درون جداری به ترتیب ۸۶۶۹۹۸ و ۸۸۰۶۴۹۶<sup>۸</sup>، دارای کمترین انرژی تشکیل و در نتیجه پایدارترین نانولوله در دسته خود میباشند. تغییرات انرژی تشکیل بر حسب کایرالیته برای این نانولوله در حالت آلایش داخلی و خارجی در شکل

نانولولەھاي دوجدارە	انرژی کل آلایش داخلی	انرژی کل آلایش خارجی	انرژی تشکیل آلایش	انرژی تشکیل آلایش
زیگزاگ			داخلى	خارجى
(۵.+)@(١٢.+)	-11181/871784	-1112•/787842	فروپاشی کرد	فروپاشی کرد
(2)@(18)	-111.4.4/1940.4	-11798/909790	فروپاشی کرد	4/298.90
(2)@(14)	-18400/•49•99	-12400/2418.2	4/4.0422	4/2088
(۵.・)@(۱۵.・)	-18111/VQX988	-18111/928820	4/84888	۴/۱۷۷۱۷۸
(۵.+)@(١۶.+)	- 1 3788/37001 1	-13788/401701	4/202908	4/177918
(Δ··)@(1Y··)	-14424/322912	-14424/081808	4/172244	4/192882
(۵.۰)@(۱۸.۰)	-10.1.4./40132	-10.1.4./297248	4/122202	4/12220
(۵.+)@(١٩.+)	-12726/222	-12726/226876	4/124291	4/18282
$(\Delta \cdot \cdot ) \widehat{a} (7 \cdot \cdot \cdot )$	-18892/12886	-	4/171829	-
(a.·)@(r 1.·)	-17+47/99788	-	4/119290	-
(۵.+)@(۲۲.+)	-177•٣/٨۶٨۵٩	-	4/12+414	_
(۶.•)@(١٣.•)	-18466/98889	-17488/111747	فروپاشی کرد	فروپاشی کرد
(۶)@(14)	-18118/0800	-1311/2•2028	فروپاشی کرد	۴/۲۳۷۷ • ۳
(۶)@(١۵)	-18787/488791	-18787/874778	4/42299	4/12291
(۶.+)@(١۶.+)	-14474/74•7•4	-14474/447777	4/37428	4/14122
(۶.+)@(۱۷.+)	-10•1•/940131	-10+11/+03471	4/27776	4/18 • 284
(۶)@(١٨)	-10737/107097	-15737/188979	4/198718	4/18.978
(۶.•)@(١٩.•)	-18898/•188•0	-18897/98729	4/10222	4/11878
$(\mathcal{P},\cdot) \widehat{a}(\mathcal{T}\cdot,\cdot)$	-18•48/24182	-	4/129292	-
(۶.・)@(۲۱.・)	-177•4/879137	-	4/1388 • 2	-
(%.*)@(**.*)	-1886./00.02	-	4/120422	-
(۶.•)@(۲۳.•)	-19•18/41•94	-	4/148478	-

جدول۴–۱۶ : انرژی کل و انرژی تشکیل نانولولههای دوجداره زیگزاگ AIN آلایش یافته



شکل ۴–۳۳: تغییرات انرژی تشکیل برحسب کایرالیته برای حالت آلایش داخلی و خارجی نانولولههای دوجداره زیگزاگ (۸،۰) (۵،۰) AIN

Ga بررسی خواص الکترونی نانولولههای دوجداره دستهصندلی AIN آلایش یافته با اتم 4-۵-۴ ساختار نواری نانولولههای دوجداره دستهصندلی AIN آلایش یافته

در این بخش ساختار نواری نانولولههای دوجداره دستهصندلی نیترید آلومینیوم آلایش یافته با اتم گالیم بررسی شده است. در شکل ۴–۳۴ و۴–۳۵ ساختار نواری دو نانولوله خالص (۱۱،۱۱) (۵،۵۵) و (۵،۵۱) (۵،۵۵) از دسته(۱۰،۱۳) (۵،۵۵) و دو ساختار (۱۲،۱۲) (۶،۶۶) و (۱۳،۱۳) (۶،۶۶) از دسته (۱۸،۱) (۵،۶۶) به همراه ساختار آلایش یافته در لوله داخلی و خارجی آنها رسم شده است. با توجه به شکل ۴–۳۴ و۴–۳۵ و جدول ۴–۱۷ در تمام نانولولههای دستهصندلی دوجداره بعد از جایگزین کردن اتم گالیم به جای اتم آلومینیوم ساختار نواری نسبت به حالت خالص تغییر یافته است. در هر دو آلایش



شکل ۴-۳۴: ساختار نواری نانولولههای دوجداره دستهصندلی (n،n)@(۵،۵) خالص و آلایش یافته با اتم Ga

در جدول۴–۱۷ موقعیت تراز فرمی و تغییرات گاف نواری نانولوله های دوجداره دسته صندلی AIN خالص و آلایش یافته با اتم Ga آورده شده است. طبق نتایج جدول، موقعیت تراز فرمی پس از ایجاد آلایش داخلی در تمام ساختارهای مورد بررسی نسبت به حالت خالص به سمت انرژی های پایین تر میل کرده است. همچنین موقعیت این تراز پس از ایجاد آلایش خارجی در تمام ساختارها به جز نانولوله (۱۱،۱۱) (۵،۵۵) نیز، نسبت به حالت خالص به سمت انرژی های بالاتر میل می کند.



شکل ۴-۳۵: ساختار نواری نانولولههای دوجداره دسته صندلی (n،n) (۶،۶) خالص و آلایش یافته با اتم Ga

نانولولههای دوجداره	موقعیت تراز فرمی((ev)			گاف نواری (ev)		
پايدار دستەصندلى	خالص	آلایش داخلی	آلايش خارجي	خالص	آلایش داخلی	آلايش خارجي
(۵.۵)@(۱۱.۱۱)	-4/299.1084	-4/24471841	-۴/۳・۸۹۶۵۷۴	८/४९६१८	7/44084	7/44084
(۵.۵)@(17.17)	-4/18•48•17	-4/18.8.47	-4/•894•748	۲/٩٨٠۶٣	2/4720	7/41212
(6.6)@(17.17)	-4/18229118	-4/22199228	-4/12420080	7/41212	2/4720	2/29269
(۶.۶)@(1٣.1٣)	-٣/٩٩٣٠۵٠۶۵	-4/+41278+1	-٣/٩٣•٣•٧٧٣	۳/۰۵۷۰۵	۲/۷۵۱۳۵	٢/٧٨٩۴٧

جدول۴–۱۷ : گاف نواری و موقعیت تراز فرمی نانولولههای دوجداره دسته صندلی آلایش یافته AIN

4-۵-۴ بررسی چگالی حالتهای نانولولههای دوجداره دستهصندلی AIN آلایش یافته با اتم Ga

در شکل ۴–۳۶ چگالی حالتهای تفکیکی اتمهای N، Al وGa در نانولوله دوجداره دسته صندلی آلایش یافته، هم در لوله داخلی و هم در لوله خارجی، برای ساختار (۱۳،۱۳))((۶،۶) رسم شده است. قسمت مربوط به آلایش در لوله خارجی نشان میدهد که در نوار رسانش، سهم اتمهای Al بیشتر از اتمهای N و Ga، ودر نوار ظرفیت سهم اتمهای N بیشتر از اتمهای Al و Ga میباشد. در قسمت مربوط به آلایش در لوله داخلی این روند نیز تکرار شده و نشان میدهد سهم اتمهای Al در نوار رسانش و اتمهای N در نوار ظرفیت بیشتر از سایر اتم ها میباشد. چگالی حالتهای کل ساختارها، ناشی از هیبریداسیون اوربیتالی بین اتمهای Al و N میباشد و سهم اتم Ga به عنوان یک اتم میهمان در شکل گیری چگالی حالتها بسیار اندک است.



شکل۴-۳۶: نمودار چگالی حالتها در نانولوله دوجداره دستهصندلی(۱۳۰۱۳)@(AIN (۶،۶) آلایش یافته

در شکل ۴–۳۳ چگالی حالتهای جزئی اتمهای IA، N و Ga در نانولوله دوجداره دسته صندلی آلایش یافته (۱۳،۱۳))((۶.۶) رسم شده است. قسمت الف مربوط به آلایش داخلی و قسمت ب مربوط به آلایش خارجی ساختارها میباشد که نشان میدهد، هم برای آلایش در لوله داخلی و هم آلایش در لوله خارجی بیشترین سهم در شکل گیری چگالی حالتها در نوار ظرفیت، مربوط به اوربیتال ۲۲ اتم N و سپس ۳۳ اتم AI میباشد. اوربیتالهای ۳۶ اتم IA و ۲۶ اتم N سهم اندکی در شکل گیری چگالی حالتها در نوار ظرفیت دارند که سهم اتم AI از اتم N بیشتر می باشد. مطابق شکل گیری چگالی حالتها در نوار ظرفیت دارند که سهم اتم AI از اتم N بیشتر می باشد. مطابق مطابق با شکل، اوربیتالهای اتم Ga در تشکیل چگالی حالتهای نوار ظرفیت نقش بسیار اندکی ایفا می کنند. مطابق با شکل، بیشترین سهم در تشکیل چگالی حالتهای نوار ظرفیت نقش بسیار اندکی ایفا می کنند. مطابق با شکل، بیشترین سهم در تشکیل چگالی حالتهای نوار ظرفیت نقش بسیار اندکی ایفا می کنند. مطابق با شکل، بیشترین سهم در تشکیل چگالی حالتهای و ۶۶ اتم Ga در شکل گیری چگالی حالتهای جزئی در نوار رسانش نقشی اندکی دارند بطوریکه فقط اوربیتال ۲۹ اتم Ga تا حدی قابل محاسبه در چگالی حالتها میباشد و اوربیتال ۲۵ می Ga قابل محاسبهای ندارد.



شکل۴–۳۷: نمودار چگالی حالتهای جزئی اتمهای Ga,N,AI در نانولوله دوجداره دستهصندلی(۱۳،۱۳)@(۶،۶) آلایش یافته الف) آلایش داخلی ب) آلایش خارجی

Ga بررسی خواص الکترونی نانولولههای دوجداره زیگزاگ AIN آلایش یافته با اتم Ga
 ۹-۵-۴ ساختار نواری نانولولههای دوجداره زیگزاگ AIN آلایش یافته

در این بخش ساختار نواری نانولولههای دوجداره زیگزاگ نیترید آلومینیوم آلایش یافته با اتم گالیم بررسی شده است. در شکل ۴–۳۸ و ۴–۳۹ ساختار نواری دو نانولوله خالص (۱۴،۰)(۵،۰۵) و (۱۵،۰)(۵،۰۵) از دسته (۱۸،۰)(۵،۰۵) و دو ساختار (۱۵،۰)(۶،۰۹) و (۱۶،۰)((۶،۰)( (۱۵،۰)(۵،۰۹)) به همراه ساختار آلایش یافته در لوله داخلی و خارجی آنها رسم شده است. با توجه به شکل ۴–۳۸ و ۴–۳۹ و جدول ۴–۱۸ در تمام نانولولههای زیگزاگ دوجداره بعد از جایگذین کردن اتم گالیم به جای اتم آلومینییوم ساختار نواری نسبت به حالت خالص تغییر یافته است. در هر دو آلایش داخلی و خارجی گاف نواری برای تمامی ساختارها نسبت به حالت خالص کاهش پیدا کرده است. در جدول۴-۱۸ موقعیت تراز فرمی و تغییرات گاف نواری نانولوله های دوجداره زیگزاگ AIN خالص و آلایش یافته با اتم Ga آورده شده است. طبق نتایج جدول، موقعیت تراز فرمی پس از ایجاد آلایش داخلی در تمام ساختارهای مورد بررسی به جز نانولوله (۱۶۰۰) (۶۰۰) نسبت به حالت خالص به سمت انرژی های پایین تر میل کرده است. همچنین موقعیت این تراز پس از ایجاد آلایش خارجی در تمام



شکل۴-۳۸: ساختار نواری نانولولههای دوجداره زیگزاگ (n،۰)@(۵،۰) خالص و آلایش یافته با اتم Ga



شکل۴-۳۹: ساختار نواری نانولولههای دوجداره زیگزاگ (۳،۰) (۵،۰) خالص و آلایش یافته با اتم Ga

نانولولەھاي		وقعیت تراز فرمی(ev)	مو	گاف نواری (ev)		
دوجداره پايدار	خالص	آلایش داخلی	آلايش خارجي	خالص	آلایش داخلی	آلايش خارجي
زیگزاگ						
(۵.・)@(۱۴.・)	-۴/۶۳۸۲۳۲۴۸	-۴/۶۹۸۳۶۷۴۲	-4/2122112.	۲/۱۳۴۶	1/9818	۲/۰۰۸۷
(۵)@(۱۵)	-۴/۲۲۹۳۱۵۵۴	-۴/۲۶۹۳۵۹・۹	-۴/۲۸۲۱۵۰۵۷	7/7808	۲/• ۹۵۴	۲/۱۵۲
(۶)@(۱۵)	-۴/۶۵۵۸۳۶۸۳	-۴/۶۹۴۵۹۸۴۵	-4/72221•28	٢/٢٧٣١	۲/۱۴۰۸	۲/۱۵۶۹
(۶)@(١۶)	-۴/۳۱۵۲۰۸۴۹	-4/20190228	-4/3442478	2/4114	۲/۲۹۰۷	2/2746

جدول۴-۱۸: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی نانولولههای دوجداره زیگزاگ آلایش یافته AIN

4-۵-۵-۲ بررسی چگالی حالتهای نانولولههای دوجداره زیگزاگ AIN آلایش یافته با اتم Ga

در شکل ۴-۴۰ چگالی حالتهای تفکیکی اتمهای N، AI وGa در نانولوله دوجداره زیگزاگ آلایش یافته، هم در لوله داخلی و هم در لوله خارجی، برای ساختارهای (۱۸،۰) (۵،۰)، (سم شده است. مطابق با قسمت مربوط به آلایش در لوله خارجی، در نوار رسانش سهم اتمهای AI در شکل گیری چگالی حالتها بیشتر از اتمهای N و Ga، ودر نوار ظرفیت سهم اتمهای N بیشتر از اتمهای AI و Ga میباشد. همچنین این روند در قسمت مربوط به آلایش در لوله خارجی ساختارها نیز تکرار شده و نشان میدهد سهم اتمهای AI در نوار رسانش و اتمهای N در نوار ظرفیت بیشتر از سایر اتمها می-ایشان میدهد سهم اتمهای AI در نوار رسانش و اتمهای N در نوار ظرفیت بیشتر از سایر اتمها می-ایشان میدهد سهم اتمهای AI در نوار رسانش و اتمهای N در نوار ظرفیت بیشتر از سایر اتمها می-ایشان میدهد سهم اتمهای AI در نوار رسانش و اتمهای X در نوار ظرفیت بیشتر از سایر اتمها می-ایشان میدهد سهم اتمهای AI در نوار رسانش و اتمهای X در نوار ظرفیت بیشتر از سایر اتمها می-



شکل۴-۴۰: نمودار چگالی حالتها در نانولوله دوجداره زیگزاگ (۱۸،۰)@(۱۸،۰ آلایش یافته

در شکل ۴-۴ چگالی حالتهای جزئی اتمهای N، Al و Ga در نانولوله دوجداره زیگزاگ آلایش یافته (۱۸،۰)@(۶،۰) رسم شده است. مطابق با شکل۴-۴۱ هم برای آلایش درلوله داخلی و هم لوله خارجی، اوربیتالهای ۳p اتم Al و ۲p اتم N به ترتیب بیشترین سهم را در شکلگیری چگالی حالتها در نوار رسانش دارند و سهم اوربیتالهای ۳s اتم Al و ۲s اتم N بسیار کم است. در نوار ظرفیت عکس نوار رسانش اتفاق میافتد و بیشترین سهم در شکل گیری چگالی حالتها مربوط به اوریتال ۲۲ اتم N و سپس اوربیتال ۳۳ اتم Al میباشد. اوربیتالهای اتم Ga سهم قابل ملاحظه ای در شکل گیری چگالی حالتها هم در نوار ظرفیت و هم در نوار رسانش ایفا نمی کنند.



AIN (۶،۰)@(۱۸،۰) نمودار چگالی حالتهای جزئی اتمهای Ga,N,AI در نانولوله دوجداره زیگزاگ(۱۸،۰)@(۱۸،۰) آلایش یافته الف) آلایش داخلی ب) آلایش خارجی

۴-۶ بررسی خواص ساختاری و الکترونی نانولولههای دوجداره AIN کپسوله<sup>۱</sup> شده با اتم Ga در این بخش بعد از قرار دادن یک اتم Ga در مرکز محور نانولوله های نیترید آلومینیوم (کپسوله کردن) به بررسی پایداری و خواص الکترونی این نانولوله ها پرداخته شد. نانولولههای مورد بررسی شرامل نانولول های زیگزاگ (۹،۰) (۵،۰) (۵،۰) (۹،۰) و دسته مندلی (۹٫۳) (۶،۶)، (۵،۵) میباشند.

' encapsulated

۹-۹-۱ بررسی پایداری و خواص ساختاری نانولولههای دوجداره AIN کپسوله شده با اتم Ga پس از واهلش نانولولههای کپسوله شده با استفاده از پارامترهای ورودی بهینه سازی شده، مشاهده شد که نانولولههای زیگزاگ (۱۰،۰) (۵،۰) به دلیل کوچک بودن قطر داخلی با اتم Ga پیوند برقرار شد که نانولولههای زیگزاگ (۱۰،۰) (۵،۰) به دلیل کوچک بودن قطر داخلی با اتم Ga پیوند برقرار کرده و از حالت نانولولهای خارج شدند. ولی برای نانولولههای زیگزاگ (۱۰،۰) (۵،۰) به دلیل کوچک بودن قطر داخلی با اتم Ga پیوند برقرار کرده و از حالت نانولولهای خارج شدند. ولی برای نانولولههای زیگزاگ (۱۰،۰) (۵،۰) از اختلاف کرده و از حالت نانولولهای خارج شدند. ولی برای نانولولههای زیگراگ (۱۰،۰) (۵،۰) (۲۰۰) (۵،۰) (۲۰۰) (۵،۰) (۲۰۰ (۵۰۰) کرده و از حالت نانولولههای دسته صندلی از اختلاف کایرالیته ۵ به بالا که در حالت خالص شکل لولهای هم محور خود را حفظ کرده بودند بعد از کپسوله کردن نیز شکل لولهای خود را حفظ کرده و در احنط کرده بودند بعد از کپسوله کردن نیز شکل لولهای خود را از دست شکل لولهای هم محور خود را حفظ کرده بودند بعد از کپسوله کردن نیز شکل لولهای خود را از دست داده و فروپاشی نکردند. همچنین نانولولههای که در حالت خالص شکل نانولولهای خود را مفظ کرده بودند بعد از کپسوله کردن نیز شکل لولهای خود را از دست شکل به بالا که در حالت خالص شکل نانولولهای خود را از دست کام مردن نیز شکل نانولولهای خود را از دست داده بودند در حالت کپسوله شده نیز شکل خود را ز دست داده و فروپاشی کردند. شکل ۴-



شکل ۴-۴۲: طرحواره نانولولههای دوجداره دسته صندلی وزیگزاگ AIN کپسوله شده با اتم Ga

در جدول ۴–۱۹ پارامترهای ثابت شبکه و فاصله درون جداری برای نانولولههای مورد بررسی قبل و بعد از کپسوله کردن آورده شده است. با توجه به جدول ۴–۱۹ برای نانولولههای دوجداره زیگزاگ و دستهصندلی بعد از کپسوله کردن فاصله درون جداری افزایش پیدا کرده است.

نانولولەھاي	جداری (Å)	فاصله درون -	ه (Å) c	ثابت شبک
دوجداره	خالص	کپسوله شده	خالص	کپسوله شده
(9)@(14)	41.240	4/1.770	0/404211	۵/۴۶۴۶۵۲
$(\mathcal{F},\cdot) \widehat{a}(1 \Delta,\cdot)$	4/8180	4/88320	0/441441	۵/۴۶۰۱۰۳
(9)@(19)	۵/۱۴۵۵	۵/۱۶۱۸	۵/۴۴۷	۵/۴۵۸۶۱۵
$(\mathcal{P},\cdot) \widehat{a}(1 \vee \cdot \cdot)$	۵/۶۰۳	۵/۶۶۰۷۵	۵/۴۵۳	6/424920
$(\mathcal{F},\cdot) \widehat{a}(1 \lambda,\cdot)$	81.840	۶/۸۸۶	۵/۴۵۸	۵/۴۶۹۹۳۱
$(\mathcal{F},\cdot) \widehat{a}(19,\cdot)$	۶/۵۵۷	8/81710	۵/۴۶۰	0/47114
(8.8)@(11.11)	۴/۵۰۸	4/49840	3/17140	٣/١۶٧١٧٣
(8.8)@(17.17)	۵/۳۵۱	۵/۳۲۱۲	٣/ ۱ ٧ ١	31184723
(8.8)@(18.18)	۶/۰۹۲۵	8/17880	٣/١۶٩	3/187808
(8.8)@(14.14)	۶/۹۵۸	۶/۹۶۸۳۵	٣/١٧٣	37/187441
(8.8)@(10.10)	۷/۸۳۰۵	٧/٨٦٣١۵	٣/١٧٣	٣/188849
(8.8)@(18.18)	۸/۷۰۳۴۵	۸/۷۱۷۱۵	٣/١٧٢	۳/۱۶۷۱۹۶
$(\Delta \cdot \Delta) \widehat{a} (1 \cdot \cdot 1 \cdot)$	٣/٩۴٨۵	4/37790	٣/١۶٩٨٢۴	3/174105
(۵.۵)@(۱۱.۱۱)	۵/۳۱۱	۵/۲۶۶۳۵	٣/١۶٨٢٢٣	٣/١٧١٢١١
(۵.۵)@(۱۲.۱۲)	۶/۰۸۴	۶/۰۰۶۵	37/174224	31114747
(۵.۵)@(۱۳.۱۳)	۶/٩٠۵۵	۶/۸۹۸۴	٣/١۶٩۶۵٣	31100114
(0.0)@(14.14)	۷/۸۲۱	٧/٧۴٢٩۵	3177911/3	۳/۱۷۴۴۰۸

جدول ۴–۱۹: فاصله درون جداری و ثابت شبکه نانولولههای دوجداره دستهصندلی و زیگزاگ قبل و بعد از کپسوله شده با اتم Ga

بر اساس فرمول ۴-۴ انرژی تشکیل برای این نانولولهها محاسبه شده است[۴۱].

 $E_{for} = E(Ga@DWNT) - E(pure DWNT) - N_{Ga}E(Ga)$  (۴-۴) که در آن (Ga@DWNT) انرژی کل نانولوله کپسوله شده، (pure DWNT) انرژی کل نانولوله خالص،  $N_{Ga}$  تعداد اتم های Ga و (Ga) انرژی اتم Ga میباشد. جدول ۴-۲۰ انرژی تشکیل قبل و بعد از کپسوله شدن را برای نانولولههای دوجداره زیگزاگ و دسته صندلی نشان میدهد. همان گونه که در جدول ۴-۲۰ مشاهده میشود انرژی تشکیل نانولوله ها پس از کپسوله شدن نسبت به حالت خالص کاهش پیدا کردهاند. بنا بر این میتوان با کپسوله کردن نانولولهها ، پایداری آنها را افزایش داد. با توجه به جدول ۴–۲۰ نانولوله دستهصندلی (۱۰،۱۰) (۵،۵) با فاصله درونجداری ۴/۳۷۲۷۵Å، اختلاف کایرالیته ۵ و انرژی تشکیل ۱/۹۱۵۳۵۹ و نانولوله دسته صندلی (۱۱،۱۱) (۶،۶) با فاصله درون جـداری ۴/۷Å، اخـتلاف کایرالیتـه ۵ و انـرژی تشـکیل ۱/۲۶۴۵۷ و نانولولـه زیگـزاگ (۱۶،۰) (۱۶،۰) با فاصله درون جداری ۸/۱۵ و اختلاف کایرالیته ۱۰ و با انرژی تشکیل ۲/۲۳۷۸۸ دارای کمترین انرژی تشکیل در دسته خود و درنتیجه پایدارترین نانولوله در دسـته خود میباشـند. بنابراین مشاهده میشود بعد از کپسوله کردن نانولولهها، اختلاف کایرالیته، کاهش و پایداری افـزایش

نانولولەھاى دوجدارە	انرژی تشکیل حالت	انرژی تشکیل حالت	نانولولەھاى دوجدارە	انرژی تشکیل حالت	انرژی تشکیل حالت
دستەصندلى	خالص(ev)	کپسوله شده(ev)	زیگزاگ	خالص(ev)	کپسوله شده(ev)
(8.8)@(11.11)	۱/۳۱۱۲۲۵	-1/79404	(9)@(14)	<b>١/۶٩٣٩٠١</b>	-४/١۶٧٨٧٨
(8.8)@(17.17)	•/1•۶٩٩٢	-1/244278	(۶.•)@(۱۵.•)	<b>١/۶٩٣٩٠١</b>	- 2/21262.
(۶.۶)@(١٣.١٣)	-•/ <b>٣</b> ۶٧٩ <b>•</b> ٣	-1/242748	(7.•)@(17.•)	•/۵۱•۳۷۵	-2/212748
(8.8)@(14.14)	-•/٢٢٢٨١٢	- 1/229 192	(۶.•)@(۱۷.•)	-•/177744	-2/194801
(۶.۶)@(١۵.١۵)	-•/١٣۶۴٢٩	- 1/261276	(۶.· )@(\λ.· )	-•/٣۶١٣١٨	-४/१९४१८۶
(۶.۶)@(١۶.١۶)	-•/• <b>시</b> ١٩٧	- 1/2207 • 1	(۶.۰)@(١٩.٠)	-•/۲۶۵۲۲۶	- 2/19•098
(۵.۵)@(۱۰،۱۰)	1/187.04	-1/•91۵۳۵9	-	-	-
(۵.۵)@(۱۱.۱۱)	•/١•٣٣٩	-1/•۶۶۷۴۵	-	-	-
(0.0)@(17.17)	-•/٣•۶٢٣	-1/•44214	-	-	-
(۵.۵)@(۱۳.۱۳)	-•/٢•٩٧۴٨	- 1 / • <b>۳</b> 9 1 <b>λ</b>	-	-	-
(0.0)@(14.14)	-•/119••۴	-1/• ٣۶۵۵٧٩	-	-	-

جدول ۴-۲۰: انرژی تشکیل نانولولههای دوجداره دسته صندلی و زیگزاگ قبل و بعد از کپسوله شده با اتم Ga

۴-۶-۲ بررسی خواص الکترونی نانولولههای دوجداره AIN کپسوله شده با اتم Ga پس از مشخص کردن نانولولههای کپسوله شده پایدار، موقعیت تراز فرمی و گاف نواری این نانولولهها مورد بررسی قرار گرفت. مشاهده شد که گاف نواری تمام نانولولههای دسته صندلی و زیگزاگ نیترید آلومینیوم پس از کپسوله شدن برابر با صفر شده و نانولوله تبدیل به فلز شده است. این تغییر زیاد گاف نواری ممکن است به خاطر برهمکنش نانولوله داخلی با اتم گالیم باشد. ساختار نواری دو نمونه از این نانولوله از نانولولههای دسته مندلی و زیگ زاگ نیترید آلومینیوم پس از کپسوله شدن برابر با صفر شده و نانولوله تبدیل به فلز شده است. این تغییر زیاد این نانولوله نواری ممکن است به خاطر برهمکنش نانولوله داخلی با اتم گالیم باشد. ساختار نواری دو نمونه از این نانولولهها قبل و بعد از کپسوله شدن در شکل ۴-۲۶ آورده شده است.



شکل ۴-۴۳: ساختار نواری نانولوله دسته صندلی و زیگزاگ AIN قبل و بعد از کپسوله شدن

نانولولەھاى دوجدارە	موقعیت تراز فرمی (ev)		ی(ev)	گاف نوارې
	خالص	کپسوله شده	خالص	کپسوله شده
(8)@(14)	-4/242.2148	-4/17•98887	۲/۱۵۰۸	صفر
(۶.+)@(۱۵.+)	-۴/۶۵۵۸۳۶۸۳	-4/188.1022	٢/٢٧٣١	صفر
(7.•)@(17.•)	-4/2122•74	-४/١٣٣٢۶٢٧٩	2/4114	صفر
(%,•)@(14,•)	-4/29348180	-4/4+82781144	2/2623	صفر
(%.•)@(\)	-4/789.7184	-٣/አእ٢١٣۴እ٢	۲/۶۷۷	صفر
(8.8)@(11.11)	-٣/٩١٧•٧٨۴٨	-4/292291 • 1	2/08022	صفر
(8.8)@(17.17)	-4/12229118	-۴/۲۱۷۳۰۰۸۳	٢/٧١٣١٣	صفر
(8.8)@(18.18)	-4/•1184284	-4/14817884	٣/•۵٧•۵	صفر
(8.8)@(14.14)	-٣/አ٩٢۶٩٩۵١	-4/1.55.587	r/+9511	صفر
(8.8)@(16.16)	-٣/٨١۵۵٣٠۴٢	-۴/•۷۵۹۶۸۴۸	2/12261	صفر
(۵.۵)@(۱۰.۱۰)	-۴/••٩٨۴٣٨٣	-4/42921802	7/44054	صفر
(۵.۵)@(۱۱.۱۱)	-4/299.1042	-4/41114248	7/87497	صفر
(۵.۵)@(۱۲.۱۲)	-4/12+48+12	-۴/۳۳۳۹۹۷۴۸	۲/٩٨٠۶٣	صفر
(۵.۵)@(۱۳.۱۳)	-٣/٩٩١۴٨۶٨١	-4/29221209	۲/٩٨٠۶٣	صفر
(۵.۵)@(۱۴.۱۴)	-٣/٩٢۵٣٩۴۴۶	-4/2747.221	37/27822	صفر

جدول ۴-۲۱: موقعیت تراز فرمی و مقدار گاف نواری برای نانولولههای خالص و کپسوله شده AIN

در جدول ۴–۲۱ موقعیت تراز فرمی و مقدار گاف نواری برای این نانولوله ها قبل و بعد از کپسوله کردن آورده شده است.



شکل۴-۴۴: نمودار چگالی حالتها در نانولوله دوجداره زیگزاگ (۱۶،۰)@(۶،۰) و دستهصندلی(۱۱،۱۱)@(۶،۶) AIN کپسوله شده

شکل ۴۴–۴۴ چگالی حالتهای تفکیکی اتمهای ۸۱، ۸۱ و Ga را در نانولولههای دوجداره زیگزاگ (۱۹،۰) ((۱۹،۰) و دستهصندلی (۱۱،۱۱) ((۱۹،۰) کپسوله شده با اتم Ga را نشان میدهد.که همان گونه که در شکل مشاهده می شود هم در نانولوله دستهصندلی هم در نانولوله زیگزاگ در نوار رسانش به ترتیب اتم NAN، ۹ و Ga بیشترین سهم را در شکل گیری چگالی حالتها دارند. و در نوار ظرفیت اتم N و بعد به ترتیب AIN و Ga بیشترین سهم را در چگالی حالتها دارند.

همچنین در شکل ۴–۴۴ چگالی حالتهای جزئی اتمهای N، AI و Ga برای این نانولولهها آورده شده است. با توجه به شکل برای هر دودسته نانولوله دسته صندلی و زیگزاگ اوربیتالهای ۳۳ اتم AI و ۲۷ اتم N بیشترین سهم را در شکلگیری چگالی حالتها در نوار ظرفیت و رسانش دارند. و سهم اوربیتالهای R، IS و ۲۶ اتم N بسیار کم میباشد. و برای اتم Ga هم برای نلنولوله دسته صندلی هم نانولوله زیگزاگ، در نوار رسانش بیشترین سهم برای اوربیتالهای ۴۶ و در نوار ظرفیت مربوط به اوربیتالهای ۶۶ میباشد.



شکل ۴–۴۵: نمودار چگالی حالتهای جزئی اتمهای Ga,N,AI در نانولوله دوجداره زیگزاگ(۱۶،۰)@(۶،۰) و دستهصندلی (۱۱،۱۱)@(AlN(۶،۶)کیسوله شده

نتيجه گيرى

در این پژوهش پایداری و خواص الکترونی نانولولههای دوجداره خالص و آلایش یافته AIN مورد بررسی قرارگرفت. در ابتدا پارامترهای انرژی قطع و تعداد نقاط k درفضای وارون، به منظور افزایش دقت و صحت نتایج و کاهش زمان محاسبات، بهینه سازی شد. پس از بهینه سازی پارامترهای ورودی، برای تعیین میزان پایداری و پایدارترین ساختار، نانولولههای دوجداره (n.n)(0.6) با ۱۵– h و (n.n) (0.6) با ۲۶–۹ از گروه دسته صندلی و همچنین نانولولههای دوجداره h و (n.n) (0.6) با ۲۶–۹ از گروه دسته صندلی و همچنین نانولولههای دوجداره با محاسبه انرژی تشکیل و انرژی پیوندی ساختارها مشاهده شد، که برای نانولولههای دسته صندلی با محاسبه انرژی تشکیل و انرژی پیوندی ساختارها مشاهده شد، که برای نانولولههای دسته صندلی

یایدارترین حالت به ازای فاصله درونجداری Å ۶ و انرژی تشکیل eV/۷ eV- و انرژی پیوندی ۷/۷ eV و برای نانولولههای زیگزاگ به ازای فاصله درون جداری Å ۶/۰۶ و انرژی تشکیل eV–۰/۳ eV انرژی ییوندی ۷/۷ eV ایجاد شد و ساختارهایی با فاصله درون جداری کمتر از این مقدار به سمت فروپاشی و ناپایداری میل کردند. پایدارترین ساختارها که بیشترین انرژی پیوندی و کمترین انرژی تشکیل را داشتند، در گروه دسته صندلی (۱۲،۱۲)@(۵،۵) و (۱۳،۱۳)@(۶،۶) و در گروه زیگزاگ (11,1) و (11,1) بودند. مطالعه خواص الکترونی ساختارها نشان داد که تمامی (0,1)نانولولههای تک جداره و دوجداره دسته صندلی AIN نیم رسانا با گاف نواری غیر مستقیم و تمامی نانولوله های دوجداره و تک جداره زیگزاگ AIN نیم رسانا با گاف نواری مستقیم میباشند و گاف نواری آنها با افزایش قطر نانولولهها روند افزایشی دارد که در قطرهای بالاتر، روند تغییرات کندتر می شود. در تمام ساختارهای مورد بررسی هم برای نوع دسته صندلی و هم زیگزاگ ، گاف نواری نانولوله های دوجداره کمتر ازگاف تکتک نانولولههای تک جداره تشکیل دهنده آن میباشد. با بررسی چگالی حالتهای کلی شش ساختار از نانولولههای دوجداره خالص دسته صندلی و شش ساختار از نانولوله های دوجداره خالص زیگزاک AIN نشان داده شد که برای تمامی ساختارهای دسته صندلی و زیگزاگ در نوار رسانش سهم اتم Al در ایجاد چگالی حالتهای کلی بیشتر از اتم N است و در نقطه مقابل، سهم اتم N در شکل گیری نوار ظرفیت بیشتر از اتم Al میباشد. در ادامه با بررسی تغییرات ناشی از آلایش نانولولهی AIN با اتم Ga، نانولولههای دسته صندلی (۵،۵) $(\partial_{\mu}(n-n))$  ۹–۹–nn=۱۰-۱۶ (۶،۶)، ۱۹-۱۰-۱۶ مورد آلایش قرار گرفتند. ساختارهای آلایش یافتهی (۹،۹) (۵،۵) و م در حالت خالص فروپاشی کردند پس از جایگزین n-m=۴ م در حالت خالص فروپاشی کردند پس از جایگزین (۲۰،۱۰) کردن اتم Ga به جای اتم Al و ایجاد ناخالصی هم در لولهی داخلی و هم در لولهی خارجی نیز فروپاشی کردند. نانولولههای (۱۰،۱۰) $\widehat{a}($ ۵،۵) و (۶،۶) $\widehat{a}($ ۱۱،۱۱) نیز که در حالت خالص پایدار بودند بعد از ایجاد ناخالصی در نانولوله خارجی فروپاشی کرد، دیگر ساختارهای مورد بررسی با حفظ شکل لولهای هم محور خود هم در حالت خالص و هم در حالت آلایش یافته، پایداری خود را حفظ نمودند. برای نانولولههای زیگزاگ دو خانواده (۱۰، )((0,1) (۵۰۰)، ۲۲–۱۳ و (۱۰،)((0,1)) (۴۰۰)، ۲۳–۱۳ مورد آلایش قرار گرفتند. ساختارهای (۱۲،۰)((0,1) و (۱۳،۰)((0,1) که در حالت خالص فروپاشی کردند، پس از آلایش با اتم Ga نیز فروپاشیدند. همچنین دو نانولولهی (۱۳۰۰)((0,1) و (۱۴،۰)((0,1)) که در حالت خالص پایدار بودند، بعد از ایجاد ناخالصی در لوله داخلی فروپاشی کردند. دیگر ساختارها بدون پیوند لولههای داخلی و خارجی و حفظ شکل لولهای خود پایدار ماندند. برای هر دو دسته نانو لوله زیگزاگ و دسته صندلی هم در آلایش داخلی و هم در آلایش خارجی با برای هر دو دسته نانو لوله زیگزاگ و دسته صندلی هم در آلایش داخلی و هم در آلایش داخلی برای هر دو دسته نانو لوله زیگزاگ و دسته صندلی هم در آلایش داخلی و هم در آلایش خارجی با برای مرد و نانولولهها انرژی تشکیل کمتر میشود. در نانولوله دسته صندلی برای آلایش داخلی و خارجی به ترتیب نانولولههای با اختلاف کایرالیته ۸ و ۶ دارای کمترین انرژی تشکیل و در نتیجه پایدارترین نانولوله میباشند در حالی که در نانولوله های زیگزاگ در حالت آلایش داخلی و خارجی به ترتیب نانولولههای با اختلاف کایرالیته ۸ و ۶ دارای کمترین انرژی تشکیل و در نتیجه پایدارترین نانولولههای با اختلاف کایرالیته ۸ و ۱۰ دارای کمترین انرژی تشکیل و در نتیجه

پیشنهادات برای آینده

۱- مطالعه پایداری و خواص الکترونی نانولولههای دوجداره AIN با لوله خارجی ثابت و لوله
 داخلی با قطر متغیر.

۲- مطالعه خواص مکانیکی نانولوله های دوجداره AlN.

[1] Jiao, Z.-Y., S.-H. Ma, and J.-F. Yang, A comparison of the electronic and optical properties of zinc-blende, rocksalt and wurtzite AlN: A DFT study. Solid State Sciences, 2011. 13(2): p. 331-336.

[2] B. H. Mussler, Aluminium Nitride (AlN), American Ceramic Society Bulletin 79 (2000) 45-47.

[3] L. I. Berger, Semiconductor Materials, CRC Press, Inc., 1997, p.123.

[4] H. Lee, A Study on Thermal and Electrical Conductivity Characterization of Aluminum Nitride, Ph.D Thesis,2010, Daejeon, Korea.

[5] C. Balasubramanian, S. Bellucci, G. Cinque, A. Marcelli, M.C. Guidi, M. Piccinini, A. Popov, A. Soldatov, P.Onorato, Characterization of aluminium nitride nanostructures by XANES and FTIR spectroscopies withsynchrotron radiation, Journal of Physics; Condensed Mater 18 (2006) S2095–S2104.

[6] Z. Gao, Y. Wana, G. Xiong, R. Guo, H. Luo, Synthesis of aluminum nitride nanoparticles by a facile ureaglass route and influence of urea/metal molar ratio, Applied Surface Science 280 (2013) 42–49.

[7] C Balasubramanian, V.P. Godbole, V.K. Rohatgi, A.K. Das, S.V. Bhoraskar, Synthesis of nanowires and nanoparticles of cubic aluminium nitride, Nanotechnology 15 (2004) 370.

[8] Z. Ren, Y. Lu, Y. Goh, T. Chong, M. Ng, J. Wang, B. Cheong, Y. Liew, Deposition of AlN Thin Films withCubic Crystal Structures on Silicon Substrates at Room Temperature, Japanese Journal of AppliedPhysics 39 (2000) L423

[9] A. Madan, I W. Kim, S.C. Cheng, P. Yashar, V.P. Dravid, S.A. Barnett, Stabilization of Cubic AlN inEpitaxial AlN/TiN Superlattices, Phys. Rev. Lett. 78 (1997) 1743.

[10] L. Yu, N. Liu, C. He, Q. Wu, Z. Hu, In-Situ Chloride-Generated Route to Different AlN Nanostructures on SiSubstrate, J. Phys. Chem. 113 C, (2009) 14245–14248.

[11] Seif, A., et al., AlN nanotubes: A DFT study of Al-27 and N-14 electric field gradient tensors. Zeitschrift für Naturforschung A, 2007. 62(12): p. 711-715.

[12]. Baghemiyani, T.A. and F.K. Fotooh, Interaction of Lead Metal with Single Walled AlN Nanotube: A Computational Study. Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials, 2017: p. 1-7.

[13] Tondare V, Balasubramanian C, Shende S, Joag D, Godbole V, Bhoraskar S, et al. Field emission from open ended aluminum nitride nanotubes. Applied physics letters. 2002;80(25):4813-5.

[14] Lim SH, Lin J. Ab initio study of the hydrogen chemisorption of single-walled

aluminum nitride nanotubes. Chemical Physics Letters. 2008;466(4):197-204.

[15] Zhao, M., et al., Stability and electronic structure of AlN nanotubes. Physical Review B, 2003. 68(23): p. 235415.

[16]Qiang Wu, Zheng Hu, Xizhang Wang, Yinong Lu, Xin Chen, Hua Xu, and Yi Chen. Synthesis and Characterization of Faceted Hexagonal Aluminum Nitride Nanotubes. American Chemical Society, 2003.125, 10176-10177

[17] Soltani, A., Taghartapeh, M. R., Mighani, H., Pahlevani, A. A., Mashkoor, R. (2012). A first-principles study of the SCN- chemisorption on the surface of AlN, AlP and BP nanotubes. App. Sur. Sci. 259. 637-642.

[18] Zhang.D, Zhang R.Q (2003). Theoretical prediction on aluminum nitride nanotubes. Chemical Physics Letters-371 (2003) 426-432

[19] Machado.M, Azevedo.S (2011). Stability and electronic properties of AlN nanotubes under the influence of external electric field- Eur. Phys. J.B 81, 121-125 (2011)

[20] www.iran nano.org

[21] Schodek, D.L., P. Ferreira, and M.F. Ashby, Nanomaterials, nanotechnologies and design: an introduction for engineers and architects. 2009: Butterworth Heinemann.

[۲۲] ف. حسینی نسب، م. افسری ولایتی، م. قاسمی نژاد، کتاب آشنایی با علوم و فناوری نانو، انتشارات کوچک آموز

[23] Thomsen, C., S. Reich, and J. Maultzsch, Carbon Nanotubes: Basic Concepts and Physical Properties. 2004, Wiley-VCH.

[24] Gross, E. K., & Dreizler, R. M. (Eds). "Density functional theory". Springer Science & Business Media. (Vol. 337) .(2013).

[25] Kohn, W., & Sham, L. J. "Self-consistent equations including exchange and correlation effects". Physical review, 140(4A), A1133. (1965).

[26] Chi, M., & Zhao, Y. P. "First principle study of the interaction and charge transfer between graphene and organic molecules". Computational Materials Science, 56, 79-84. (2012)

[27] Hartree, D. R. "The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and Methods". In Mathematical Proceeding of the Cambridge Philosophical Society (Vol. 24, No. 1, pp. 89-110). Cambridge University Press. (1928, January).

[28] Ganji, M. D., Sharifi, N., Ardjmand, M., & Ahangari, M. G. "Pt-decorated

graphene as superior media for H 2 S adsorption: a first-principle study". Applied Surface Science, 261, 697-704. (2012).

[29] Hamann, D. R., Schluter, M., & Chiang, C. "Norm-conserving pseudopotentials". Physical Review Letters, 43(20), 1494. (1979)

[31] https://www.icmab. Es/siesta

[32] Wang YL, Tan S, Wang J, Tan ZJ, Wu QX, Jiao Z, et al. The gas sensing properties of TiO 2 nanotubes synthesized by hydrothermal method. Chinese Chemical Letters. 2011;22(5):603-6.

[33] Xu JH, Hu CG, Hu SS. Novel estradiol sensors based on carbon nanotube multilayer modified gold hair microelectrodes. Chinese Chemical Letters. 2009;20(10):1248-5

[34] http://www.nanodic.com.

[35] Kittel, C., Introduction to Solid State Physics. University of Pennsylvania Law Review, 2005. 154(3): p. 477.

[36] Aydin, M., Dependence of geometric and spectroscopic properties of doublewalled boron nitride nanotubes on interwall distance. Nanomaterials and Nanotechnology, 2014. 4(Godište 2014): p. 4-28.

[38] Yu F Zhukovskii, A I Popov, C Balasubramanian and S Bellucci (2006) Structural and electronic properties of single-walled AlN nanotubes of different chiralities and sizes . J. Phys.: Condens. Matter 18 (2006) S2045–S2054

[39] Farahani, M., T.S. Ahmadi, and A. Seif, A DFT study of the nuclear magnetic response of the zigzag AlN–BN and BN–AlN nanotube junctions. Journal of Molecular Structure: THEOCHEM, 2009. 913(1): p. 126-130.

[40] Jin-Seok park ,Jong-Pil kim ,Young-Rok Noh ,Kyoung-Chul Jo, Sang-Yeol Lee, Hae-Young Choi ,Jong-Uk Kim(2010),"X-ray images obtained from cold cathodes using carbon nanotubes coated wit gallium-doped zinc oxide thin films",Thim Solid Films 519 1743-1748

[41] J. B. Yi, C. C. Lim, G.Z. Xing, H. M. Fan, L. H. Van. S. L. Huang, k. S. Yang, X.
(2010), "Ferromagnetism in Dilute Magnetic Semiconductors through Defect Engineering: Li-Doped ZnO", PRL 104, 137201

Abstract

AlN nanotubes have attract much attention due to their significant properties such as high temperature stability and high melting point, considerable thermal conductivity and low thermal expansion. In this work, the stability, electronic and structure properties of pure and doped and capsulated double-walled AlN nanotubes with Ga atom were studied based on density functional theory by considering wander vals forces with SIESTA code. The calculations have been done on armchair (5,5)@(n,n) with (n=8-15)and (6,6)@(n,n) with (n=9-16) and zigzag (6,0)@(n,0) with (n=12-19) and (5,0)@(n,0)with (n=11-18) double-walled AlN nanotubes. The results of the stability study of pure double-walled nanotubes shows that the armchair double walled AlN nanotubes with difference chirality of 7, (n,n)@(n+7,n+7) and inter-wall distance of 6 Å and the zigzag nanotubes with difference chirality of 12, (n,0)@(n+12,0) and inter-wall distance of 6.06 Å are the most stable structures. Studying the band structure shows that all pure zigzag nanotubes are semiconductor with direct band gap and all pure armchair nanotubes are semiconductor with indirect band gap. Band gap of the Single-walled AlN nanotubes have increasing trend with increasing the diameter of the nanotubes and the process of change is slower in the higher diameters. The band gap of double-wall AlN nanotubes are less than it's constituent single-walled nanotubes. Armchair and zigzag double-walled AlN nanotubes were doped with Ga atoms. The results of the doped armchair and zigzag double-walled nanotubes indicate a reduction in band gap of the nanotubes compared to pure mode. It was observed That by encapsulating The nanotubes, The interwall distances and The nanotube Stubility increased. The results of this research can be useful for the experiment studies in future.

Keywords: double-walled AlN nanotubes, density function theory(DFT), SIESTA code, electronic properties, stability, Formation energy.



Faculty of Physics and Nuclear Engineering

M.Sc. Thesis in Solid State Physics

## Investigation of stability and electronic properties of double-walled AlN nanotubes

By:

**Raaziyeh Hosseini** 

Supervisors:

Dr. Tayebeh Movlarooy

Advisor:

Dr. Saeid Hessami Pilehrood

June 2019