

# بررسی امکان‌سنجی استفاده از نانولوله‌های $P_2SiS$ ، $As_2GeSe$ و $As_2GeTe$ در نسل جدید ترانزیستورها

پروین بهزادی<sup>۱\*</sup>

شرکت تولید و بهره‌برداری سد و نیروگاه دز، اندیمشک، ایران  
گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی جندی شاپور دزفول، ایران

**چکیده:** این پژوهش با استفاده از روش ابتدا به ساکن در چارچوب نظریه تابعی چگالی و توسط بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو در تقریب شیب تعمیم یافته انجام شده است. ویژگی‌های ساختاری همچون ثابت شبکه، انرژی کرنش و انرژی نسبی تشکیل و ویژگی الکترونی مانند ساختار نواری برای سه ساختار دسته‌مبلی نانورقه‌های  $P_2SiS$ ،  $As_2GeSe$  و  $As_2GeTe$  و نانولوله این ترکیبات با ساختار دسته‌مبلی (۱۰،۱۰) مورد بررسی قرار گرفته است و با توجه به ویژگی‌های الکتریکی منحصر به فرد نانولوله این ترکیبات در ترانزیستورها، ویژگی‌های الکتریکی آنها با نانولوله کربنی مقایسه شده است. همچنین برای نانولوله  $As_2GeTe$  به ازای ساختارهای دسته‌مبلی (۴،۴)، (۶،۶)، (۸،۸) و (۱۰،۱۰) ساختار نواری رسم گردیده است و در ادامه ساختار نواری نانورقه‌های  $P_2SiS$ ،  $As_2GeSe$  و  $As_2GeTe$  با ساختار نواری گرافن مقایسه گردیده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که ساختار نواری نانورقه‌ها و نانولوله‌های این ترکیبات، گاف نواری را به دست می‌دهد. بنابراین همه ترکیبات ذکر شده، نیم‌رسانا می‌باشند. همچنین از بررسی قطرهای مختلف نانولوله‌های دسته‌مبلی ترکیب  $As_2GeTe$ ، ساختارهای نواری بسیار نزدیک به یکدیگر به دست آمده است. که این مؤید گاف نواری تقریباً یکسانی به ازای قطرهای مختلف برای نانولوله  $As_2GeTe$  است. دو عامل نیم‌رسانایی و ثابت ماندن گاف نواری نانولوله‌های  $As_2GeTe$ ،  $As_2GeSe$ ،  $P_2SiS$  دو مزیت مهم استفاده از این نانولوله‌ها به جای نانولوله‌های کربنی در ترانزیستورها است.

**واژگان کلیدی:** نانولوله، نانورقه، ترانزیستور، MOSFET.

[p.behzadi13425@yahoo.com](mailto:p.behzadi13425@yahoo.com)

آن‌ها<sup>۱</sup> MOSFET است. با توجه به اینکه ترانزیستورهای MOSFET دارای معایبی همچون آسیب پذیر بودن اکسید MOSFET هنگام برانگیختگی بارهای الکترواستاتیک در لایه نازک است، امروزه ترانزیستورهای اثر میدانی نانولوله کربنی به عنوان جایگزین مناسب برای MOSFET معرفی شده‌اند، زیرا دارای مزایایی مانند تحریک‌پذیری یکسان نوع n و p، مصرف انرژی کمتر، جریان کم در حالت خاموش و قابلیت تنظیم ولتاژ آستانه هستند [۳-۵]. در سال ۲۰۱۹ برای اولین بار ترانزیستورهای

## ۱- مقدمه

ترانزیستور، یک ماده نیم‌رسانا با ویژگی تقویت‌کنندگی جریان الکتریکی است که در الکترونیک اهمیت ویژه‌ای دارد و تحقیقات زیادی درباره ویژگی‌های الکترونیکی آن انجام شده است [۱-۳]. ترانزیستورهای اولیه از مواد ناپایدار با ویژگی تقویت‌کنندگی کم ساخته شدند. بعدها، ترانزیستورها به دو دسته BJT (پیوندی) و FET (اثر میدان) تقسیم شدند. BJT ها اولین ترانزیستورها بودند و FET ها نسل جدیدتری هستند، که یکی از مهمترین انواع

<sup>1</sup> Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor

نانولوله سه ترکیب  $P_2SiS$ ،  $As_2GeSe$  و  $As_2GeTe$  بررسی می گردد و نتایج آنها با گرافن و نانولوله کربنی مقایسه خواهد شد. با توجه به این امر که نانو لوله ها دارای انواع مختلف و قطرهای متفاوت می باشند، لذا لازم است که تعداد زیادی ساختار مورد بررسی قرار گیرد و از میان آنها توجه این پژوهش تنها بر روی ساختارهایی است که علاوه بر پایداری از خاصیت نیم رسانایی نیز برخوردار باشند تا بتوان آنها را به عنوان گزینه های امیدوار کننده جهت استفاده در ترانزیستورهای مبتنی بر ساختار نانو لوله ای مواد معرفی نمود.

## ۲- روش محاسبه

در این پژوهش، محاسبات با استفاده از روش ابتدا به ساکن در چارچوب نظریه تابعی چگالی توسط بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو در تقریب شیب تعمیم یافته (GGA-PBE) برای مدل سازی پتانسیل تبدیلی-همبستگی انجام گرفته است [۱۰]. در انجام محاسبات، از شبه پتانسیل های ساخته شده به روش نرم پایسته استفاده شده است. در این شبه پتانسیل ها برای توصیف مناسب الکترون های ظرفیت، از اوربیتال های  $4p^2 4s^2$  برای اتم Ge،  $4p^3 4s^2$  برای اتم As،  $5p^4 5s^2$  برای اتم Te،  $3p^3 3s^2$  برای اتم P،  $3p^2 3s^2$  برای اتم Si،  $3p^4 3s^2$  برای اتم S و  $4p^4 4s^2$  برای اتم Se استفاده شده است. در سه ترکیب  $P_2SiS$ ،  $As_2GeSe$  و  $As_2GeTe$  در حالت نانورقه و نانولوله، پس از واهلش ساختاری میزان نیروی وارد بر هر اتم کمتر از  $Ry/au$  ۰.۰۰۲ است. همچنین دقت در محاسبه انرژی کل ساختارها برابر با  $Ry$   $10^{-6}$  در نظر گرفته شده است [۱۱ و ۱۰].

در نانورقه ها و نانو لوله ها برای جلوگیری از برهمکنش با ساختار مجاور یک لایه خالص ۱۳ آنگسترمی در نظر گرفته شده است. که برای نانورقه ها تعداد نقاط بهینه  $k$  برابر  $1 \times 8 \times 8$  و انرژی قطع  $Ry$  ۸۰ و همچنین برای نانولوله ها تعداد نقاط بهینه  $k$  برابر  $1 \times 1 \times 8$  و انرژی قطع  $Ry$  ۷۰ در محاسبات مورد استفاده قرار گرفت [۱۱ و ۱۰].

## ۳- نتایج و بحث

در این پژوهش عناصر تشکیل دهنده این ترکیبات به گروه های

اثر میدانی نانولوله کربنی ساخته شد [۶]. با توجه به نیاز به پردازش های سریع و با قدرت بالا، طراحی مدارهای دیجیتال با مصرف انرژی و مساحت کم اهمیت زیادی دارد. مشکلات کوچک سازی ترانزیستورهای MOSFET پژوهشگران را به جستجوی جایگزین هایی برای این نوع ترانزیستورها سوق داده است که در این میان استفاده از ترانزیستورهای نانولوله کربنی به بهبود عملکرد مدارها و افزایش دامنه محاسبات کمک می کند. نانولوله های کربنی با توجه به قطرشان می توانند خاصیت فلزی و یا نیمه هادی از خود نشان دهند. اما در حال حاضر برای ساخت نانولوله کربنی روش ساختی برای اینکه بتواند با درصد خلوص بسیار بالا لوله های نیمه هادی تولید کند وجود ندارد. بنابراین اگر وجود ناخالصی ها در لوله های کربنی باعث شود خاصیت فلزی در نانولوله ایجاد شود، رشد ناخواسته خاصیت فلزی در نانولوله سبب اتصال کوتاه و بنابراین منجر به اخلاص در کار ترانزیستور می شود. از سوی دیگر اگر در فرایند ساخت نانو لوله کربنی، گاف انرژی تغییر کند، منجر به تغییر در جریان ترانزیستور می شود از جمله راهکارهای کاربردی برای حل این مشکلات، استفاده از نانولوله هایی با ویژگی های مشابه نانولوله های کربنی اما با خاصیت نیم رسانایی است که در راستای همین هدف، ترکیباتی نظیر  $P_2SiS$ ،  $As_2GeSe$  و  $As_2GeTe$  و بررسی خواص نیم رسانایی آنها مورد توجه قرار گرفته است. البته ترکیبات مذکور تنها ساختار های ممکن در این زمینه نیستند بلکه به عنوان مثال در سال ۲۰۱۹ ویژگی های ساختاری، الکتریکی و فوتونی تک لایه هایی مشابه ترکیبات مذکور با نام های  $P_2GeS$ ،  $As_2GeS$  با استفاده از روش ابتدا به ساکن بررسی شدند اما پژوهشگران دریافتند که کاربرد تک لایه  $P_2GeS$  و  $As_2GeS$  در راستای شکافدگی فتوکاتالیستی آب، بیشتر از کاربرد آنها در ترانزیستورها مورد توجه است [۷]. در زمینه ترکیبات مورد توجه در این کار، پژوهشی در سال ۲۰۲۱ انجام شده و ویژگی های الکترونیکی و نوری تک لایه های  $P_2SiS$  و  $As_2GeTe$  و نانولوله  $As_2GeTe$  با استفاده از روش نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفته است [۸ و ۹]. اما در هیچ یک از این مقالات خاصیت نیم رسانایی ترکیبات مذکور با هدف امکان سنجی جهت کاربرد در ترانزیستورها مورد بحث قرار نگرفته است. لذا در این پژوهش، ویژگی های الکترونیکی همچون ساختار نواری برای نانورقه و

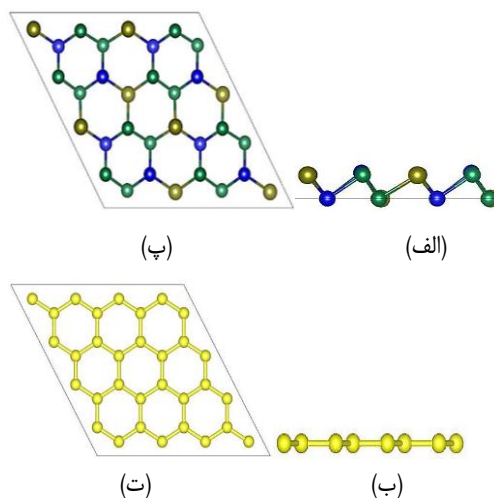
جدول ۱. قطرهای محاسبه شده  $D$ ، ثابت‌های شبکه  $L$  (Å)، گاف نواری  $E_{gap}$  (eV)، انرژی کرنش  $E_{strain}$  (meV/atom)، انرژی تشکیل  $E_{formation}$  (eV/atom)، تعداد کل اتم‌ها در یک سلول واحد (N) برای سیستم دسته‌مبلی نانولوله  $As_2GeTe$  و نانولوله‌های  $As_2GeSe$ ،  $P_2SiS$  و  $As_2GeTe$

Nanotube $As_2GeTe$	N	قطر (D)		L(Å)	$E_{gap}$ (eV)	$E_{strain}$ (meV/atom)	$E_{formation}$ (meV/atom)
		بیرونی (Å)	داخلی (Å)				
Armchair (4,4)	۳۲	۶/۴۰	۱۰/۱۸	۷/۳۷	۱/۰۷	۶۵/۸	۳۵
Armchair (6,6)	۴۸	۱۱/۰۰	۱۴/۶۰	۷/۳۷	۱/۰۳	۲۳/۶	۳۱
Armchair (8,8)	۶۴	۱۴/۳۷	۱۸/۱۲	۷/۳۷	۱/۰۱	۹/۵	۳۰
Armchair (10,10)	۸۰	۱۸/۷۶	۲۲/۴۴	۷/۳۷	۰/۹۹	۳/۰۸	۲۹
$As_2GeTe$ monolayer	۸	-	-	۷/۳۴	۱/۰۸	-	۲۹
$As_2GeSe$ monolayer	۸	-	-	۷/۳۳	۱/۰۷	-	۴۱
$P_2SiS$ monolayer	۸	-	-	۶/۶۸	۰/۶	-	۷۲

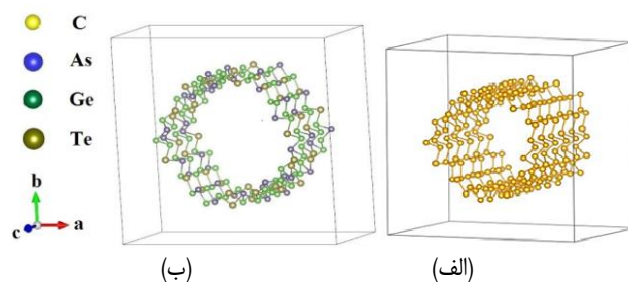
کاهش می‌یابد در نتیجه شرایط پایداری این نانولوله، در قطرهای بزرگتر امکان پذیرتر است. برای ارزیابی خصوصیات الکترونی، ساختار نواری برای هر سه تک‌لایه ترکیبات  $P_2SiS$ ،  $As_2GeTe$  و  $As_2GeSe$  و قطرهای مختلف نانولوله  $As_2GeTe$  در امتداد نقاط پرتقارن در منطقه اول بریلئون محاسبه شد. انرژی فرمی بر روی صفر انرژی تنظیم شده است. نتایج ارائه شده تایید می‌کند که تک‌لایه‌ها و نانولوله مورد مطالعه، ترکیبات نیم‌رسانا هستند. همچنین گاف نواری در این نانولوله‌ها با افزایش قطر آنها تغییر اندکی می‌یابد که در ساختار نواری شکل ۳ مشخص است. پژوهش‌های انجام شده نشان می‌دهد که نانولوله کربنی و گرافن خاصیت فلزی دارند [۱۳]. در این مقاله برای گرافن پارامترهای شبکه بهینه شد و پارامتر شبکه  $2/45 \text{ \AA}$  به دست آمده است. در شکل ۴ به ازای نقاط پرتقارن  $K\Gamma MK$  گاف نواری گرافن رسم شده است و همان طوری که مشخص است گرافن هیچ گاف نواری ندارد که این ویژگی نشان دهنده خاصیت فلزی گرافن است.

در شکل ۵ نیز ساختار نواری برای نانولوله‌های  $P_2SiS$ ،  $As_2GeTe$  و  $As_2GeSe$  به ازای نقاط پرتقارن  $\Gamma MK\Gamma$  رسم شده است. با توجه به شکل ۵ تک‌لایه  $P_2SiS$  دارای گاف نواری غیرمستقیم حدود  $0/62 \text{ eV}$  است. در حالی که تک‌لایه‌های  $As_2GeTe$  و  $As_2GeSe$  به ترتیب دارای گاف نواری مستقیم

IV، V و VI جدول تناوبی تعلق دارند و سلول واحد این ترکیبات دارای ۸ اتم است که در آن ۴ اتم به گروه ۵، دو اتم به گروه ۴ و ۲ اتم به گروه ۶ تعلق دارند. برای نانولوله‌های  $P_2SiS$ ،  $As_2GeTe$  و  $As_2GeSe$  پارامترهای شبکه (L) در امتداد محور لوله برای ساختارهای دسته‌مبلی  $7/37 \text{ \AA}$  است. پارامتر شبکه برای نانولوله  $As_2GeT$  برابر با  $7/34 \text{ \AA}$  است. در شکل ۱ نانولوله‌های کربنی و  $As_2GeTe$  و در شکل ۲ نانولوله‌های کربنی و  $As_2GeTe$  نشان داده شده است.



شکل ۱. نمایش نانولوله‌های (الف)  $As_2GeTe$  و (ب) گرافن در صفحه yz (اتم‌های ساختار گرافن در یک صفحه قرار دارند در حالی که اتم‌های  $As_2GeTe$  در یک صفحه قرار ندارند) و نمایش نانولوله‌های (پ)  $As_2GeTe$  و (ت) گرافن در صفحه xy



شکل ۲. نانولوله‌های (الف) کربنی (ب)  $As_2GeTe$  در نمایی سه بعدی

در جدول ۱ قطر داخلی و خارجی نانولوله دسته‌مبلی  $As_2GeTe$ ، گاف نواری، انرژی کرنش و پارامتر شبکه نانولوله  $As_2GeTe$  و نانولوله‌های  $P_2SiS$ ،  $As_2GeSe$  و  $As_2GeTe$  جهت مقایسه آورده شده است.

با توجه به جدول ۱ مشاهده می‌شود برای نانولوله‌های دسته‌مبلی  $As_2GeTe$ ، انرژی کرنش و انرژی تشکیل آن‌ها با افزایش قطر،

در شکل ۶ نیز ساختار نواری نانولوله‌های دسته‌مبلی (۱۰،۱۰) برای سه ساختار  $P_2SiS$ ،  $As_2GeSe$  و  $As_2GeTe$  در راستای  $\Gamma Z$  رسم شده است. وجود گاف نواری در هر سه نانولوله دسته‌مبلی نشان دهنده این است که این سه نانولوله نیز نیم‌رسانا می‌باشند که آن‌ها را به گزینه مناسبی برای کاربرد در ترانزیستورهایی که مبتنی بر ساختار نانولوله‌های مواد مختلف هستند، تبدیل می‌سازد.

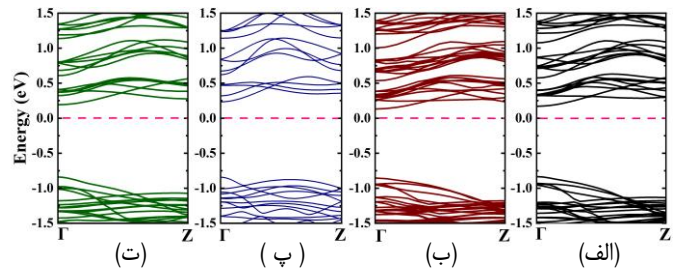
#### ۴- نتیجه گیری

محاسبات این مقاله بر اساس نظریه تابعی چگالی و با استفاده از پایه‌های موج تخت توسط نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو انجام گرفته است. در این پژوهش از بررسی ساختار نواری نانولوله  $As_2GeTe$  به ازای ساختارهای دسته‌مبلی (۴،۴)، (۶،۶) و (۸،۸) و (۱۰،۱۰) و ساختار نواری نانولوله‌های دسته‌مبلی (۱۰،۱۰) برای ساختارهای  $P_2SiS$ ،  $As_2GeSe$  و  $As_2GeTe$  و همچنین ساختار نواری نانورقه‌های  $P_2SiS$ ،  $As_2GeSe$  و  $As_2GeTe$  و مقایسه آن با ساختار نواری گرافن نتایج زیر به دست آمده است:

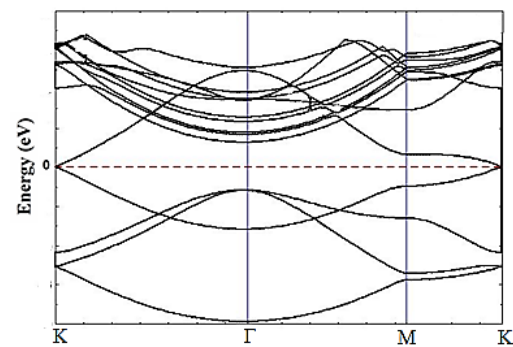
۱- همه ترکیبات نانولوله دسته‌مبلی و نانورقه  $P_2SiS$ ،  $As_2GeSe$  و  $As_2GeTe$  نیم‌رسانا می‌باشند. در حالی که نانولوله کربنی و گرافن به دلیل نداشتن گاف نواری خاصیت فلزی از خود نشان می‌دهند.

۲- از بررسی قطرهای مختلف نانولوله‌های دسته‌مبلی ترکیب  $As_2GeTe$ ، ساختارهای نواری بسیار نزدیک به یکدیگر به دست آمده است که این مؤید گاف نواری تقریباً یکسانی به ازای قطرهای مختلف برای نانولوله  $As_2GeTe$  است.

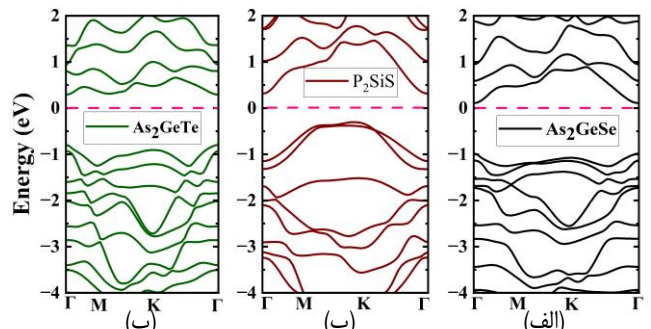
۳- استفاده از نانولوله‌های کربنی در ترانزیستورها دارای دو مشکل عمده است: اول اینکه وجود خاصیت فلزی در این نانولوله‌ها منجر به اتصال کوتاه در ترانزیستورها می‌گردد و دوم اینکه در فرایند ساخت نانولوله‌های کربنی، قطر نانولوله‌های کربنی تغییر کرده، در نتیجه گاف انرژی تغییر می‌کند. بنابراین تغییر گاف منجر به تغییر جریان عبوری از ترانزیستور می‌گردد [۱۳ و ۱۴]. برای رفع این مشکلات از نانولوله‌های  $P_2SiS$ ،  $As_2GeSe$  و  $As_2GeTe$  در ترانزیستورها استفاده شده است که در این ترانزیستورها دو عامل نیم‌رسانایی و ثابت ماندن گاف



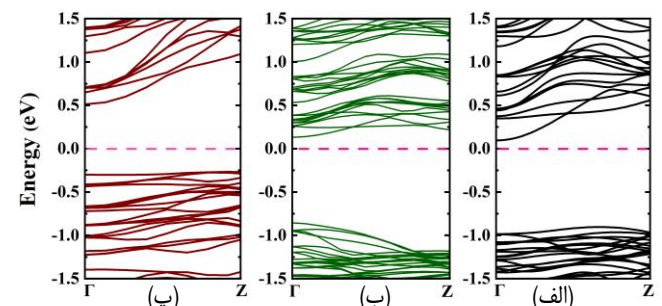
شکل ۳. ساختار نواری نانولوله  $As_2GeTe$  به ازای قطرهای مختلف (الف) دسته مبلی (۸،۸) (ب) دسته مبلی (۱۰،۱۰)، (پ) دسته مبلی (۴،۴) و (ت) دسته مبلی (۶،۶)



شکل ۴. ساختار نواری گرافن



شکل ۵. ساختار نواری نانورقه‌های (الف)  $As_2GeSe$ ، (ب)  $P_2SiS$  و (پ)  $As_2GeTe$



شکل ۶. ساختار نواری نانولوله‌های دسته‌مبلی (۱۰،۱۰) برای (الف)  $As_2GeSe$ ، (ب)  $As_2GeTe$  و (پ)  $P_2SiS$

در حدود  $1/0.8 \text{ eV}$  و  $1/0.7 \text{ eV}$  در نقطه  $\Gamma$  می‌باشند. بنابراین وجود گاف نواری با اندازه‌های ذکر شده نشان دهنده خاصیت نیم‌رسانایی این سه نانورقه است.

8. H. Wan, J. Zhao, L. W. Lo, Y. Cao, N. Sepúlveda, C. Wang, ACS Nano, 15(9), 14587 (2021).

9. Y. L. Zhu, J. H. Yuan, Y. Q. Song, K. H. Xue, S. Wang, C. Lian, ... X. S. Miao, Int. J. Hydrogen Energy., 44(39), 21536(2019).

10. P. Behzadi, P. Amiri, S. A. Ketabi, Chem. Phys., 547, 111215(2021).

11. P. Behzadi, S. A. Ketabi, P. Amiri, Solid State Commun., 336, 114421(2021).

12. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, ... R. M. Wentzcovitch, J. Phys. Condens. Matter, 21(39), 395502(2009).

13. P. Amiri, N. Mokhtaripoor, A. Aliakbari, H. Salehi, Solid State Commun., 343, 114673(2022).

14. M. Ouyang, J. L. Huang, C. L. Cheung, C. M. Lieber, Science, 292, 702 (2001).

نواری به ازای قطره‌های مختلف، دو مزیت مهم استفاده از این نانولوله‌ها به جای نانولوله‌های کربنی در ترانزیستورها است. بنابراین پیشنهاد می‌شود که از این نانولوله‌های ذکر شده در ترانزیستورها استفاده گردد.

## منابع

1. P. R. Bandaru, J. Nanosci. Nanotechnol., 7, 1239 (2007).

2. Q. W. Li, Y. Li, X. F. Zhang, S. B. Chikkannanavar, Y. H. Zhao, A. M. Dangelewicz, ... & Y. T. Zhu, Adv. Mater., 19, 3358(2007).

3. N. Gupta, A. Dixit, Carbon Nanotube Field-Effect Transistors (CNFETs): Structure, Fabrication, Modeling, and Performance. In Carbon Nanomaterial Electronics: Devices and Applications. (Singapore: Springer Singapore, 2021) pp. 199.

4. F. Zahoor, M. Hanif, U. I. Bature, S. Bodapati, A. Chattopadhyay, F. A. Hussin, ... F. Bashir, Phys. Scr. (2023).

5. M. Luisier, C. Klinkert, S. Fiore, J. Backman, Y. Lee, C. Stieger, Á. Szabó, Field-Effect Transistors Based on 2D Materials: A Modeling Perspective. Beyond-CMOS: State of the Art and Trends, (2023)33.

6. A. Sachdeva, D. Kumar, E. Abbasian, AEU-Int. J. Electron. C, 162, 154565(2023).

7. B. Shkodra, M. Petrelli, M. A. Costa Angeli, D. Garoli, N. Nakatsuka, P. Lugli, L. Petti, Appl. Phys. Rev., 8(4) (2021).



# Investigating the feasibility of using $P_2SiS$ , $As_2GeSe$ and $As_2GeTe$ nanotubes in the new generation of transistors

Parvin Behzadi<sup>1,2\*</sup>

<sup>1</sup>Dez dam and power plant production and operation company, Andimeshk, khozestan, Iran

<sup>2</sup>Department of Physics, Faculty of Science, Jundi-Shapur University of Technology,Dezful,Iran

**Abstract:** This research has been done using the first-to-static method in the framework of the density functional theory and by the Quantum Espresso computing package in the generalized slope approximation. Structural properties such as lattice constant, strain energy and relative energy of formation and electronic properties such as band structure for three stack structures of  $P_2SiS$ ,  $As_2GeSe$  and  $As_2GeTe$  nanosheets and nanotubes of these compounds with stack structure (10,10) have been investigated and according to the electrical characteristics The unique nanotube of these compounds in transistors, their electrical properties have been compared with carbon nanotube. Also, for  $As_2GeTe$  nanotubes, a band structure has been drawn for (4,4), (6,6), (8,8) and (10,10) structures, and then the band structure of  $P_2SiS$ ,  $As_2GeSe$  and  $As_2GeTe$  nanosheets with a band structure has been drawn. Graphene has been compared. The obtained results show that the band structure of nanosheets and nanotubes of these compounds gives the band gap. Therefore, all the mentioned compounds are semiconductors. Also, by examining different diameters of  $As_2GeTe$  composite nanotubes, strip structures very close to each other have been obtained. This confirms the nearly identical band gap for different diameters for  $As_2GeTe$  nanotubes. Semiconductivity and band gap stability of  $P_2SiS$ ,  $As_2GeSe$  and  $As_2GeTe$  nanotubes are two important advantages of using these nanotubes instead of carbon nanotubes in transistors.

**Keywords:** Nanotube, Nanosheet, Transistor, MOSFET.