

بررسی خصوصیات الکترونیکی و اپتیکی بلور کادمیم تلورید در فاز مکعبی با استفاده از اصول اولیه

SCM

کلته, خدیجه بخسینی, سید محمد بکمپانی, احمد می می از مایشگاه مواد و الکتروسرامیک) دانشکاه علوم پایه, دانشگاه فردوسی مشهد

چکيده

خصوصیات الکترونیکی از جمله چگالی الکترونی، ساختار نواری، چگالی حالتها و خواص اپتیکی نظیر طیف ات لاف انرژی الکترون و انرژی پلاسمون برای بلور CdTe در فاز مکعبی محاسبه شده است. نتایج به دست آمده هیبریداسیونی بین تراز 58 اتم کادمیم و 5p اتم تلور در نوار ظرفیت و یک گاف نواری مستقیم ۱/۶eV در جهت *آ–* را نشان می دهد. نوع پیوند Cd-Te بیشتر از نوع یونی است. با استفاده از طیف ات لاف انرژی CdTe ، انرژی پلاسمون حدود ۱۷/۴۲ که به دست آمده که به مقدار بدست آمده از روش الکترون آزاد نزدیک است.

مقدمه

لایه های ناز ک نیمرساناهای گروه II-VI کاربردهای زیادی در لیزر, آشکارسازها, دیودهای نور گسیل و ساولهای خورشیدی فتوولتائیک دارنا[]. بلور کادمیم تلورید (CdTe) دارای گاف انرژی مستقیم۱/۵eV در دمای اتاق است و بنابراین ماده مناسبی برای کاربردهای فتوولتاییک محسوب می-شود[۲]. به علت شفافیت بالای آن نور خورشید قادر است از داخل لایه آن عبورکند، در نتیجه در گستره دمایی وسیعی خواص اپتیکی خوبی را نشان میدهد. این ماده نیمرسانا در فاز مکعبی (زینکبلند) با گروه فضایی F43m (شماره ۲۱۶) و یا فاز هگزاگونال (ورتسایت) با گروه فضایی P63mc شماره (۱۸۶) متبلور میشود. در این مقاله بعضی از خواص الکترونی و اپتیکی کادمیم تلورید درفاز مکعبی با استفاده از اصول اولیه و به کمک کدهای Wien2k برسی شده است[۳].

روش محاسبات

محاسبات با استفاده از تقریب گرادیان تعمیم یافته GGA به روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی DFT هوهنبرگ، کوهنشم انجام شد[۴]. ابتدا محاسبات را با ثابت شبکه تجربی ۵۹/۴۸۱۹ [۵] انجام داده و سپس با کمینه کردن انرژی کل بلور نسبت به حجم آن (بهینه سازی حجم) ثابت شبکه نظری محاسبه شده است. محاسبات نهایی را با ثابت شبکه نظری بدست آمده، انجام شده است. مکان اتمها در این فاز به صورت زیر است:

 $(\cdot/\Upsilon \Delta \cdot \cdot/\Upsilon \Delta \cdot \cdot/\Upsilon \Delta)$ Te: (\cdot, \cdot, \cdot) Cd:

شعاع کرههای مافین تین با توجه به شعاع کره اتمی و طول پیوند آنها برابر RMT(Cd)=۲/۶a.u. و شعاع کرههای مافین تین با توجه به شعاع کره اتمی و طول پیوند آنها برابر RMT(Te)= ۲/۸a.u. RMT(Te)= ۲/۸a.u. انتخاب شده است. منحنی شکل ۱ انرژی کل بلور را به صورت تابعی از ثابت شبکه و بر حسب حجم یاخته بسیط آن با واحد (a.u.) انشان می دهد. با توجه به حجم تعادلی به دست آمده، ثابت شبکه نظری محاسبه شده و در جدول ۱ آورده شده است.



SCM

شکل ۱ : انرژی کل بلور CdTe بر حسب حجم یاخته بسیط

جدول ۱ : ثابت شبکه نظری CdTe با روشهای مختلف

روش	GGA96 (محاسبات ما)	[٦] LMTO	[V] LAPW
a : ثابت شبکه(Å)	٦/٦١٥	٦/٥٦٧	٦/٤٤

بحث و نتايج

الف) ساختار نواری – ساختار نواری محاسبه شده کادمیم تلورید در فاز مکعبی در شکل(۲) نشان داده شده است. در این نمودار مبدأ انرژی در بیشینه نوار ظرفیت و مقیاس آن بر حسب eV است. در نوار ظرفیت در محدوده صغر تا ΔeV- هیبریداسیون اربیتالهای Cd-5s و Te-4d دیده می شود. در محدوده Vev - تا ۹eV – اربیتالهای Te-4d جایگزیده است. در انتهای نوار ظرفیت نوار ناشی از اربیتال Te-5s مشاهده می شود. کمینه نوار رسانش و بیشینه نوار ظرفیت به ترتیب مربوط به اربیتالهای Cd-5s و Te-5p است. یک گاف نواری مستقیم در جهت Γ – ۲ مشاهده می شود. در جدول ۲ گاف انرژی محاسبه شده همراه با نتایج دیگران آورده شده است.



شكل ۲ : ساختار نوارى بلور CdTe



جدول ۲ : گاف انرژی (eV) محاسبه شده و مقایسه با نتایج دیگران

نوع گاف	محاسبات نظری ما	محاسبات نظری [۸]	محاسبات نظری [۹]
$E_g(\Gamma^C-\Gamma^V)$	• / ۶	•/۵۶۶	•/%۵

ب) چگالی حالتها - توزیع الکترون در طیف انرژی بوسیله چگالی حالتها توصیف می شود. طیف چگالی حالتهای کل CdTe در گستره Voet در شکل (۳) رسم شده است. در نمودار چگالی حالتها مقیاس انرژی صفر نشان دهنده مکان تراز فرمی است که با خط چین عمودی نشان داده شده است. نوار ظرفیت در ناحیه زیر تراز فرمی باگافی از نوار رسانش که بالای تراز فرمی است جدا شده است. با توجه به این نمودار نوع گاف تشخیص داده نمی - باگافی از نوار رسانش که بالای تراز فرمی است در نوار رسانش و ظرفیت یک همپوشانی بین Cd-5S و Te-55 است.



شکل ۳ : چگالی حالتهای کل CdTe در فاز هگزاگونال

ج) چگالی ابرالکترونی – چگالی ابرالکترونی بلور CdTe در فضای حقیقی صفحه (۱۱۰), در ۲ و ۳ بعد در شکل (۴) نشان داده شده است. هیبریداسیونی که بین تراز Cd-5s و Te-5p برقرار است، تاییدی بر برهم کنش کووالانسی بین Cd و Te است. در شکل (۳) بهوضوح دیده میشود که چگالی بار از مرکز بین Cd و Te به سمت Te کشیده شده است پس به جز پیوند کووالانسی، پیوند یونی نیز در Te-5P و cd-Te وجود دارد که سهم پیوند یونی بیشتر از پیوند کووالانسی است. هر چه اختلاف الکترونگاتیویته بین دو اتم افزایش یابد، جابجایی چگالی بار و خاصیت یونی بیشترمی شود [۸].



شکل ٤ : چگالی ابر الکترونی الف) در ۲ و ب) در ۳ بعد مربوط به صفحه (۱۱۰)

شانزدهمین همایش انجمن بلورشناسی و کانی شناسی ایران

د) طیف اتلاف انرژی الکترون – طیفسنجی اتلاف انرژی الکترون روش توانمندی در تجزیه و تحلیل حالتهای اشغال شده بالای تراز فرمی با تفکیک جزئی زیرنانومتر است. این طیف دربردارنده تحریک دسته جمعی الکترونهای ظرفیت (پلاسمونها) به داخل حالتهای اشغال نشده در نوار رسانش است. طیف اتلاف انرژی الکترون محاسبه شده در شکل ۵ آورده شده است. اتلاف انرژی الکترون از انرژیهای حدود ۷۶/۰ (گاف انرژی) شروع و در انرژی ۱۴٬۳۵۷ به بیشینه مقدار خود میرسد که در واقع همان انرژی مربوط به پلاسمونهای حجمی است. قله واقع بین انرژی ۱۱ تا ۱۶۹۷ مربوط به اتلاف ناشی از گذار اربیتالهای Te-5s و Cd-54 به اوربیتالهای Cd-55 و Te-57 نوار رسانش است. انرژی بیشینه اصلی [(۵)^{1–} ع–] همان انرژی پلاسمون حجمی می آست. انرژی پلاسمون برای الکترون آزاد، با درنظرگرفتن الکترونهای ظرفیت ¹55 ¹⁰ اتم کادمیم و ⁴55 ² اتم تلورید مطابق فرمول زیـر محاسبه می شود:

SCM

$$\hbar\omega_P = \hbar\sqrt{ne^2/\varepsilon_0 m} \tag{1}$$

که در آن e و m به ترتیب بار و جرم الکترون، ħ ثابت پلانک و n تعداد الکترونهای موثر در واحد حجم است. حجم یاخته بسیط بلور CdTe در فاز مکعبی ^۳(Å) ۷۲/۳۶ می باشد. تعداد الکترونهای موثر با روش الکترون آزاد، ۱۸ الکترون است و انرژی پلاسمون الکترون آزاد ۱۸/۴۸eV بهدست آمده است. با مراجعه به شکل (۳) ملاحظه می شود که برای تحریک الکترونهای اربیتال Te-5s از نوارظرفیت به نوار رسانش نیاز به انرژیهای بالا است. لذا با چشمپوشی از سهم این اربیتالها، انرژی پلاسمون الکترون آزاد ۱۷/۴۲ eV محاسبه می شود. با مقایسه این مقدار با مقدار ۱۴/۳eV بهدست آمده از شکل ۵, دیده می شود که مقدار محاسبه شده از نمودار بسیار مطلوب است.



شكل ٥ : طيف اتلاف انرژى الكترون CdTe

نتيجهگيرى

در این پژوهش ساختار الکترونی و طیف اتلاف انرژی بلور CdTe در فاز مکعبی با استفاده از روش -FP) (LAPW, در چارچوب نظریه تابع چگالی و با اعمال تقریب GGA مطالعه شده است. محاسبات, یک گاف نواری مستقیم /۶eV، در امتداد *T*-*T* را نشان میدهد. نتایج نشان میدهد که یک هیبریداسیون بین Cd-55 و Cd-55 د دیده می شود. چگالی ابرالکترونی نشان میدهد که درصد یونی پیوند بیشتر از کووالانسی است. از طیف اتلاف انرژی CdTe, انرزی پلاسمون ۱۴/۳eV است که به مقدار بدست آمده از روش الکترون آزاد نزدیک است.





مرجع ها

- [1] R. K. Sharma, G. Singh and A. C. Rastogi, Solar Energy Mater. Solar Cells, 167 (2001)67.
- [2] H. Uda, S. Ikegami and H. Sonomura, Jpn. J. Appl. Phys. 2003 (1990)29.
- [3] P. Blaha and K. Schwarz, Wien2k. Vienna University of Technology Austria (2002).
- [4] P. Blaha, D. Singh, P. I. Sorantin and K. Schwarz, Phys. Rev. B46, (1992) 1321-1325.
- [5] O. Madelung (Ed.), Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Vol. 22, Parts a, (1987).
- [6] N. E. Christensen, O. B. Christensen, Phys. Rev. B 33 (1986) 4739.
- [7] S. H. Wei, A. Zunger, Phys. Rev. B 60 (1999) 5404.
- [8] A. E. Merad, M. B. Kanoun, G.Merad, J. Cibert and H. Aourag, "Full-potential investigation of the electronic and optical properties of stressed CdTe and ZnTe", Materials Chemistry and Physics 92 (2005)333-339.
- [9] X. Chen, X. Hua, J. Hua, J. M. Langlois and W. A. Goddard, Phys. Rev. B 53 (1996) 1377.



بررسی پارامترهای موثر روی بهبود خواص کریستالی فیلم های نازک اکسید قلع تهیه شده به روش سل- ژل مظلوم، جمال – اسمعیلی قدسی، فرهاد گروه فیزیک دانشگاه گیلان، mazloom81@gmail.com

SCM

چکیدہ

در این مقاله تاثیر دمای بازپخت و تعداد دفعات لایه نشانی روی ساختار کرییستالی فیلم های اکسید قلع تهیه شده از تگنیک غوطه وری سل- ژل مورد بررسی قرار گرفت. خواص ساختاری فیلم ها بوسیله آنالیز XRD مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج الگوی پراش پرتو X نشان می دهد که فیلم های تهیه شده تا دمای ۲۵۰° آمورف بوده و ساختار کریستالی تتراگونال فیلم ها در دمای ۲۵°۲۵ شکل گرفت که صفحات در راستاهای (۱۱۰)، (۱۰۱) و (۲۱۱) رشد یافته اند. مشاهده شد که با افزایش تعداد دفعات غوطه وری قله های متناظر با بازتاب از صفحات کریستالی تیزتز شده و اندازه دانه ها بزرگتر می شود.

مقدمه

فیلم های نازک اکسید قلع، نیم رسانای تبهگن نوع n با گاف نواری پهن می باشند. این فیلم ها به علت رسانایی الکتریکی بالا، تراگسیلندگی بالا در ناحیه مرئی و بازتابندگی خوب در ناحیه فرو سرخ، در تکنولوژی الکترونیک نوری مورد توجه ویژه ای قرار گرفته اند. دی اکسید قلع دارای ساختار روتیل می باشد. ساختار روتیل سلول واحد چهاروجهی (γ = β = β , z = a = b = c) و تقارن گروه فضایی P42mnm دارد. سلول واحد از شش اتم، دو اتم قلع و چهاروجهی (γ = β = β = ¢) و تقارن گروه فضایی P42mnm دارد. سلول واحد از شش اتم، دو اتم قلع و چهار وجهی (γ = β = β = ¢) و تقارن گروه فضایی P42mnm در سلول واحد از شش اتم، دو اتم قلع و چهار وجهی (γ = β = β = ¢) و تقارن گروه فضایی P42mnm دارد. سلول واحد از شش اتم، دو اتم قلع و چهار اتم اکسیژن تشکیل شده است . هر اتم قلع (کاتیون) در مرکز شش اتم اکسیژن (آنیون) که تقریباً در گوشه های منثلث متساوی الاضلاع قرار گرفته اند، احاطه شده است . هر اتم الع میژن توسط سه اتم قلع که تقریباً در گوشه های مثلث متساوی الاضلاع قرار گرفته اند، احاطه شده است. ثابت های شبکه ۲۰۷۳m مقلع که تقریباً در گوشه های مثلث متساوی الاضلاع قرار گرفته اند، احاطه شده است. ثابت های شبکه ۲۰۷۳m بند و خلوص بالای فیلم ها و مثلث متساوی الاضلاع قرار گرفته اند، احاطه شده است. ثابت های شبکه ۲۰۷۳m مراحی و خلوص بالای فیلم ها و ار آ. روش په می بادر لایه نشانی می باشد[۲۰] . روش پاره بندانی، یکنواختی و خلوص بالای فیلم ها و روش پاره برهایی نظیر دمای بازیخت، تعداد دفعات غوطه وری و غلظت سل لایه نشانی روی خواص ساختاری و روش پاره پر وی نیار مولی نظیر دمای بازیخت، تعداد دفعات غوطه وری و غلظت سل لایه نشانی روی خواص ساختاری و روش پاره بر وی نیکی غوطه وری ته غلطه وری و غلظت سل لایه نشانی روی خواص ساختاری و روش پاره پر برایی فیلم های نازک اکسید قلع از روش ساختاری و به مای بازی و به می بازد و به می بازد و به می بازمترهایی نظیر دمای بازیخت و دفعات غوطه وری و غلظت سل لایه نشانی روی خواص ساختاری و می روش پاره بر های در داین پژوهش فیلم های نازک اکسید قلع از روش ساخ در و و به می می بازی کا کسید قلع از روش مای در در وی بوره می می بازه در می مرد ور و مای بازیخت و دفعات نوم و دفعات لایه نشانی روی ساختار کریستالی فیلم ها موره وی می می می مر و می می مر وی می ما مرد و به می می می م

¹ Rutile Structure