سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
اثر آلایندهٔ Si روی خواص الکترونی و اپتیکی نانو ساختارهای گالیم آرسنید

محل انتشار:
مجله پژوهش فیزیک ایران, دوره 20, شماره 3 (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 13

نویسندگان:
محبوبه بیگمرادی - *گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان*

حیدرعلی شفیعی گل - *گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان*

خلاصه مقاله:
در سال‌های اخیر با پیشرفت‌های به دست آمده در رشد مواد، علاقهٔ قابل ملاحظه‌ای در زمینهٔ نیم‌رساناهای مرکب گروه (III-V) به ویژه GaAs به وجود آمده است. سیلیکون مناسب‌ترین ماده برای آلاییدگی نوع n گالیم آرسنید است. در این پژوهش خواص الکترونی نانوبلورهای Ga6As4H10 و Ga6As3SiH10، با استفاده از روش شبه پتانسیل و فرمول‌بندی نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) و با تقریب LDA در بستهٔ نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو مورد بررسی قرار می‌گیرند. نتایج حاصل از محاسبات نشان می‌دهند که هرچه اندازهٔ نانوبلور بزرگ‌تر شود مقدار گاف نواری کاهش می‌یابد. با جایگزینی اتم ناخالصی Si به‌جای اتم As در نانوبلور Ga6As4H10، گاف انرژی نسبت به حالت غیر آلاییده کوچک‌تر و تراز فرمی به لبهٔ‌نوار رسانش نزدیک می‌شود که در این حالت نانوبلور Ga6As3SiH10یک نیم‌رسانای نوع n خواهد بود. پربند چگالی بار الکتریکی در اطراف اتم‌ها نشان دهندهٔ پیوند یونی- کووالانسی بین اتم‌های Si و Ga است. در این پژوهش به بررسی ویژگی‌های اپتیکی نانوبلورهای گالیم آرسنید نیز پرداخته شده که محاسبات با تقریب تک ذره‌ای انجام شده‌اند. همچنین، از نرم‌افزار گوسین برای به دست آوردن طیف اپتیکی نانوبلورها استفاده شده است. محاسبات طیف اپتیکی برای نانوبلورهای گالیم آرسنید انتقال به آبی را نشان می‌دهند.

کلمات کلیدی:
ناخالصی نوع n, نانوبلور گالیم آرسنید, نظریهٔ تابعی چگالی, کوانتوم اسپرسو, خواص الکترونی, تقریب چگالی موضعی, انرژی جذب

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/1157395