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

عنوان مقاله:
بررسی اثر تهی جا در ساختار الکترونی بلور α-Al۲O۳

محل انتشار:
مجله علوم و فنون هسته ای, دوره 40, شماره 4 (سال: 1398)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:
آنیتا عالیپور - *گروه آشکارسازی و دزیمتری پرتوها، پژوهشکده ی کاربرد پرتوها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی ایران، صندوق پستی: ۱۴۹۸-۳۱۴۶۵، کرج ایران*

امیرعباس صبوری دودران - *گروه فیزیک، دانشکده ی علوم پایه، دانشگاه پیام نور، صندوق پستی: ۳۶۹۷-۱۹۳۹۵، تهران ایران*

ارژنگ شاهور - *گروه آشکارسازی و دزیمتری پرتوها، پژوهشکده ی کاربرد پرتوها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی ایران، صندوق پستی: ۱۴۹۸-۳۱۴۶۵، کرج ایران*

خلاصه مقاله:
در این مطالعه ساختار الکترونی لوزوجهی (رمبوهدرال) α-Al۲O۳ مورد بررسی قرار گرفت. ساختار α- آلومینا متعلق به گروه فضایی و لوزوجهی با دو واحد فرمولی (۱۰ اتمی) در سلول واحد اولیه است. هرچند ساختاری که بیش‌تر مورد استفاده قرار می گیرد، شش گوش ه-ای (هگزاگونال) شامل ۱۲ اتم آلومینیم و ۱۸ اتم اکسیژن، ۶ واحد فرمولی است. نقش نقص ها در شبکه ی بلوری به خصوص نقص تهی جا در این مقاله مورد بررسی قرار گرفته است. تغییرات ساختار نواری در نبود یکی از اتم های O یا Al ارزیابی شده است. محاسبه های انجام شده (با استفاده از کد شبیه سازی کوانتوم اسپرسو) نشان داد که α-Al۲O۳ یک گذار مستقیم در نقطه‌ی Γ دارد و گاف انرژی به دست آمده از نظریه ی تابع چگالی (DFT)،eV ۳/۶ است. همچنین تهی جای O بیش‌تر از تهی جای Al بر روی ساختار الکترونی بلور C: α-Al۲O۳ تاثیرگذار بوده و در افزایش پاسخ این بلور به عنوان آشکارساز موثر است.

کلمات کلیدی:
تهی جا, آلومینا, نظریه ی تابعی چگالی (DFT)

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/1361486