بسم الله الرحمن الرحیم
نور السموات والارض

دانشگاه ولی‌عصر(عج) رفسنجان

دانشکده‌ی علوم

گروه فیزیک

پایان‌نامه‌ی کارشناسی ارشد

رشته‌ی فیزیک گرایش اتمی و مولکولی

بررسی خواص ساختاری و الکترونی نانولوله‌ی گالیوم نیترید آلاییده با Nb , Zr , Y (GaNNT)

استاد راهنما

دکتر سید مهدی بیضائی

استاد مشاور

حمیده کهنوجی

دانشجو

سید حسن صابری

اسفند ۱۳۹۲

دانشگاه ولی‌عصر(عج) رفسنجان

دانشکده‌ی علوم

گروه فیزیک

پایان‌نامه‌ی کارشناسی‌ارشد

رشته‌ی فیزیک گرایش اتمی و مولکولی

نام و نام خانوادگی دانشجو

سید حسن صابری

عنوان پایان‌نامه

بررسی خواص ساختاری و الکترونی نانولوله‌ی گالیوم نیترید (GaNNT) آلاییده با Nb , Zr , Y

در تاریخ ۹۲/۱۲/۲۴ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه‌ی عالی به تصویب نهایی رسید.

۱- استاد راهنمای پایان‌نامه	دکتر سید مهدی بیضائی	با مرتبه‌ی علمی استادیار	امضاء
۲- استاد مشاور پایان‌نامه	حمیده کهنوجی	با مرتبه‌ی علمی مربی	امضاء
۳- استاد داور داخل گروه	دکتر محمد یونسی	با مرتبه‌ی علمی استادیار	امضاء
۴- استاد داور داخل گروه	دکتر مهدی احمدی	با مرتبه‌ی علمی استادیار	امضاء
۵- نماینده‌ی تحصیلات تکمیلی	دکترمهدی ملایی	با مرتبه‌ی علمی استادیار	امضاء

تمامی حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات،ابتکارات و نوآوری‌های حاصل از پژوهش موضوع این پایان نامه،متعلق به دانشگاه ولی عصر(عج) رفسنجان است.

سپاسگزاری

سپاس خداوند بزرگ را که درهای علم را بر من گشود و عمر و فرصتی داد تا خویش را در طریق علم و معرفت بیازمایم.

از خانواده عزیزم به ویژه پدر و مادر مهربانم به خاطر تلاش های محبت آمیز و حمایت های بی دریغشان در دوران مختلف زندگی ام صمیمانه سپاسگزارم.

از جناب آقای دکتر یضائی که راهنمایی این پایان نامه را بر عهده داشتند کمال تشکر را دارم. از استاد مشاورم سرکار خانم کهنوجی بینهایت سپاسگزارم. از آقایان دکتر یونسی و دکتر احمدی که زحمت داوری این پایان نامه را پذیرفتند، ممنونم.

و سپاس از همه دوستان به ویژه سرکار خانم دیانی که به نوعی مراد انجام رساندن این مهم یاری نموده اند.

تقدیم به مهربان فرشتگانی که:

لحظات ناب باور بودن، لذت و غرور دانستن، جسارت خواستن، عظمت رسیدن و

تمام تجربه های یکتا و زیبای زندگیم، مدیون حضور سبز آنهاست.

تقدیم به خانواده عزیزم.

چکیده

نانولوله‌ها با خواص منحصر به فرد مکانیکی، الکتریکی و اپتیکی جایگزین مناسبی برای بیشتر مواد به کار رفته در صنعت می‌باشند. تاکنون نانولوله‌هایی از جنس‌های مختلف از جمله کربن، گالیوم نیترید، سیلیکن کاربید، روی اکسید، آلومینیوم نیترید و بور نیترید ساخته شده‌اند که امروزه از میان آن‌ها نیم‌رساناهای نیتروژن‌دار به دلیل ویژگی‌های منحصر به فرد، بیش‌تر توجه محققین را به خود جلب کرده است و از آن جا که افزودن ناخالصی به نانولوله‌ها، خواص ساختاری و الکترونی آن‌ها را تغییر می‌دهد و می‌تواند باعث ایجاد قطبش اسپینی شود هر روزه تحقیقات و نتایج جدیدی در این زمینه ارائه می‌شود. تاکنون در این زمینه آلیاژ نانولوله‌ی گالیوم نیترید با بعضی از عناصر واسطه 3d و 5d گزارش شده است. در این پژوهش نانولوله‌ی گالیوم نیترید (۵,۵) قبل و بعد از افزودن ناخالصی‌هایی از خانواده عناصر واسطه 4d از جمله ایتریم، زیرکونیم و نیوبیم مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از برنامه PWscf از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو انجام شده است. این برنامه بر اساس نظریه‌ی تابعی چگالی و با در نظر گرفتن امواج تخت به عنوان توابع موج پایه در بسط توابع موج الکترونی و استفاده از شبه‌پتانسیل بنا شده است. نتایج نیم‌رسانایی نانولوله‌ی گالیوم نیترید خالص را با گاف غیرمستقیم ۱٫۸۰ تأیید می‌کند و نشان می‌دهد که نانولوله‌های گالیوم نیترید آلاییده با ایتریم و نیوبیم حالت نیم‌رسانایی خود را حفظ می‌کنند و فقط گاف آن‌ها تغییر می‌کند اما افزودن زیرکونیم، باعث فلز شدن آن می‌شود. هم‌چنین محاسبات نشان می‌دهند نانولوله‌ی گالیوم نیترید آلاییده با هر سه ناخالصی، پایدارتر از حالت خالص می‌باشند که نانولوله‌ی آلاییده با زیرکونیم از همه پایدارتر و نانولوله آلاییده با نیوبیم پایداری کم‌تری نسبت به بقیه دارد.

واژگان کلیدی: نانولوله‌ی گالیوم نیترید، نظریه‌ی تابعی چگالی، خواص الکترونی، خواص ساختاری

فهرست مطالب

صفحه عنوان

فصل اول ۱
مقدمه ۱
۱-۱-نانولوله‌ها ۲
۱-۱-۱-ساختارهای هندسی نانولوله‌ها ۲
۱-۱-۲-کاربردهای نانولوله‌ها ۵
۱-۲-نانولوله‌های گالیوم نیترید ۶
۱-۲-۱-تاریخچه ۶
۱-۲-۲-ویژگی‌ها ۶
۱-۲-۳-کاربردها ۷
۱-۲-۴-مروری بر مطالعات انجام شده در زمینه‌ی نانولوله‌ی گالیوم نیترید ۸
فصل دوم ۹
روش محاسبات ۹
۲-۱-سیستم‌های بس‌ذره‌ای ۱۰
۲-۲-رهیافت تابعی چگالی ۱۲
۲-۲-۱-نظریه توماس- فرمی- دیراک ۱۲
۲-۲-۲-قضایای هوهنبرگ-کوهن ۱۲
۲-۳-رهیافت کوهن-شم ۱۴
۲-۴-انرژی تبادلی-همبستگی در نظریه‌ی تابعی چگالی ۱۷
۲-۴-۱-تقریب چگالی موضعی (LDA) ۱۷
۲-۴-۲-تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) ۱۸
۲-۵-تکنیک‌های حل معادلات کوهن-شم ۱۹
۲-۶-انواع توابع پایه ۲۲
۲-۶-۱- اموج تخت (PW) ۲۲
۲-۶-۲- اموج تخت بهبود یافته(APW) ۲۳
۲-۶-۳-توابع جایگزیده ۲۴
۲-۷-نظریه‌ی شبه‌پتانسیل ۲۵

عنوان	صفحه

۲-۷-۱-شرایط لازم برای یک شبه‌پتانسیل مرغوب ۲۷
۲-۷-۲-انواع شبه‌پتانسیل ۲۷
۲-۷-۲-۱- شبه‌پتانسیل تجربی ۲۷
۲-۷-۲-۲- شبه‌پتانسیل ابتدا به ساکن ۲۸
فصل سوم ۳۱
خواص ساختاری و الکترونی نانولوله‌ی گالیوم نیترید وآلیاژ آن با Y، Zr و Nb ۳۱
۳-۱-نانولوله گالیوم نیترید در حالت خالص ۳۱
۳-۱-۱- بهینه‌سازی پارامترهای محاسباتی ۳۲
۳-۱-۱-۱-بهینه‌سازی نقاط k ۳۲
۳-۱-۱-۲-بهینه‌سازی انرژی قطع ۳۴
۳-۱-۱-۳-بهینه‌سازی پارامتر شبکه ۳۵
۳-۱-۲-ویژگی‌های ساختاری ۳۸
۳-۱-۳-خواص الکترونی ۴۱
۳-۱-۴-مغناطش ۴۳
۳-۲-نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با ایتریم، زیرکونیم و نیوبیم ۴۴
۳-۲-۱-نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با ایتریم (Y) ۴۴
۳-۲-۱-۱-بهینه‌سازی پارامتر شبکه ۴۵
۳-۲-۱-۲-ویژگی‌های ساختاری ۴۷
۳-۲-۱-۳-خواص الکترونی ۴۹
۳-۲-۱-۴-مغناطش ۵۰
۳-۲-۲-نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با زیرکونیم (Zr) ۵۰
۳-۲-۲-۱-بهینه‌سازی پارامتر شبکه ۵۰
شکل ۳-۲۴: نمودار فشار بر حسب حجم یاخته واحد نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با زیرکونیم ۵۱
شکل ۳-۲۵: نمودار فشار وارد بر یاخته واحد بر حسب انرژی فرمی نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با زیرکونیم ۵۲
۳-۲-۲-۲-ویژگی‌های ساختاری ۵۲

عنوان | صفحه

۳-۲-۲-۳خواص الکترونی ۵۵
۳-۲-۲-۴-مغناطش ۵۶
۳-۲-۳-نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با نیوبیم Nb ۵۶
۳-۲-۳-۱-بهینه‌سازی پارامتر شبکه ۵۶
۳-۲-۳-۲-ویژگی‌های ساختاری ۵۸
۳-۲-۳-۳-خواص الکترونی ۶۱
۳-۲-۳-۴-مغناطش ۶۲
فصل چهارم ۶۳
مقایسه ویژگی‌های نانولوله‌های گالیوم نیترید خالص وآلیاژی ۶۳
۴-۱-خواص فیزیکی ایتریم، زیرکونیم و نیوبیم ۶۳
۴-۲-مقایسه ویژگی‌های نانولوله گالیوم نیترید خالص و نانولوله‌های آلیاژی ۶۴
۴-۲-۱-مقایسه‌ی ساختار هندسی ۶۴
۴-۲-۲-مغناطش و ویژگی‌های ساختاری ۶۶
۴-۲-۳-خواص الکترونی ۶۸
۴-۳-چگالی بار ۷۰
۴-۴-انتقال بار ۷۱
فصل پنجم ۷۵
نتیجه‌گیری و پیشنهادها ۷۵
۵-۱-نتیجه‌گیری ۷۵
۵-۲-پیشنهادها ۷۶
منابع: ۷۷

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل ۱-۱: نمایش صفحه گرافنی با بردارهای پایه‌ی a_1 و a_2 در یاخته یکه دو بعدی، شامل بردار محوری T وبردار محیطی Ch عمود بر T. ۳
شکل ۱-۲: نمایش نانولوله‌های با ساختار کایرال، زیگزاگ و دسته‌صندلی ساخته شده از صفحه گرافنی ۵
شکل ۱-۳ نمودار تغییرات گاف انرژی نانولوله‌های گالیوم نیترید بر حسب شعاع نانولوله ۷
شکل ۲-۱: فلوچارتی از چگونگی حل خودسازگار معادلات کوهن-شم ۲۱
شکل ۲-۲ مقایسهای شماتیک از پتانسیل واقعی ($V(r)$) و شبه‌پتانسیل($V_P(r)$) و هم‌چنین تابع موج واقعی الکترون ($U(r)$) و شبه‌تابع موج ($U_P(r)$) ۲۶
شکل ۳-۱: یاخته واحد نانولوله (۵,۵)، اندازه ابعاد یاخته در راستای X و Y بسیار بزرگتر از راستای Z می‌باشد. ۳۳
شکل ۳-۲: نمودار تغییرات انرژی همدوسی یاخته واحد بر حسب تعداد نقاط K ۳۴
شکل ۳-۳: انرژی همدوسی نانولوله‌ی گالیوم نیترید بر حسب انرژی قطع ۳۵
شکل ۳-۴: نمودار انرژی همدوسی نانولوله گالیوم نیترید بر حسب حجم یاخته واحد ۳۶
شکل ۳-۵: نمودار فشار بر حسب حجم یاخته واحد نانولوله گالیوم نیترید ۳۷
شکل ۳-۶: نمودار فشار وارد بر یاخته واحد بر حسب انرژی فرمی ۳۷
شکل ۳-۷: نانولوله قبل از واهلش ۳۹
شکل ۳-۸: سلول واحد نانولوله قبل از واهلش ۳۹
شکل ۳-۹: نانولوله بعد از واهلش ۴۰
شکل ۳-۱۰: سلول واحد نانولوله بعد از واهلش ۴۰
شکل ۳-۱۱: ساختار نواری الکترونی نانولوله گالیوم نیترید: (الف) مربوط به اسپین بالا و (ب) مربوط به اسپین پایین (تراز فرمی به صورت خط‌چین رسم شده و بر روی صفر منطبق است). ۴۲
شکل ۳-۱۲: نمودار چگالی حالت‌ها مربوط به اسپین بالا و اسپین پایین برای نانولوله گالیوم نیترید خالص (خط‌چین نشان‌دهنده‌ی انرژی فرمی می‌باشد که بر صفر منطبق شده است). ۴۳
شکل ۳-۱۳: سلول واحد نانولوله گالیوم نیترید: (الف) در حالت خالص و (ب) بعد از افزودن ناخالصی ۴۴

عنوان **صفحه**

شکل ۳-۱۴: نمودار انرژی همدوسی نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با ایتریم بر حسب حجم یاخته واحد..... ۴۵
شکل ۳-۱۵: نمودار فشار بر حسب یاخته واحد نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با ایتریم ۴۶
شکل ۳-۱۶: نمودار فشار وارد بر یاخته واحد بر حسب انرژی فرمی نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با ایتریم ۴۶
شکل ۳-۱۷: نانولوله آلاییده با Y قبل از واهلش ۴۷
شکل ۳-۱۸: سلول واحد نانولوله آلاییده با Y قبل از واهلش ۴۷
شکل ۳-۱۹: نانولوله آلاییده با Y بعد از واهلش ۴۸
شکل ۳-۲۰: سلول واحد نانولوله آلاییده با Y بعد از واهلش..... ۴۸
شکل ۳-۲۱: ساختار نواری الکترونی نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با Y: (الف) مربوط به اسپین بالا و (ب) مربوط به اسپین پایین،(تراز فرمی به صورت خط‌چین مشخص شده و بر روی صفر منطبق است). ۴۹
شکل ۳-۲۲: نمودار چگالی حالت‌ها مربوط به اسپین بالا و پایین برای نانولوله آلاییده با ایتریم، (خط‌چین نشان‌دهنده‌ی انرژی فرمی می‌باشد که بر صفر منطبق شده است). ۵۰
شکل ۳-۲۳: نمودار انرژی همدوسی نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با زیرکونیم بر حسب حجم یاخته واحد..... ۵۱
شکل ۳-۲۶: نانولوله آلاییده با Zr قبل از واهلش..... ۵۳
شکل ۳-۲۷: سلول واحد نانولوله آلاییده با Zr قبل از واهلش ۵۳
شکل ۳-۲۸: نانولوله آلاییده با Zr بعد از واهلش ۵۴
شکل ۳-۲۹: سلول واحد نانولوله آلاییده با Zr بعد از واهلش..... ۵۴
شکل ۳-۳۰: ساختار نواری الکترونی نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با Zr، (الف) مربوط به اسپین بالا و (ب) مربوط به اسپین پایین (تراز فرمی به صورت خط‌چین مشخص شده و بر روی صفر منطبق است)..... ۵۵

عنوان **صفحه**

شکل ۳-۳۱: نمودار چگالی حالت‌ها مربوط به اسپین بالا و پایین برای نانولوله آلاییده با زیرکونیم (خط‌چین نشان‌دهنده‌ی انرژی فرمی می‌باشد که بر صفر منطبق شده است) ۵۶
شکل ۳-۳۲: نمودار انرژی همدوسی نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با نیوبیم بر حسب حجم یاخته واحد ۵۷
شکل ۳-۳۳: نمودار فشار بر حسب حجم یاخته واحد نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با نیوبیم ۵۷
شکل ۳-۳۴: نمودار فشار وارد بر یاخته واحد بر حسب انرژی فرمی نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با نیوبیم ۵۸
شکل ۳-۳۵: نانولوله آلاییده با Nb قبل از واهلش ۵۹
شکل ۳-۳۶: سلول واحد نانولوله آلاییده با Nb قبل از واهلش ۵۹
شکل ۳-۳۷ :نانولوله آلاییده با Nb بعد از واهلش ۶۰
شکل ۳-۳۸: سلول واحد نانولوله آلاییده با Nb بعد از واهلش ۶۰
شکل ۳-۳۹: ساختار نواری الکترونی نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با Nb مربوط به (الف) اسپین بالا و (ب) اسپین پایین (تراز فرمی به صورت خط‌چین مشخص شده و بر روی صفر منطبق است)... ۶۱
شکل ۳-۴۰: نمودار چگالی حالت‌ها مربوط به اسپین بالا و پایین برای نانولوله آلاییده با نیوبیم، (خط‌چین نشان‌دهنده‌ی انرژی فرمی می‌باشد که بر صفر منطبق شده است)..... ۶۲
شکل ۴-۱: نمایش سطح مقطع نانولوله‌های گالیوم نیترید: (الف) خالص، (ب) آلاییده با ایتریم، (ج) آلاییده با زیرکونیم و (د) آلاییده با نیوبیم ۶۵
شکل ۴-۲: نمودار مغناطش بر حسب عدد اتمی مربوط به نانولوله گالیوم نیترید آلاییده با ایتریم، زیرکونیم و نیوبیم..... ۶۸
شکل ۴-۳: نمودار چگالی حالت‌های جزئی مربوط به: (الف) نانولوله‌ی گالیوم نیترید خالص، (ب) نانولوله‌ی گالیوم نیترید آلاییده با ایتریم، (ج) نانولوله‌ی گالیوم نیترید آلاییده با زیرکونیم و (د) نانولوله‌ی گالیوم نیترید آلاییده با نیوبیم ۷۰

صفحه **عنوان**

شکل ۴-۴: نمایش چگالی بار مربوط به (الف) نانولوله گالیوم نیترید خالص، (ب) نانولوله گالیوم نیترید آلیاژ شده با ایتریم، (ج) زیرکونیم و (د) نیوبیم ۷۱

فهرست جدول‌ها

عنوان **صفحه**

جدول ۳-۱: ویژگی‌های ساختاری نانولوله گالیوم نیترید به دست آمده و کار دیگران..... ۴۱
جدول ۴-۱: مشخصات ساختاری نانولوله گالیوم نیترید خالص و آلیاژ شده ۶۴
جدول ۴-۲: انرژی بستگی، انرژی همدوسی و مغناطش محاسبه شده برای نانولوله‌ی خالص و نانولوله‌های آلیاژ شده ۶۷
جدول ۴-۳: میانگین چگالی بار اوربیتال‌های مختلف اتم‌های گالیوم و نیتروژن مربوط به نانولوله خالص (واحد همه‌ی اعداد کولن بر سلول واحد است)..... ۷۲
جدول ۴-۴: چگالی بار مربوط به نانولوله‌های گالیوم نیترید آلیاژ شده شامل چگالی بار اوربیتال‌های مختلف ناخالصی‌ها و میانگین چگالی بار اوربیتال‌های مختلف اتم‌های نیتروژن و گالیوم (واحد اعداد، الکترون بر یاخته واحد می‌باشد)..... ۷۳

فصل اول

مقدمه

واژه نانو از لغت یونانی نانوس به معنای کوتوله و قدکوتاه گرفته شده است که معادل لاتین آن دوارف[1] است. این پیشوند در علم مقیاس‌ها به معنای یک‌میلیاردیم ($۱۰^{-۹}$) است. محور مطالعه در علم نانو، اجسام بسیار کوچک در حد نانومتر است و فناوری نانو، تولید کارآمد مواد و سیستم‌ها در مقیاس نانو و هم‌چنین بهره‌برداری از خواص و پدیده‌های نوظهوری است که در مقیاس نانومتری توسعه یافته‌اند. امروزه این واژه برای کلیه‌ی فعالیت‌های انجام شده در ابعاد اتمی و مولکولی که کاربردی در دنیای حقیقی داشته باشند به کار می‌رود.

در حقیقت فناوری نانو علمی است که در آن ابعادی در حدود یک‌دهم تا چندصد نانومتر نقش کلیدی ایفا می‌کند. خواص و رفتار نانومواد نسبت به رفتار مواد انبوهه، تفاوت‌های زیادی دارد و این تفاوت‌های مهم به خاطر پدیده‌های ذاتی در مقیاس نانو مانند آثار سطحی، محدودیت اندازه و ... می‌باشد[۱].

همان‌طور که می‌دانیم فناوری نانو شاخه‌های مختلفی دارد. چون این تحقیق به بررسی خواص مختلف نانولوله‌ی گالیوم نیترید اختصاص دارد بنابراین لازم است مختصری به خواص نانولوله‌ها پرداخته شود.

---

[1] Dwarf

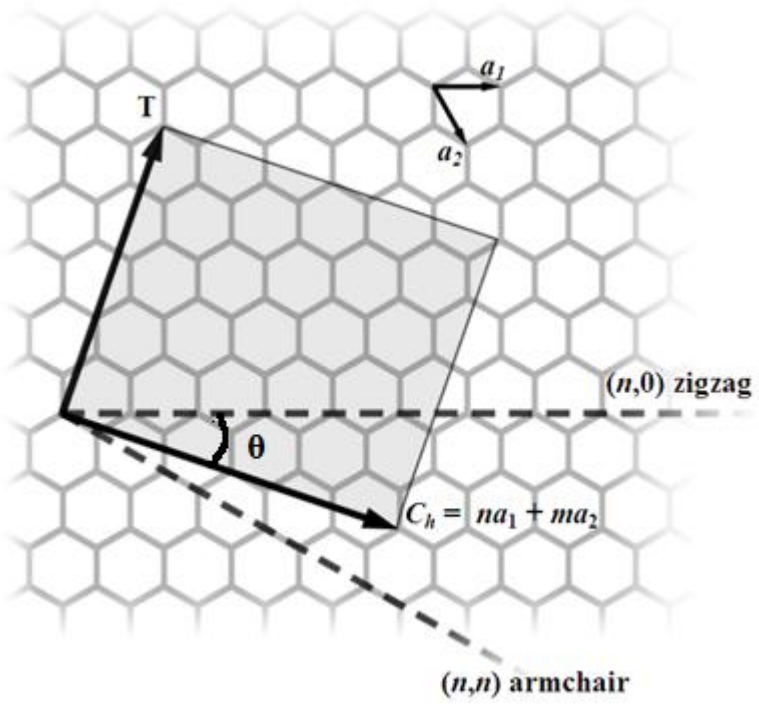
۱-۱-نانولوله‌ها

برای اولین بار در سال ۱۹۹۱ نانولوله‌های کربنی به شکل چندین لوله‌ی هم‌محور که نانولوله‌های چند دیواره[1] نامیده می‌شوند کشف شد[۲]. کار بر روی نانولوله‌های کربنی ادامه داشت تا این که دو سال بعد نانولوله‌هایی که فقط شامل یک لوله بود مشاهده شد[۳] که نانولوله‌های تک‌دیواره[2] نامیده شدند. در سال بعد دسته‌ای از نانولوله‌های تک دیواره که در یک شبکه‌ی شش‌ضلعی منظم قرار داشتند به‌دست آمد[۴].

۱-۱-۱-ساختارهای هندسی نانولوله‌ها

ساختار نانولوله تک‌دیواره را می‌توان به‌صورت یک صفحه گرافن لوله شده در نظر گرفت. البته نانولوله‌ها واقعاً با پیچیدن صفحه گرافنی ساخته نمی‌شوند اما توضیح ساختارهای مختلف نانولوله‌ها با در نظر گرفتن روشی که صفحه‌های گرافنی باید پیچیده شوند، امکان‌پذیر است. نانولوله‌ها در حالت کلی به دو دسته تک جداره و چند جداره تقسیم می‌شوند. از طرفی هر کدام از این دو دسته، می‌توانند سه گونه مختلف نانولوله را بر اساس بردار کایرال[3]شان تولید کنند. در شکل (۱-۱) صفحه گرافنی با بردارهای پایه‌ی a_1 و a_2 در یاخته یکه دو بعدی، شامل بردار محوری T وبردار محیطی C_h عمود بر T آمده است.

[1] Multi-walled carbon nanotubes
[2] Single wall carbon nanotubes
[3] Chiral vector



شکل ۱-۱: نمایش صفحه گرافنی با بردارهای پایه‌ی $\mathbf{a_1}$ و $\mathbf{a_2}$ در یاخته یکه دو بعدی، شامل بردار محوری T وبردار محیطی $\mathbf{C_h}$ عمود بر T.

با انتخاب اعداد مختلف برای n و m نانولوله‌هایی با قطرهای مختلف می‌توان ساخت که رابطه بین آن‌ها به‌صورت زیر است. Equation Chapter (Next) Section 1

از آن‌جایی که بردار کایرال، محیط نانولوله است پس

$$c_h = 2\pi R \qquad (۱-۱)$$

که R شعاع نانولوله است. از طرفی 2R همان قطر (d) است یعنی

$$d = \frac{|c_h|}{\pi} \qquad (۱-۲)$$

حال اگر بردار کایرال به‌صورت زیر تعریف شود

$$c_h = na_1 + ma_2 \qquad (۳-۱)$$

رابطه‌ی زیر برای قطر نانولوله به‌دست خواهد آمد

$$d = \frac{\sqrt{3}a_{c-c}\sqrt{m^2+n^2+mn}}{\pi} \qquad (۴-۱)$$

در این رابطه a_{c-c}، فاصله نزدیک‌ترین همسایه اتم کربن (طول پیوند $c-c$) می‌باشد.
اگر θ زاویه بین بردار کایرال و محور زیگزاگ تعریف شود می‌توان رابطه زیر را نوشت

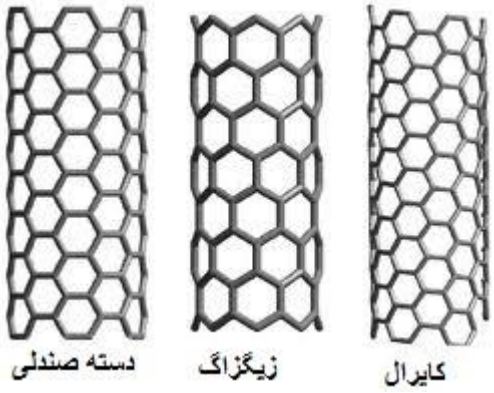
$$c_h.a_1 = c_h a_1 \cos(\theta) \qquad (۵-۱)$$

که θ را زاویه کایرال می‌نامند. از طرفی زاویه کایرال طبق رابطه زیر تعریف می‌شود

$$\cos(\theta) = \frac{2n+m}{2\sqrt{m^2+n^2+mn}} \qquad (۶-۱)$$

می‌توان نانولوله‌های مختلف را بر حسب زاویه کایرال نیز دسته‌بندی کرد، اگر $\theta = 0$ باشد با پیچیدن صفحه گرافنی حول T نانولوله زیگزاگ، اگر $\theta = 30$ باشد نانولوله دسته‌صندلی و اگر $0 \langle \theta \langle 30$ باشد نانولوله کایرال ساخته می‌شود. از طرفی با توجه به این که n و m به چه صورت باشند می‌توان نانولوله‌هایی با ساختار مختلف ساخت. نانولوله‌های با بردار کایرال (n,m) نانولوله‌های کایرال[1]، نانولوله‌های با بردار کایرال $(n,0)$ نانولوله‌های زیگزاگ[2] و نانولوله‌های با بردار کایرال (n,n) نانولوله‌های دسته‌صندلی[3] می‌باشند که در شکل (۱-۲) نمایش داده شده است.

[1] Chiral nanotubes
[2] Zigzag nanotubes
[3] Armchair nanotubes



شکل ۱-۲: نمایش نانولوله‌های با ساختار کایرال، زیگزاگ و دسته‌صندلی ساخته شده از صفحه گرافنی

۱-۱-۲-کاربردهای نانولوله‌ها

تحقیقات بنیادی و سودمند بر روی نانولوله‌ها نشان‌دهنده امکان کاربرد آن‌ها در زمینه‌های ذخیره سازی انرژی، الکترونیک مولکولی، قطعات نانوساختاری و مواد ترکیبی می‌باشد و این کاربردها هم‌چنان در حال پیشرفت هستند. چند مورد از مهم‌ترین کاربردهای نانوله‌ها عبارتند از:

الف-بهبود قابلیت رسانایی[۵]؛

ب-ذخیره سازی انرژی؛

ج-ذخیره سازی هیدروژن[۶]؛

د-ذخیره سازی لیتیوم[۶].

امروزه مواد آلی و غیر آلی مختلفی برای لوله‌ای شدن وجود دارند. از جمله می‌توان به C، AlN، BN، ZnO، SiC و GaN اشاره کرد. نیم‌رساناهای نیتروژن‌دار به دلیل داشتن ویژگی‌های منحصر به فرد از جمله گاف انرژی پهن و گسترده و کاربرد آن‌ها در ساخت قطعات الکترونیکی و نوری در سال‌های اخیر توجهات زیادی را به خود معطوف کرده‌اند. از آن‌جا که در این پژوهش به بررسی خواص مختلف نانولوله‌ی گالیوم نیترید پرداخته می‌شود خلاصه‌ای در مورد آن در ادامه آمده است.