

عنوان مقاله:

محاسبه خواص ساختاری و الکترونی ترکیبات نیم‌رسانای III-V با استفاده از تابعی‌های پیشرفته نظریه تابعی چگالی

محل انتشار:

مجله پژوهش فیزیک ایران، دوره 20، شماره 1 (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

نویسندگان:

علیمحمد نیکو - مجتمع دانشگاهی علوم کاربردی، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، شاهین شهر

حسین صادقی - مجتمع دانشگاهی علوم کاربردی، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، شاهین شهر

علی عرب - مجتمع دانشگاهی علوم کاربردی، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، شاهین شهر

سید جواد هاشمیفر - دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

خلاصه مقاله:

در این پژوهش خواص ساختاری و الکترونی ترکیبات نیم‌رسانای III-V با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی به روش امواج تخت بهبود یافته خطی بررسی شده‌اند. پس از بررسی چندین تابعی تبادلی-همبستگی، مشخص شد که تابعی‌های SOGGA و GGA-WC گزینه‌های مناسبی برای محاسبه خواص ساختاری ترکیبات مورد نظر هستند. برای محاسبه خواص الکترونی و به ویژه گاف انرژی، تابعی GGA-EV و پتانسیل تبادلی TB-mBJ همراه با تصحیح اسپین-مدار مورد تأیید قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهند که پتانسیل تبادلی TB-mBJ+SOC گاف نواری این ترکیبات را با دقت بسیار خوبی محاسبه می‌کند. در مورد موادی مانند TIAs که گاف منفی دارند، مشخص شد که پتانسیل تبادلی TB-mBJ قادر به پیش‌بینی این گاف نیست و در حقیقت گاف بر روی صفر تنظیم می‌شود. برای محاسبه جرم مؤثر نیز از چندین روش استفاده شد و پس از مقایسه با داده‌های تجربی مشخص شد که، تابعی‌های GGA-PBE و GGA-EV این کمیت را به ترتیب برای مواد با گاف کوچک و گاف بزرگ با دقت خوبی محاسبه می‌کنند و البته بهترین نتایج جرم مؤثر با روش تابعی هیبرید HSEbgfit به دست آمد. همچنین، نتایج نشان می‌دهند که تصحیح اسپین-مدار باعث می‌شود تا نتایج جرم مؤثر محاسبه شده به مقادیر تجربی نزدیک‌تر شوند.

کلمات کلیدی:

مواد III-V، ثابت شبکه، گاف انرژی، جرم مؤثر، نظریه تابعی چگالی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1157424>

