



بررسی خواص اپتیکی سرامیک SiC در دو فاز مکعبی و هگزاگونال و اثر افزودنی‌ها بر آن

حسین اصغر رهنمای علی‌آباد^۱، سیدمحمد حسینی^۲، عباس یوسفی^۳

h_rahnamay@yahoo.com

^۱گروه فیزیک دانشگاه تربیت معلم سبزوار، ^۲گروه فیزیک دانشگاه فردوسی مشهد

^۳مؤسسه تحقیقاتی پرتاووس، شرکت لعاب مشهد

چکیده:

خواص اپتیکی سرامیک SiC در دو فاز مکعبی و هگزاگونال و اثر افزودنی‌های گروه نیتروژن با استفاده از محاسبات اصول اولیه بر پایه نظریه تابعی چگالی و با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) مطالعه شده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که با افزودن ناخالصی‌های Bi, Sb, As, P, N به سیلیکون کارباید در فاز هگزاگونال گاف انرژی این ترکیب کاهش می‌یابد و خواص الکترونیکی آن بهبود می‌گردد. گاف انرژی غیر مستقیم سیلیکون کارباید در فاز مکعبی کوچکتر از فاز هگزاگونال می‌باشد و به عبارتی فاز مکعبی خواص الکترونیکی بهتری نسبت به فاز هگزاگونال دارد. فاز هگزاگونال خاصیت دو ضریب شکستی داشته ولی فاز مکعبی یک ضریب شکست دارد. ضریب شکست این دو فاز در راستای x با همدیگر تفاوت چندانی نمی‌کند.