



دانشکده فیزیک و مهندسی هسته ای پایاننامه کارشناسی ارشد نانو فیزیک

مطالعهٔ ساختار الکترونی و خواص ایتیکی نانو ساختارهآی سیلیکون نيترايد

نگارنده: محمد خسروی

استادان راهنما

دکتر مرتضی ایزدی فرد دکتر محمد ابراهیم قاضی

شهريور ۱۳۹۸

تقديم به همسرم: که سایهٔ مهربانیش سایه سار زندگیم می باشد، او که اسوهٔ صبر و تحمل بوده و مشکلات مسیر را برایم تسهیل نمود.

سپاسگزاری...

سپاس فراوان از اساتید فرهیخته و گرامی جناب آقای دکتر ایزدی فرد و جناب آقای دکتر قاضی که راهنماییهای بی دریغ ایشان همواره چراغ راهم در انجام این پایان نامه بود.

محمد خسروی شهریور ۱۳۹۸

تعهد نامه

اینجانب محمد خسروی دانشجوی کارشناسی ارشد رشته فیزیک و مهندسی هسته ای دانشگاه شاهرود، نویسنده پایاننامه با عنوان مطالعهٔ ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نانو ساختارهای سیلیکون نیتراید ، تحت راهنمایی مرتضی ایزدی فرد و محمد ابراهیم قاضی متعهد می شوم:

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای دیگر پژوهش گران، به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب این پایاننامه، تا کنون توسط خود، یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک
 یا امتیازی در هیچجا ارایه نشده است.
- حقوق معنوی این اثر، به دانشگاه صنعتی شاهرود تعلق دارد، و مقالات مستخرج با نام
 * دانشگاه صنعتی شاهرود ** یا * Shahrood University of Technology ** به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در بهدست آوردن نتایج اصلی پایاننامه تاثیرگذار بودهاند،
 در مقالات مستخرج از پایاننامه رعایت می گردد.
- در تمام مراحل انجام این پایاننامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها)
 استفاده شده است، ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در تمام مراحل انجام این پایاننامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته (یا استفاده شده است)، اصل رازداری و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

محمد خسروی شهریور ۱۳۹۸

مالکیت نتایج و حق نشر

- تمام حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامههای رایانهای، نرمافزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود میباشد. این مطلب باید به نحو مقتضی، در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در این پایاننامه بدون ذکر منبع مجاز نمی باشد.

چکیدہ

در این پایان نامه با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی و بستهٔ محاسباتی Wien۲k و با استفاده از دو تقريب شيب تعميم يافته (GGA) و چگالی موضعی (LDA)، ساختار الکترونی و خواص اپتیکی قاز بتا سیلیکون نیتراید (β – Sim N_F) در حالت های حجمی و نانو صفحات خالص و آلاییده با اکسیژن (۶/۲، ۱۲/۵ و ۲۵ درصد)بررسی شد. برای بررسی خواص الکترونی، ساختار نواری و چگالی حالت های کلی و جزئی و برای بررسی خواص اپتیکی قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضرایب شکست و خاموشی و جذب و بازتاب و همچنین رسانندگی ایتیکی و تابع اتلاف انرژی الکترون محاسبه و بررسی شدند. نتایج این بررسی ها نشان دادند که $\beta - Si_{\rm T} N_{
m F}$ در حالت حجمی دارای گاف نواری غیر مستقیم است که مقدار آن در تقریب های GGA و LDA بترتیب ۴/۲ و ۴/۱۸ الکترون ولت بدست آمدند. برای نانو صفحات خالص $\beta - Si_{ au}N_{ au}$ محاسبات نشان دادند که گاف نواری به نوع مستقیم تبدیل می شود. مقدار محاسبه شدهٔ گاف نواری برای این نانو صفحات در تقریب های GGA و LDA بترتیب ، و $\gamma/7$ الكترون ولت بدست آمدند. در نانو ورقه صفحات $\beta - Si_{\rm T}N_{\rm F}$ آلاييده با اكسيژن نوارهای ناخالصی وابسته به ناخالصی اکسیژن در محدودهٔ تراز فرمی مشاهده شدند که چگالی آنها با افزایش درصد ناخالصی افزایش یافت. همچنین هم در نوارهای ظرفیت و هم در نوارهای رسانش نانو صفحات آلاییده با اکسیژن، در مقایسه با نانو صفحات خالص افزایش قابل توجه نوارها مشاهده گردید.

کلمات کلیدی: نظریهٔ تابعی چگالی، تقریب شیب تعمیم یافته(GGA)، تقریب چگالی موضعی(LDA)، سیلیکون نیتراید ($Si_{7}N_{6}$)، ساختار نواری، چگالی حالت ها، خواص اپتیکی، نانو صفحات خالص $Si_{7}N_{6} - Si_{7}N_{7}$ ، نانو صفحات آلاییده با اکسیژن $\beta - Si_{7}N_{7}$

ليست مقالات مستخرج از پاياننامه

 محمد خسروی، مرتضی ایزدی فرد، محمد ابراهیم قاضی، مطالعهٔ ساختار الکترونی نیمرسانای سیلیکون نیتراید. کنفرانس سالانهٔ فیزیک، تبریز، ۲۰۱۹

فهرست مطالب

ق	اوير	فهرست تص
ث	اول	فهرست جد
١	نیمرسانای سیلیکون نیتراید و مروری به کارهای انجام شده	۱ معرفی
١	ىقدمە	• 1.1
٢	يمرساناها	۲.۱ ن
٢	۱.۲. نیمرساناهای گروه IV	١
٣	۲.۲. نیمرساناهای گروه III-V نیمرساناهای گروه ۲.۲.	١
٣	۳.۲. نیمرساناهای گروه II-VI	١
۴	ساختار بلوری سیلیکون نیتراید	J T.1
٧	چگالی حالات و ساختار نواری $eta = -Si_3N_4$	F 19.1
٩	فواص فیزیکی و کاربردهای سیلیکون نیتراید	۰۵.۱
١٥	انو ساختارهای سیلیکون نیتراید	۶.۱ ن
١٢	فواص اپتیکی جامدات	רא איץ אין אין אין אין אין אין אין א
١٢	.١.٧ مقدمه	١
١٢	۲.۷. تابع دی الکتریک مختلط و رسانندگی اپتیکی مختلط	١
14	.۳.۷ رابطهٔ تابع دی الکتریک مختلط با مشاهده پذیرها	١
۱۵	۴.۷. بازتابندگی	١
18	۵.۷. تابع اتلاف انرژی	١
18	.۶.۷ رابطهٔ کرامرز_کرونیگ	١
۱۹	ابعی چگالی	۲ نظريهٔ ت
۱۹	نظريهٔ تابعی چگالی	1.7
۱٩	۱.۱.۱ معادلهٔ شرودینگر	ſ
۲۱	۲.۱.۱ قضایای هوهنبرگ_کوهن	٢

٢٢	۳.۱.۲ رهيافت كوهن_شم	
۲۳	روش های حل معادلات تک ذره ای کوهن_شم	۲.۲
74	۱.۲.۲ روش امواج تخت(<i>PW</i>)	
74	۲.۲.۲ روش امواج تخت بهینه شده (APW)	
۲۵	۳.۲.۲ روش امواج تخت بهینه شدهٔ خطی(LAPW)	
78	۴.۲.۲ روش پتانسیل کامل امواج تخت بهینه شدهٔ خطی(FP – LAPW)	
~~/	TTZ:∀Z	.
1 v		معرقے
1 V 7 A	معرفی برگامه <i>WIEWKK ،</i>	ادا ب ب
	کردیب اجرای برگامه	1.1
۱۸ ۳	۱۰۱۰ برنامه های مرحله اماده ساری ۲۵ ۱۵ ۱۰ ۱۰ برنامه های مرحله اماده ساری ۲۰ ۲۵	
11	۱.۱.۱ برنامه های مرحله حل خودسار نار[۲۰، ۱۵]	
٣٣	ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نیمرسانای حجمی $\beta-Si_{ au}N_{ ext{F}}$ خالص	ٰ بررسے
٣٣	مقدمه	1.۴
٣۴	بهینه سازی پارامترهای ورودی	۲.۴
٣۴	۱.۲.۴ بهینه سازی نقاط k در ناحیهٔ اول بریلوئن	
٣۴	۲.۲.۴ بهینه سازی <i>RK_{max} ب</i> هینه سازی ۲.۲.۴	
۳۵	۳.۲.۴ بهینه سازی <i>G_{max}</i> بهینه سازی	
36	۴.۲.۴ بهینه سازی حجم و محاسبهٔ ثابت های تعادلی شبکه	
٣٧	۵.۲.۴ واهلش ساختار	
۳۸	۶.۲.۴ شکل ساختار و طول پیوندها	
۳۸	بررسي خواص الكتروني تركيب $eta = Si_{m}N_{F}$	۳.۴
۳۸	المحاسبة ساختار نوارى	
۴۰	۲.۳.۴ محاسبهٔ چگالی حالت های کلی (DOS) وجزئی (PDOS)	
47	۳.۳.۴ توزيع چگالي ابر الکتروني	
47	بررسی خواص اپتیکی ترکیب $\beta - Si_{\mathfrak{P}}N_{\mathfrak{F}}$	۴.۴
47	۱.۴.۴ تابع دی الکتریک	
44	۲.۴.۴ ضریب شکست و ضریب خاموشی ۲.۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰	
۴۵	۳.۴.۴ ضریب جذب	
49	۴.۴.۴ رسانندگی اپتیکی	
49	۵.۴.۴ بازتابندگی	
۴۷	۶.۴.۴ اتلاف انرژی	
۴۷	نتیجه گیری	۵.۴

49	$eta=Si_{ extsf{W}}N_{ extsf{F}}$ ی ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نانو ورقه های خالص $eta_{ extsf{W}}$	بررس	۵
49	مقدمه	۱.۵	
49	بهینه سازی پارامترهای ورودی ۵۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰	۲.۵	
۵۰	۱.۲.۵ بهینه سازی نقاط k در ناحیهٔ اول بریلوئن		
۵۰	۲.۲.۵ بهینه سازی انرژی قطع		
۵١	۳.۲.۵ بهینه سازی حجم ابر سلول و محاسبهٔ ثابت های تعادلی شبکه .		
۵۲	محاسبهٔ ساختار نواری	۳.۵	
۵۳	محاسبهٔ چگالی حالت های کلی و جزئی	۴.۵	
۵۵	بررسی خواص اپتیکی نانو ورقهٔ خالص $eta_{F} N_{F} - Si_{T} N_{F}$	۵.۵	
۵۵	۱.۵.۵ تابع دی الکتریک		
۵۶	۲.۵.۵ ضریب شکست و ضریب خاموشی ۲.۵.۰		
۵۷	۳.۵.۵ ضریب جذب		
۵۷	۴.۵.۵ رسانندگی اپتیکی		
۵۷	۵.۵.۵ بازتابند <i>گ</i> ی		
۵٨	۶.۵.۵ اتلاف انرژی		
۵٩	نتیجه گیری	۶.۵	
۶۱	$eta = Si_{ au} N_{ au}$ م ساختار الكتروني نانو ورقه هاي آلايش يافتهٔ $eta_{ au}$	بررسے	۶
۶١	شيوهٔ آلایش	1.8	
۶۳	بهینه سازی پارامترهای ورودی و ثابت های تعادلی شبکه		
66		۲.۶	
cc	محاسبهٔ ساختار نواری و چگالی حالات کلی و جزئی	7.8 7.8	
//	محاسبهٔ ساختار نواری و چگالی حالات کلی و جزئی	7.9 7.9	
<i>۶</i> ٩	محاسبهٔ ساختار نواری و چگالی حالات کلی و جزئی	7.8 7.8	
99 77	محاسبهٔ ساختار نواری و چگالی حالات کلی و جزئی	7.8 7.8	
۶۹ ۲۲ ۷۵	محاسبهٔ ساختار نواری و چگالی حالات کلی و جزئی	r.s r.s	
89 77 70 70	محاسبهٔ ساختار نواری و چگالی حالات کلی و جزئی	т.я т.я ۴.я	
99 77 70 70 70	محاسبهٔ ساختار نواری و چگالی حالات کلی و جزئی	т.я т.я ۴.я	
89 77 70 70 70 78 79	محاسبهٔ ساختار نواری و چگالی حالات کلی و جزئی	r.s r.s	
99 77 70 70 70 70 79 79 78	محاسبهٔ ساختار نواری و چگالی حالات کلی و جزئی	r.s r.s	
 ۶۹ ۷۲ ۷۵ ۷۵ ۷۶ ۷۶ ۷۶ ۷۸ ۷۸ 	محاسبهٔ ساختار نواری و چگالی حالات کلی و جزئی	r.\$ r.\$	
۶۹ ۷۲ ۷۵ ۷۵ ۷۶ ۷۶ ۷۸ ۷۸ ۷۸ ۷۹	محاسبهٔ ساختار نواری و چگالی حالات کلی و جزئی	r.s r.s	

فهرست تصاوير

٢	ساختار الماسي	۱.۱
٣	ساختار زینک بلند	۲.۱
۵	سیلیکون نیتراید در فازهای آلفا بتا و گاما	۳.۱
۶	سلول واحد سیلیکون نیتراید در فازهای آلفا و بتا	۴.۱
۶	چهار وجهی های SiN۴	۵.۱
٨	ساختار نواری و چگالی حالات سیلیکون نیتراید در فاز بتا	۶.۱
	ساختار نواری و چگالی حالات β – Si _۳ N _۴ حجمی در حالت (آ) : خالص	۷.۱
٨	و (ب): آلاییده با ناخالصی آرسنیک	
	ساختار نواری و چگالی حالات $eta = Si_{ extsf{w}} N_{ extsf{s}}$ حجمی در حالت (آ) : خالص	٨.١
٩	(ب) : آلاییده با عنصر ایتریوم	
	ساختار نواری و چگالی حالات جزئی نانو سیم های β – Si _W N _F در حالت	۹.۱
۱۱	خالص	
۱۱	آلاییده با اکسیژن $eta = Si_{m{w}}N_{m{v}}$ آ	۱۰.۱
١٢	ساختار نواری نانو سیم های $\beta - Si_{W}N_{F}$ آلاییده با (آ): کربن (ب): کروم .	11.1
	بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک برای نمونهٔ حجمی – eta	۱۲.۱
۱۷	Si _m N _f در حالت (آ): خالص و (ب):آلاییده با آرسنیک	
	بخش حقیقی ضریب شکست و بخش موهومی ضریب شکست (ضریب	۱۳.۱
	خاموشی) برای نمونهٔ حجمی β-Si _w N _F در حالت (آ): خالص و (ب):آلاییده	
۱۸	با آرسنیک	
	نمودار بازتابندگی و جذب برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{ extsf{w}}N_{ extsf{v}}$ در حالت (آ):	14.1
۱۸	خالص و (ب): آلاییده با آرسنیک	
٣٥	ترتیب اجرای برنامه ها در مراحل آماده سازی و حل خودسازگار	۱.۳
۳۵	بهینه سازی نقاط k برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\pi}N_{\epsilon}$ خالص	1.4
۳۵	بهینه سازی انرژی قطع برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\text{W}}N_{\text{F}}$ خالص	۲.۴
36	دهمانه سازی یارامتر Gmax برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\rm W}N_{\rm F}$ خالص	۳.۴

36	نمودار انرژی کل سلول $eta - Si_{ extsf{w}} N_{ extsf{e}}$ بر حسب حجم	۴.۴
۳۸		۵.۴
٣٩	مسیر انتگرال گیری در منطقهٔ اول بریلوئن در ساختار ورتسایت	۶.۴
٣٩	هاختار نواری محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $eta = Si_{m}N_{ extsf{F}}$ خالص	۷.۴
	چگالی حالات کلی محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $eta_{r}N_{ extsf{F}}$ خالص با	۸.۴
41	استفاده از تقریب GGA	
	چگالی حالت های جزئی محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $eta-Si_{ au}N_{ au}$ خالص	۹.۴
41	با استفاده از تقریب GGA	
	چگالی حالت های جزئی اتم های نیتروژن محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی	۱۰.۴
41	$\dots \dots $	
	چگالی حالت های جزئی اتم های سیلیکون محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی	۱۱.۴
47	$\dots \dots $	
۴۳	توزيع الكترون هاى ظرفيت در سلول واحد $eta - Si_{m}N_{F}$	۱۲.۴
۴۳	$\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ بخش حقیقی تابع دی الکتریک $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$	۱۳.۴
44	$\beta - Si_{\texttt{T}}N_{\texttt{F}}$ بخش موهومی تابع دی الکتریک $\beta - Si_{\texttt{T}}N_{\texttt{F}}$	14.4
۴۵	$eta - Si_{ extsf{w}} N_{ extsf{v}}$ نمودار ضریب شکست محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{ extsf{w}} N_{ extsf{v}}$	10.4
۴۵	$\beta - Si_{m}N_{F}$ نمودار ضریب خاموشی محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{m}N_{F}$	18.4
49	$\beta - Si_{\texttt{T}}N_{\texttt{F}}$ نمودار ضریب جذب محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\texttt{T}}N_{\texttt{F}}$	۱۷.۴
49	$\beta - Si_{m}N_{F}$ نمودار رسانندگی اپتیکی محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{m}N_{F}$	۱۸.۴
۴۷	$\beta - Si_{m}N_{F}$ نمودار بازتابندگی محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{m}N_{F}$	19.4
۴٨	$eta-Si_{ extsf{w}}N_{ extsf{k}}$ نمودار تابع اتلاف انرژی الکترون محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی	۲۰.۴
۵۰	$\beta - Si_{w}N_{s}$ بهینه سازی نقاط k در شبکهٔ وارون برای نانو ورقهٔ خالص k	۱.۵
۵١	بهينه سازي انرژي قطع براي نانو ورقهٔ خالص $\beta - Si_{\pi}N_{\epsilon}$	۲.۵
۵١	$\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ بهینه سازی حجم و ثابت های تعادلی شبکه برای ابر سلول	۳.۵
۵۲	$\beta - Si_{\mathfrak{m}}N_{\mathfrak{F}}$ ساختار نواری نانو ورقهٔ خالص	۴.۵
۵۳	$eta - Si_{W}N_{F}$ چگالی حالت های کلی با اسپین بالا و پائین برای نانو ورقهٔ خالص	۵.۵
۵۴	چگالی حالت های جزئی با اسپین بالا برای نانو ورقهٔ خالص β – Si _w N _F .	۶.۵
	چگالی حالت های جزئی اتم های نیتروژن نوع ۱ و ۲ در نانو ورقهٔ خالص	۷.۵
۵۴	$\beta - Sir N_{F}$	
۵۴	چگالی حالت های جزئی اتم های سیلیکون در نانو ورقهٔ خالص β – Si _w N _F	٨.۵
۵۵	. $\beta - Si_{W}N_{F}$ نمودار بخش حقیقی تابع دی الکتریک برای نانو ورقهٔ خالص	۹.۵
۵۶	$eta - Si_{ extsf{r}} N_{ extsf{r}}$ نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک برای نانو ورقهٔ خالص	۵.۰۱

	etaنمودار ضرایب شکست و خاموشی محاسبه شده برای نانو ورقهٔ خالص – eta	۱۱.۵
۵۶	$\ldots \ldots Si_{T}N_{F}$	
۵۷	$eta - Si_{ extsf{w}} N_{ extsf{e}}$ نمودار ضریب جذب محاسبه شده برای نانو ورقهٔ خالص	۱۲.۵
۵٨	. $eta - Si_{ extsf{N}}N_{ extsf{F}}$ نمودار رسانندگی اپتیکی محاسبه شده برای نانو ورقهٔ خالص	۱۳.۵
۵٨	$\beta - Si_{ au}N_{ extsf{F}}$ نمودار بازتابندگی محاسبه شده برای نانو ورقهٔ خالص	14.0
۵۹	$eta-Si_{ extsf{W}}N_{ extsf{F}}$ نمودار اتلاف انرژی الکترونی محاسبه شده برای نانو ورقهٔ خالص	۱۵.۵
97	ابرسلول انتخابی شامل ۵۶ اتم برای انجام آلایش	۱.۶
۶۳	ابر سلول $\beta = Si_{m}N_{ m F}$ شامل ۵۶ اتم در آلایش ۶/۲۵ درصد اکسیژن $\beta = Si_{m}N_{ m F}$	۲.۶
94	ابر سلول $\beta = Si_{m}N_{ m F}$ شامل ۵۶ اتم در آلایش ۱۲/۵ درصد اکسیژن $\beta = Si_{m}N_{ m F}$	۳.۶
94	ابر سلول $\beta = Si_{m}N_{ m F}$ شامل ۵۶ اتم در آلایش ۲۵ درصد اکسیژن $\beta = Si_{m}N_{ m F}$	۴.۶
۶۵	نمودار انرژی بر حسب حجم محاسبه شده برای آلایش ۶/۲۵ درصد اکسیژن	۵.۶
۶۵	نمودار انرژی بر حسب حجم محاسبه شده برای آلایش ۱۲/۵ درصد اکسیژن	9.9
۶۵	نمودار انرژی بر حسب حجم محاسبه شده برای آلایش ۲۵ درصد اکسیژن	۷.۶
۶۷	ساختار نواری نانو ورقهٔ $\beta - Si_{m}N_{ m f}$ آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن	٨.۶
۶۷	چگالی حالت های کلی نانو ورقهٔ $eta = Si_{ au} N_{ au}$ آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن	۹.۶
۶٨	چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ β – Si _w N _F آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن	۰.۶
۶٨	چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $\beta - Si_{\rm W} N_{\rm F}$ آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن	11.8
۶٨	چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ β – Si _w N _۴ آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن	۱۲.۶
۶٩	چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $\beta - Si_{\rm T}N_{ m F}$ آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن	۱۳.۶
۶٩	ساختار نواری نانو ورقهٔ $\beta - Si_{ au} N_{ extsf{F}}$ آلاییده با ۱۲/۵ درصد اکسیژن	14.9
γ٥	چگالی حالت های کلی نانو ورقهٔ $eta = Si_{ au} N_{ au}$ آلاییده با ۱۲/۵ درصد اکسیژن	۱۵.۶
۷۰	چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ β – Si _w N _۴ آلاییده با ۱۲/۵ درصد اکسیژن	18.8
۷۱	چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ ۶i۳N _۴ آلاییده با ۱۲/۵ درصد اکسیژن	۱۷.۶
۷۱	چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ β – Si _w N _F آلاییده با ۱۲/۵ درصد اکسیژن	۱۸.۶
۷۱	چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ ۶i۳N _۴ آلاییده با ۱۲/۵ درصد اکسیژن	19.8
٢٧	اختار نواری نانو ورقهٔ $\beta - Si_{ extsf{w}}N_{ extsf{e}}$ آلاییده با ۲۵ درصد اکسیژن	۲۰.۶
۷۳	. چگالی حالت های کلی نانو ورقهٔ $Si_{ au}N_{ au}$ آلاییده با ۲۵ درصد اکسیژن	۲۱.۶
۷۳	چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ ۶i۳N _۴ آلاییده با ۲۵ درصد اکسیژن	22.8
۷۳	چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $Si_{ au}N_{ ext{F}}$ آلاییده با ۲۵ درصد اکسیژن	۲۳.۶
۷۴	چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ ۶i۳N _۴ آلاییده با ۲۵ درصد اکسیژن	14.9
۷۴	چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $eta_{ ext{r}} N_{ ext{F}}$ آلاییده با ۲۵ درصد اکسیژن	۲۵.۶
	بخش حقیقی تابع دی الکتریک در نانو ورقهٔ $eta = Si_{ extsf{w}} N_{ extsf{e}}$ آلاییده با اکسیژن	79.9
۷۵	محاسبه شده در تقریب GGA	

	بخش موهومی تابع دی الکتریک در نانو ورقهٔ $\beta - Si_{ au}N_{ au}$ آلاییده با اکسیژن	۲۷.۶
٧۶	محاسبه شده در تقریب GGA	
	نمودار ضریب شکست در نانو ورقهٔ ۶- <i>Si</i> ۳N _۴ آلاییده با اکسیژن در تقریب	۲۸.۶
٧٧		
	نمودار ضریب خاموشی در نانو ورقهٔ $Si_{ au}N_{ au}$ آلاییده با اکسیژن در تقریب	۲۹.۶
٧٧		
	نمودار ضریب جذب در نانو ورقهٔ $\beta - Si_{ au}N_{ au}$ آلاییده با اکسیژن در تقریب	۳∘.۶
Υ٨		
	نمودار رسانندگی اپتیکی در نانو ورقهٔ $eta_{F} - Si_{F} N_{F}$ آلاییده با اکسیژن در تقریب	۳۱.۶
۷۹		
٧٩	GGA نمودار بازتابندگی در نانو ورقهٔ $\beta - Si_{\operatorname{w}}N_{\operatorname{F}}$ آلاییده با اکسیژن در تقریب	۳۲.۶
	نمودار تابع اتلاف انرژی در نانو ورقهٔ $eta_{F} - Si_{T}N_{F}$ آلاییده با اکسیژن در تقریب	۳۳.۶
٨٥		

فهرست جداول

34	موقعیت اتم ها در ترکیب سیلیکون نیتراید بتا	۱.۴
٣٧	فادلی شبکه برای نمونهٔ حجمی $eta = Si_{ extsf{w}} N_{ extsf{F}}$ خالص $\beta = Si_{ extsf{w}} N_{ extsf{F}}$	۲.۴
٣٧	$\dots \dots \beta = Si_{ extsf{w}}N_{ extsf{e}}$ مدول حجمی $\beta = Si_{ extsf{w}}N_{ extsf{e}}$ مدول حجمی	۳.۴
۳۸	. موقعیت اتم ها در سلول واحد $eta = Si_{ extsf{w}} N_{ extsf{k}}$ حجمی پس از واهلش ساختار	۴.۴
۴۰	$\beta = Si_{ extsf{w}}N_{ extsf{e}}$ در حالت حجمی $egin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	۵.۴
	مقادیر محاسبه شده ثابت دی الکتریک استاتیک و ضریب شکست و مقایسهٔ	۶.۴
۴۸	آن با سایر کارها	
۵۲	پارامترهای تعادلی شبکه و مدول حجمی برای نانو ورقهٔ β – Si _w N _F خالص	۱.۵
۶۳	انتخاب جایگاه مناسب برای جانشینی اکسیژن	۱.۶
99	$eta - Si_{ extsf{w}}N_{ extsf{s}}$ ثابت های تعادلی شبکه برای آلایش اکسیژن در نانو ورقهٔ	۲.۶

فصل ۱ معرفی نیمرسانای سیلیکون نیتراید و مروری به کارهای انجام شده

۱.۱ مقدمه

مواد جامد به سه گروه رسانا، نارسانا و نیمرسانا تقسیم بندی می شوند. به کمک نظریه نواری می توان این سه دسته را از هم تفکیک نمود. جسم جامد در صورتی رفتار فلزی از خود نشان خواهد داد که بعضی از نوارهای انرژی آن بطور جزئی اشغال شده باشند. اما در برخی مواد گاف بین نوار ظرفیت و نوار رسانش کوچک است و الکترونها براحتی و با یک تحریک گرمایی کوچک می توانند از نوار ظرفیت به نوار رسانش گذار کنند. در اینصورت هم نوار ظرفیت و هم نوار رسانش بخشی پر می شوند و هر دو می توانند در رسانش الکتریکی شرکت کنند. اینگونه مواد، نیمرسانا ۱ نام دارند [۱]. اما در دستهٔ دیگر مواد که نارسانا(عایق) ۲ نام دارند، گاف نواری به قدری بزرگ است که الکترون نوار ظرفیت که کاملا پر است نمی تواند به نوار رسانش گذار کند. در نتیجه نوار بخشی پر نداریم و رسانش الکتریکی نیز در اینگونه مواد وجود نخواهد داشت.

با توجه به اینکه ترکیب سیلیکون نیتراید (Sir Nf) مطالعه شده در اینکار یک نیمرسانا است

¹Semiconductor

 $^{^{2}}$ Insulator

۲ معرفی نیمرسانای سیلیکون نیتراید و مروری به کارهای انجام شده

،لذا در ادامه فقط مواد نيمرسانا مورد توجه خواهند بود.

۲.۱ نیمرساناها

نیمرساناها از جالب توجه ترین و مفیدترین گروه جامدها هستند که کاربردهای فراوانی در ساخت قطعات اپتوالکترونیکی و ترانزیستورها دارند. نیمرساناها شامل گسترهٔ وسیعی از مواد با خواص فیزیکی و شیمیایی متفاوت اند و بسته به اینکه عناصر تشکیل دهنده آنها متعلق به کدام گروه از جدول تناوبی باشند، به گروههای مختلفی تقسیم می شوند:

IV.۱ نیمرساناهای گروه IV

نیمرساناهای گروه IV جزو نیمرساناهای عنصری بوده که معروف ترین گروه نیمرساناها نیز می باشند. پرکاربردترین آنها سیلیسیم (Si) و ژرمانیوم (Ge) بوده که در ساختار الماسی متبلور می شوند. ساختار الماسی یک شبکه مکعبی مرکز وجه پر (FCC) ^۱ است که پایهٔ آن از دو اتم تشکیل شده و هر اتم توسط چهار همسایه احاطه می شود و یک چهار وجهی منتظم تشکیل می دهند(شکل ۱.۱). گاف نواری سیلیسیم غیرمستقیم است یعنی بازترکیب



شکل ۱.۱: ساختار الماسی [۲]

الکترون ـ حفره در گاف نواری با برهمکنش با یک فونون در شبکه بلوری همراه است که این بازدهی گسیل نور از ماده را کاهش می دهد. بنابراین، این گروه نیمرساناها گزینه ی مناسبی برای استفاده در دیودهای نورگسیل(LED) ^۲ و لیزری نمی باشندو بایستی بدنبال ترکیبات دیگری از نیمرساناها باشیم.

¹Face Centered Cubic

²Light Emiting Diods

۲.۲.۱ نیمرساناهای گروه V-III

این نیمرساناها از دو عنصر یکی از گروه سوم و دیگری از گروه پنجم جدول تناوبی تشکیل می شوند و به همین دلیل جزو نیمرساناهای ترکیبی محسوب می گردند. ساختار بلوری این نیمرساناها غالبا سولفید روی است. سولفید روی همان ساختار الماسی است با این تفاوت که دو اتم تشکیل دهنده ی پایه در شبکه از دو نوع متفاوت هستند. به این ساختار، زینک بلند (ZB) می گویند(شکل ۲۰۱).



پیوندهای شیمیایی نیمرساناهای V-III از نوع کوالانسی است ولی بدلیل تفاوت زیاد الکترونگاتیوی دو عنصر سازنده ترکیب، درصدی نیز یونی می باشد که این باعث پایدارتر شدن ترکیب می شود. این ترکیبات در برخی موارد در فازهای ورتسایت ۲ و نمک طعام نیز متبلور می شوند که فاز ورتسایت از لحاظ ترمودینامیکی پایدارتر است [۴].

II-VI نیمرساناهای گروه IV-VI

این نیمرساناها از ترکیب دو عنصر که یکی از گروه دوم و دیگری از گروه شش جدول تناوبی هستند، تشکیل می شوند. ترکیبات گروه III-II نسبت به V-III پایداری شیمیایی بهتری در دمای اتاق از خود نشان می دهند. گاف نواری ترکیبات این گروه، غالبا مستقیم بوده و بنابراین این نیمرساناها گزینه مناسبی برای ساخت قطعاتی هستند که کار آنها مبتنی بر جذب یا گسیل بهینه ی تابش در محدودهٔ گاف نواری آنها است. از ترکیبات این گروه با گاف نواری پهن در ساخت دیودهای نورگسیل و لیزرهای نیمرسانا و با گاف نواری کوچکتر برای ساخت آشکارساز فروسرخ می توان بهره گرفت.

¹Zinc Blende

۳.۱ ساختار بلوری سیلیکون نیتراید

سیلیکون نیتراید (Si_rN_i) دارای فازهای بلوری α و β و γ می باشد که دو فاز α و β از شناخته شده ترین پلی مورف های سیلیکون نیتراید بشمار می آیند و هر دو دارای فازهای بلوری شش گوشی اند و نوع γ دارای ساختار مکعبی است(شکل ۲۰.۱) [۵]. ساختار $N_rN_s - \alpha$ دارای گروه فضایی Si_rN_s با ثابت های شبکه N_s (شکل ۲۰.۱) [۵]. ساختار $N_rN_s - \alpha$ دارای گروه فضایی Si_rN_s با ثابت های شبکه N_s (شکل ۲۰.۱) [۵]. ساختار $N_rN_s - \alpha$ دارای گروه فضایی N_s دارای گروه فضایی N_s (شکه $N_s - 3i_rN_s$ و N_s ($N_s - 3i_rN_s$ با ثابت های شبکه N_s ($N_s - 3i_rN_s$ و N_s ($N_s - 3i_rN_s$ با ثابت های شبکه N_s ($N_s - 3i_rN_s$ و N_s ($N_s - 3i_rN_s$ و N_s ($N_s - 3i_rN_s$ ($N_s - 3i_rN_s$ ($N_s - 3i_rN_s$ ($N_s - 3i_rN_s$) و N_s ($N_s - 3i_rN_s$ ($N_s - 3i_rN_s$) ($N_s - 3i_rN_s$ ($N_s - 3i_rN_s$) ($N_s - 3i_rN_s$ ($N_s - 3i_rN_s$) ($N_s - 3i_rN_s$ ($N_s - 3i_rN_s$) ($N_s - 3i_rN_s$) ($N_s - 3i_rN_s$) ($N_s - 3i_rN_s$ ($N_s - 3i_rN_s$) ($N_s - 3i_rN_$

پیوندهای شیمیایی $N = Si - Si_{\pi} N_{\epsilon}$ در ترکیب Si - N هم می تواند از نوع کوالانسی و هم از Si - N در ترکیب Si - N هم می تواند از نوع کوالانسی و هم از نوع یونی باشد [۱۰] . طول پیوندهای N - Si - N بین $N \circ A^{\circ}$ و $N \circ A^{\circ}$ و زاویه ی N - Si - N بین $N \circ A^{\circ}$ و $N \circ A^{\circ}$ و زاویه ی N - Si - N بین $N \circ A^{\circ}$ و $N \circ A^{\circ}$ و $N \circ A^{\circ}$ و زاویه ی N - Si - N - Si بین $N \circ A^{\circ}$ و $N \circ A^{\circ}$ و $N \circ A^{\circ}$ و زاویه ی N - Si - N - Si

[Ne] $\mathbb{V}S^7, \mathbb{V}P^7, \mathbb{V}d^\circ$ برای اتم Si پیکربندی الکترونی استفاده شده در $\beta - Si_{\mathbb{T}}N_{\mathbb{F}} - Si_{\mathbb{T}}N_{\mathbb{F}}$ برای اتم N بصورت N و برای اتم N بصورت N و برای اتم N







شکل ۳.۱: سیلیکون نیتراید در فازهای الف) آلفا ب) بتا پ) گاما ۲۰۱



شکل ۴.۱: سلول واحد سیلیکون نیتراید در فازهای آلفا و بتا [۸].



شکل ۵.۱: چهار وجهی های SiN_{ϵ} در ساختار $\beta - Si_{\pi}N_{\epsilon}$ ، هر نیتروژن بین سه چهار وجهی SiN_{ϵ} به آشتراک گذاشته شده است [۱۲].

$eta - Si_3N_4$ چگالی حالات و ساختار نواری ۴.۱ **۴.**۱

چگالی حالات ^۱ تعداد حالت های الکترونی قابل دسترس در واحد حجم در واحد انرژی می باشد. با این مفهوم و از روی میزان پر شدگی نوارهای ظرفیت و رسانش ، می توان رسانا، نیمرسانا و یا عایق بودن ترکیب و همچنین برخی از خواص فیزیکی مانند جذب اپتیکی و خواص ترابرد و ... را تعیین نمود [۱۳].

ساختار نواری ^۲ یک ترکیب نوارهای مجاز انرژی یا بعبارتی حالتهای مجازی را که در یک بلور ایجاد شده است را نشان می دهد. برای فلزات بین نوارهای ظرفیت ^۳ و نوارهای رسانش ^۴ اختلاف انرژی وجود نداشته و این نوارها همپوشانی دارند در صورتی که در نیمرساناها و عایقها بین نوار ظرفیت و رسانش یک گاف انرژی وجود دارد که این گاف در نیمرساناها کمتر از عایقها می باشد.در دمای پائین نوار ظرفیت در نیمرساناها و عایقها کاملا پر و نوار رسانش در آنها کاملا خالی است [۱۴]. در نیمرساناها چون گاف انرژی کوچکتر است ، می توان امکان گذار از نوار ظرفیت به نوار رسانش را مهیا نمود در صورتی که در عایقها این امکان وجود ندارد.

- ⁴Conductivity Band
- ⁵Masanori Kohyama
- ⁶GritSenko
- ⁷E. kutlu ⁸Zhifong Huar
- ⁸Zhifeng Huang

¹Density Of State(DOS)

²Band Structure

³Valence Band



شکل ۶.۱: ساختار نواری و چگالی حالات سیلیکون نیتراید در فاز بتا





شکل ۷.۱: ساختار نواری و چگالی حالات β – Si_۳N_۴ حجمی در حالت (آ) : خالص و (ب) : آلاییده با ناخالصی آرسنیک[۱۵].

حالات p اتم نیتروژن اشغال می کنند. در نمونهٔ آلاییده با ایتریوم، کمینهٔ نوار رسانش شامل T_p حالات T_p و T_s اتم ایتریوم بوده، در حالی که بیشینهٔ نوار ظرفیت را

حالات p اتم نیتروژن اشغال می کنند. در نمونهٔ آلاییده با عنصر ایتریوم بدلیل دورگه شدن Tp ترازهای fd و p اتم سیلیکون، گاف نواری به مقدار 7/60eV کاهش می یابد. نتایج کار این گروه در شکل Λ . نشان داده شده است. همانگونه که در این شکل مشاهده می شود، نوارها در حالت آلاییده بسیار فشرده تر می شوند [16].



شکل ۸.۱: ساختار نواری و چگالی حالات β – Si_w N_F حجمی در حالت (آ) : خالص (ب) : آلاییده با عنصر ایتریوم [۱۶].

۵.۱ خواص فیزیکی و کاربردهای سیلیکون نیتراید

سیلیکون نیتراید بدلیل جذابیت های قابل توجه کاربردهای فراوانی در مهندسی و صنایع میکروالکترونیک و اپتوالکترونیک دارد. از مهمترین ویژگی های این ترکیب موارد زیر را میتوان

برشمرد:

۱.سختی و استحکام بالا در برابر فشارهای مکانیکی ؟ ۲.توانایی تحمل دماهای بالا ، بنابراین می توان از این ترکیب در طراحی و ساخت ابزارهایی که در دماهای بالا کار می کنند مانند دستگاههای برش استفاده نمود؟ ۳.دارای چگالی جرمی کوچک است و لذا می توان از آن در ساخت اجزاء سبک وزن استفاده کرد؟ ۴.در مقایسه با ترکیبات فلزی نسبت استحکام به وزن عالی دارد و لذا در کامپوزیت ها می توان از آن استفاده کرد؟ ۴.در مقایسه با ترکیبات فلزی نسبت استحکام به وزن عالی دارد و لذا در کامپوزیت ها می توان از آن استفاده کرد؟ ۴.در مقایسه با ترکیبات فلزی نسبت استحکام به وزن عالی دارد و لذا در کامپوزیت ها می توان از آن استفاده کرد؟ ۳.دارای مقاومت بسیار خوب در برابر خوردگی و اکسیداسیون ؟ ۶. پایداری شیمیایی خوب ؟ ۲.ثابت دی الکتریک بالا و ۸. دارای خاصیت ضد بازتابی عالی است و از این رو می توان از این ترکیب در ساخت سلول های خورشیدی سیلیکونی بمنظور کاهش بازتاب نور استفاده نمود [۱۰ ۱۱، ۶]. لیکن گاف نواری مطلوب برای استفاده در سلول خورشیدی بایستی به اندازه ای پهن باشد که تعداد توادی الکترون تلف نشود و به اندازه ای بازیک باشد که به تعداد کافی فوتون برای در ساخت رایدی ای زور می توان از این ترکیب در ساخت رایدی ای نواری مطلوب برای استفاده در سلول خورشیدی بایستی به اندازه ای پهن باشد که تعداد رای و های الکترون حفره بتوانند جذب شوند. در این پایان نامه سعی خواهیم کرد راههایی زوج های الکترون حفره بتوانند جذب شوند. در این پایان نامه سعی خواهیم کرد راههایی مناسب جهت مهندسی و بهینه سازی گاف نواری این ترکیب بیابیم [۱۷].

۶.۱ نانو ساختارهای سیلیکون نیتراید

همانگونه که ذکر شد گاف نواری سیلیکون نیتراید در فاز بتا در حالت حجمی غیر مستقیم و در حدود ۴/۳eV می باشد. غیر مستقیم بودن گاف نواری و مقدار زیاد آن یک محدودیت برای استفاده از این ترکیب برای استفاده موثر در صنعت اپتوالکترونیک است. یکی از روش ها برای مستقیم کردن گاف نواری و کاهش آن استفاده از نانوساختارهای این ترکیب (نانوورقه، نانوسیم، نانولوله و ...) می باشد.

در سال ۲۰۱۴ ، هویی پان ^۱ با استفاده از نظریه تابعی چگالی و تقریب GGA گاف نواری نانو سیم های این ترکیب را مستقیم و ۳/۹۲*eV* گزارش نمود.شکل ۹.۱ ساختار نواری و چگالی حالات جزئی این نانو سیم ها را در حالت خالص نشان می دهد.

همچنین پان نانو سیم های ترکیب $S=Si_{\pi}N_{\pi}$ را با عنصر اکسیژن آلایش نمود. بدلیل کمتر بودن انرژی جانشینی اکسیژن به جای نیتروژن (۷۵e۷°) نسبت به انرژی ساختار جانشینی اکسیژن به جای سیلیکون (۷۵e۷') اتم های اکسیژن جانشین اتم های نیتروژن شدند. پان نانو سیم های آلاییدهٔ این ترکیب را نیمرسانای نوع n با گاف نواری مستقیم که معادل ۳/۸۹e۷ است بدست آورد [۱۷]. شکل ۱۰۰۱ ساختار نواری این نانو سیم های آلاییده را نشان می دهد. از مقایسهٔ شکل های ۱۰۱ و ۱۰۰۱ مشخص می شود ساختار نواری نانو سیم های مارکتر این تفاوت که در حالت آلاییده، تراز فرمی بدلیل مشارکت الکترون های اکسیژن به درون نوار رسانش کشیده می شود. همچنین در حالت آلاییده نوارها فشرده تر شده اند. در این کار همچنین نانو سیم های ج $N_{\pi}S - \beta$ با



شکل ۹.۱: ساختار نواری و چگالی حالات جزئی نانو سیم های $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ در حالت خالص[۱۷].



شکل ۱۰.۱: ساختار نواری نانو سیم های $\beta - Si_{7}N_{4}$ آلاییده با اکسیژن [۱۷].

عناصر کربن و کروم آلاییده شد و نوار های میانی حاصل از عنصر ناخالصی، گاف نواری را به گاف های کوچکتر تقسیم کردند که نتایج حاصل در شکل ۱۱.۱ نشان داده شده است [۱۷]. در سال ۲۰۱۶، شانموگاکومار ^۱ و همکاران نیز با استفاده از نظریه تابعی چگالی و تقریب *GGA* گاف نواری نانو ورقه های این ترکیب را مستقیم و ۳/۹۶eV گزارش نمودند [۷].

 $^{1}\mathrm{H.V}$ Shanmugakumar



شکل ۱۱.۱: ساختار نواری نانو سیم های $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ آلاییده با (آ): کربن (ب): کروم [۱۷].

۷.۱ خواص اپتیکی جامدات

۱.۷.۱ مقدمه

با مطالعهٔ خصوصیات اپتیکی جامدات می توان اطلاعات بسیار مفیدی در مورد ساختار نوار انرژی ترازهای ناخالصی، اکسیتونها، نقص ها و ارتعاشات شبکه و ... بدست آورد. در این راستا می توان برخی کمیت ها مانند بازتابندگی، عبور، جذب و ... را محاسبه کرد و از آنها تابع دی الکتریک (ω) ، ضرایب شکست و خاموشی، اتلاف انرژی الکترونی، رسانندگی اپتیکی $\sigma(\omega)$ و یا فرکانس های برانگیختگی را بدست آورد که همگی مستقیماً به ساختار نواری جامدات مرتبط هستند.

۲.۷.۱ تابع دی الکتریک مختلط و رسانندگی اپتیکی مختلط

با فرض صفر بودن چگالی بار، از طریق معادلات ماکسول داریم [۱۸] :

 $\vec{D} = \varepsilon \vec{E} \tag{1.1}$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \tag{(Y.1)}$$
در روابط فوق \vec{D} بردار جابجایی الکتریکی، \vec{E} شدت میدان الکتریکی، \vec{H} شدت میدان مغناطیسی و \vec{B} چگالی شار مغناطیسی می باشد. در اپتیک غیرخطی بایستی با تعمیم معادلات فوق، جملات مرتبه بالاتر را نیز بدست آورد. از معادلات فوق بهمراه معادلات ماکسول یک معادله موج بدست خواهد آمد:

$$\nabla^{\mathsf{T}}\vec{E} = \frac{\varepsilon\mu}{c^{\mathsf{T}}}\frac{\partial^{\mathsf{T}}\vec{E}}{\partial t^{\mathsf{T}}} + \frac{\mathfrak{F}\pi\sigma\mu}{c^{\mathsf{T}}}\frac{\partial\vec{E}}{\partial t} \tag{T.1}$$

$$\nabla^{\mathsf{Y}}\vec{H} = \frac{\varepsilon\mu}{c^{\mathsf{Y}}}\frac{\partial^{\mathsf{Y}}\vec{H}}{\partial t^{\mathsf{Y}}} + \frac{\mathfrak{F}\pi\sigma\mu}{c^{\mathsf{Y}}}\frac{\partial\vec{H}}{\partial t} \tag{F.1}$$

در روابط فوق ε ثابت دی الکتریک، μ گذردهی مغناطیسی، σ رسانندگی و c سرعت نور است. بایستی برای میدان های اپتیکی یک حل سینوسی برای معادلات موج بیابیم:

$$\vec{E} = \vec{E_o} \exp\left\{i(\vec{K}.\vec{r} - \omega t)\right\}$$
(Δ .1)

که در آن \vec{K} ثابت انتشار $^{()}$ مختلط و w فرکانس نور است. از جاگذاری حل موج تخت در معادلات موج خواهیم داشت:

$$-K^{\mathsf{T}} = \frac{-\varepsilon\mu\omega^{\mathsf{T}}}{c^{\mathsf{T}}} - \frac{\mathfrak{F}\pi\sigma\mu\omega}{c^{\mathsf{T}}}i \qquad (\mathfrak{F}.\mathsf{1})$$

با فرض نبود میرایی یا اتلاف ، K با رابطه زیر که یک کمیت حقیقی است داده می شود:

$$K_{\circ} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon \mu} \tag{Y.1}$$

اما چون اتلاف وجود دارد بایستی بصورت زیر بنویسیم:

$$K = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_{complex} \mu} \tag{(A.1)}$$

که در آن $\varepsilon_{complex}$ تابع دی الکتریک مختلط می باشد که آنرا بصورت زیر تعریف می کنیم:

$$\varepsilon_{complex} = \varepsilon + \frac{\epsilon_{\pi\sigma i}}{\omega} = \varepsilon_1 + i\varepsilon_{\gamma}$$
 (9.1)

و ε_{1} و ε_{1} بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک می باشند. از رابطه ۹.۱ خواهیم داشت ε_{1}

$$\varepsilon_{complex} = \frac{\mathbf{f}\pi i}{\omega} [\sigma + \frac{\omega\varepsilon}{\mathbf{f}\pi i}] = \frac{\mathbf{f}\pi i}{\omega} \sigma_{complex} \tag{10.1}$$

با جایگذاری K در رابطهٔ ۷.۱ موج تختی بصورت زیر حاصل می شود:

$$\vec{E}(z,t) = \vec{E_o} e^{-i\omega t} \exp\left[i\frac{\omega z}{c}\sqrt{\varepsilon\mu}\sqrt{1+\frac{\mathbf{\xi}\pi\sigma i}{\varepsilon\mu}}\right]$$
(11.1)

¹Propagation Constant

اگر موج در خلاء انتشار یابد داریم : $\circ = \circ = \sigma = \epsilon$ و $\epsilon = 1 = \varepsilon$ در نتیجه رابطهٔ ۱۱.۱ به حل موج تخت ساده کاهش می یابد. اگر موج در محیطی با رسانندگی الکتریکی محدود منتشر شود، دامنه موج بطور نمایی با فاصله مشخصه δ تضعیف می شود که رابطهٔ آن بصورت زیر است:

$$\delta = \frac{c}{\omega \bar{N}_{\mathsf{Y}}(\omega)} = \frac{c}{\omega \bar{k}(\omega)} \tag{17.1}$$

 δ عمق پوستهٔ اپتیکی ^۱ نامیده می شود و \tilde{k} بخش موهومی ضریب شکست مختلط است که ضریب خاموشی ^۲ نامیده می شود.

$$N(\omega) = \sqrt{\mu \varepsilon_{complex}} = \sqrt{\varepsilon \mu (\mathbf{1} + \frac{\mathbf{f} \pi \sigma i}{\varepsilon \omega})} = n(\omega) + ik(\omega)$$
 (17.1)

بنابراین نتیجه می گیریم که شدت میدان الکتریکی |E| در یک فاصله $\frac{1}{\alpha_{abs}}$ به $\frac{1}{e}$ مقدارش در سطح کاهش پیدا می کند. α_{abs} ضریب جذب π جامد در فرکانس ω است.

$$\frac{1}{\alpha_{abs}} = \frac{c}{\Upsilon\omega\tilde{k}} \tag{14.1}$$

دو جهت متعامد برای بردار E در صفحهٔ عمود بر راستای پراکندگی ، جهت های قطبش نور را معین می کنند. برای مواد مکعبی ضریب شکست در دو جهت فوق یکسان است ولی در محیط های ناهمسانگرد ممکن است ضریب شکست برای دو جهت قطبش متفاوت باشد.

۳.۷.۱ رابطهٔ تابع دی الکتریک مختلط با مشاهده پذیرها

برای بیان رابطهٔ تابع دی الکتریک مختلط و رسانندگی مختلط با مشاهده پذیرها، ضریب شکست مختلط ^۴ را مطابق رابطهٔ ۱۴۰۱ که شامل بخش های حقیقی و موهومی است تعریف می کنیم [۱۸] :

$$N(\omega) = \tilde{n}(\omega) + i\tilde{k}(\omega) = N_{\rm l} + iN_{\rm T}$$
(12.1)

کمیت های \tilde{n} و \tilde{k} ثابت های اپتیکی جامد هستند که بترتیب ضریب شکست و ضریب خاموشی نامیده می شوند. علامت مد بالای آنها بدلیل تمایز آنها از چگالی حامل n و بردار موج k است. برای مواد مغناطیسی داریم:

$$\varepsilon_{complex} = \varepsilon_{1} + i\varepsilon_{Y} = (n + iK)^{Y}$$
(18.1)

پس به معادلات مهم زیر خواهیم رسید:

$$\varepsilon_{1} = n^{\mathsf{Y}} - K^{\mathsf{Y}} \tag{1Y.1}$$

¹Optical skin depth

 $^{^{2}}$ Extinction coefficient

³Absorption coefficient

⁴Complex index of reflection

$$\varepsilon_{\Upsilon} = \Upsilon nK \tag{11.1}$$

م ، ε_{7} ، \tilde{k} و \tilde{k} همگی وابسته به فرکانس هستند. از دو رابطه فوق ، روابط زیر حاصل خواهند \tilde{k} د. ε_{7} شد:

$$n = \left(\frac{1}{\mathbf{Y}}\left[\left(\varepsilon_{1}^{\mathbf{Y}} + \varepsilon_{\mathbf{Y}}^{\mathbf{Y}}\right)^{\frac{1}{\mathbf{Y}}} + \varepsilon_{1}\right]\right)^{\frac{1}{\mathbf{Y}}}$$
(19.1)

$$K = \left(\frac{1}{\mathbf{Y}} \left[\left(\varepsilon_{1}^{\mathbf{Y}} + \varepsilon_{\mathbf{Y}}^{\mathbf{Y}}\right)^{\frac{1}{\mathbf{Y}}} - \varepsilon_{1} \right] \right)^{\frac{1}{\mathbf{Y}}}$$
 (**Y** \cdot . 1)

۴.۷.۱ بازتابندگی

با داشتن ثابت های اپتیکی می توان بازتابندگی را بدست آورد، اما با داشتن بازتابندگی، برای محاسبه ثابت های اپتیکی به دو اندازه گیری مستقل در دو زاویهٔ مختلف نیاز داریم. اگر فقط بازتابندگی فرود قائم را در نظر بگیریم باز هم ثابت های اپتیکی \tilde{n} و \tilde{k} حاصل می شوند با این شرط که اندازه گیری های بازتابندگی را برای همهٔ فرکانس ها انجام دهیم. \tilde{n} و \tilde{k} از طریق رابطهٔ کرامرز کرونیگ I به هم مربوطند.

چون اندازه گیری فرود عمودی در عمل ساده ترند، برای مطالعهٔ خواص اپتیکی جامدها فقط فرود عمودی را اندازه گیری می کنیم و سپس با آنالیز کرامرز کرونیگ داده های بازتابندگی، وابستگی به فرکانس توابع دی الکتریک $(\omega)_{r_1} \in \mathcal{E}_r(\omega)$ و یا وابستگی به فرکانس \tilde{k} و \tilde{k}

چون موج در داخل جامد ضعیف می شود پس فرض می کنیم جامد آنقدر ضخیم باشد که از سطح پشتی اش بازتابی نداشته باشد . بنابراین در انتشار یک بعدی ، موج درون جامد را بصورت زیر می نویسیم [۱۸] :

$$E_x = E_{\circ} e^{i(Kz - \omega t)} \tag{(1.1)}$$

که ثابت انتشار برای نور $K = (rac{\omega}{c}) N_{complex}$ می باشد. از شرط پیوستگی E_x در سطح جامد داریم:

$$E_x = E_1 e^{i(\frac{\omega}{c} - \omega t)} + E_r e^{i(\frac{\omega}{c} - \omega t)}$$
(YY.1)

از معادله ماكسول داريم:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\mu}{c} \frac{\partial(\vec{H})}{\partial(t)} = \frac{i\mu\omega}{c} \vec{H}$$
(۲۳.1)

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} = i \frac{\omega \mu}{c} H_y \tag{(YF.1)}$$

 1 Kramers-kronig relation

۱۶ معرفی نیمرسانای سیلیکون نیتراید و مروری به کارهای انجام شده

: شرط پیوستگی $\frac{\partial E_x}{\partial z}$ منجر می شود بطوریکه H_y درای $E_{\rm v}K = E_{\rm v}\frac{\omega}{\partial z} - E_{\rm v}\frac{\omega}{\partial z} = E^{\omega}_{-}N_{complex}$ (۲۵.۱)

$$E_{\circ}K = E_{1}\frac{\omega}{c} - E_{\Upsilon}\frac{\omega}{c} = E\frac{\omega}{c}N_{complex}$$
(YΔ.1)

در فرود قائم ، بازتابندگی بصورت زیر نوشته می شود:

$$R = \left|\frac{E_{\Upsilon}}{E_{\Upsilon}}\right|^{\Upsilon} \tag{(YF.1)}$$

$$E_{\Upsilon} = \frac{1}{\Upsilon} E_{\circ} (1 - N_{complex})$$
 (YY.1)

$$E_{\Upsilon} = \frac{1}{\Upsilon} E_{\circ} (1 + N_{complex})$$
 (YA.1)

بنابراین بازتابندگی در فرود عمودی بر حسب ثابت های اپتیکی بصورت زیر خواهد شد:

$$R = \left| \frac{1 - N}{1 + N} \right|^{\mathsf{T}} = \frac{\tilde{k}^{\mathsf{T}} + (1 - \tilde{n})^{\mathsf{T}}}{\tilde{k}^{\mathsf{T}} + (1 + \tilde{n})^{\mathsf{T}}}$$
(**T9.1**)

۵.۷.۱ تابع اتلاف انرژی

تابع اتلاف انرژی ۱ بیانگر اتلاف انرژی الکترونی در ماده است. قله های طیف اتلاف نشانگر فرکانس های پلاسما ۲ هستند. تابع اتلاف انرژی توسط رابطهٔ زیر به قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مربوط می شود [۱۸] :

$$L(\omega) = \frac{\varepsilon_{\Upsilon}(\omega)}{\varepsilon_{\Upsilon}^{\Upsilon}(\omega) + \varepsilon_{\Upsilon}^{\Upsilon}(\omega)}$$
(\mathcal{T}\cdot.\)

خصوصیات اپتیکی نیمرساناها در فرکانس های پائین رفتار شبه فلزی و در فرکانس های بسیار بالا رفتاری مشابه عایق ها دارند. فرکانسی را که در آن قسمت حقیقی تابع دی الکتریک ($\varepsilon_1(\omega)$) به صفر می رسد و رفتار مواد از پاسخ فلزی به پاسخ دی الکتریک تغییر می کند را فرکانس پلاسما می نامیم.

۶.۷.۱ رابطهٔ کرامرز ـ کرونیگ

با اندازه گیری ضریب جذب ، بخش موهومی ضریب شکست مختلط حاصل می شود در صورتی که بازتابندگی ترکیب پیچیده ای از بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک است. بنابراین صرفاً با اندازه گیری ضریب جذب نمی توان بخش های حقیقی و موهومی تابع دی

¹Energy loss function

²Plasma frequency

الکتریک را معلوم کرد. اما اگر (٤٦(ω) و ٤٦(ω) را در یک گسترهٔ وسیع فرکانسی بدانیم می توانیم ٤٦(ω) و ٤٦(ω) را از روابط کرامرز ـ کرونیگ تعیین کنیم [۱۸] :

$$\varepsilon_{1}(\omega) - \mathbf{i} = \frac{\mathbf{f}}{\pi} P \int_{\circ}^{\infty} \frac{\dot{\omega} \varepsilon_{\mathbf{f}}(\dot{\omega})}{\dot{\omega}^{\mathbf{f}} - \omega^{\mathbf{f}}} d\dot{\omega}$$
(٣1.1)

$$\varepsilon_{\Upsilon}(\omega) = -\frac{\Upsilon}{\pi} P \int_{\circ}^{\infty} \frac{\dot{\omega}\varepsilon_{1}(\dot{\omega})}{\dot{\omega}^{\Upsilon} - \omega^{\Upsilon}} d\dot{\omega}$$
(TT.1)

که در آن P بر مقدار اصلی انتگرال دلالت دارد. با استفاده از روابط کرامرز کرونیگ اگر یکی از توابع (ω) و $\varepsilon_1(\omega)$ و $\varepsilon_1(\omega)$ را بصورت تابعی از فرکانس بدانیم، می توانیم دیگری را تعیین کنیم.

در سال ۲۰۱۶ ای. کوتلو ^۱ و همکاران خواص اپتیکی نمونهٔ حجمی $N_F - Si_T N_F$ را هم در حالت خالص و هم در حالت آلاییده با عنصر آرسنیک با استفاده از تقریب چگالی موضعی (LDA) محاسبه نمودند و ضرایب دی الکتریک استاتیک و شکست و بازتاب را در حالت خالص بترتیب ۵/۵۲، ۲/۳۵ و ۲/۰۶ و در حالت آلاییده با آرسنیک بترتیب ۵/۶ ، ۲/۵۶ و ۲/۰۰ محاسبه نمودند. همچنین آستانهٔ گذار اپتیکی را در حالت خالص در انرژی های حدود $N_F - 0$ یافتند، اما در حالت آلاییده با عنصر آرسنیک آستانهٔ گذار اپتیکی به حدود $N_F - 1$ کاهش یافتند، اما در حالت آلاییده با عنصر آرسنیک آستانهٔ گذار اپتیکی به حدود $N_F - 1$ کاهش حاصل از کار این گروه در شکل های ۱۲.۱ (۲.۱ و ۱۴.۱ آورده شده است. [10]



شکل ۱۲.۱: بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک برای نمونهٔ حجمی β – Si_۳N_۴ در حالت (آ): خالص و (ب):آلاییده با آرسنیک[۱۵].



شکل ۱۳.۱: بخش حقیقی ضریب شکست و بخش موهومی ضریب شکست (ضریب خاموشی) برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\rm F} N_{\rm f}$ در حالت (آ): خالص و (ب):آلاییده با آرسنیک[۱۵].



شکل ۱۴.۱: نمودار بازتابندگی و جذب برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ در حالت (آ): خالص و (ب):آلاییده با آرسنیک[۱۵].

فصل ۲

نظریهٔ تابعی چگالی

۱.۲ نظریهٔ تابعی چگالی

مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی دو نظریهٔ اصلی ای هستند که در اکثر سیستم های فیزیکی مورد استفاده قرار می گیرند. اما تنها قادرند برای مساله های تک ذره ای و دو ذره ای به حل دقیق تحلیلی برسند و برای تحلیل سیستم های با بیش از دو ذره بایستی از تقریب ها و روش های محاسباتی توسعه یافته تری استفاده نمود. برای مطالعهٔ سیستم های بس ذره ای ، روش ها و تقریب های مختلفی وجود دارد که بسته به نوع سیستم مورد مطالعه ، از تقریب های مختلفی استفاده می شود. نظریهٔ تابعی چگالی ^۲ (DFT) یکی از این روش هاست که برای مطالعهٔ سیستم های بس ذره ای مانند مولکول ها و بلورها مورد استفاده قرار می گیرد (به غیر از سیستم های مختلف مهندسی کاربردهای فراوانی دارد.

۱.۱.۲ معادلهٔ شرودینگر

بمنظور توصیف ویژگی های مجموعه ای خوش تعریف از اتم ها ، با توجه به اینکه الکترونها نسبت به تغییرات اطراف خود خیلی سریعتر از هسته ها عکس العمل نشان می دهند، ابتدا با

¹Many body systems

²Density Functional Theory

ثابت در نظر گرفتن موقعیت هسته های اتمی ، معادلات حرکت الکترون ها را حل می کنیم. برای مجموعه ای از الکترونها که در میدان مجموعه ای از هسته ها حرکت می کنند ، انرژی حالت پایهٔ الکترونها را که در واقع پائین ترین انرژی آنها می باشد ، بدست می آوریم.

اگر M هسته در موقعیت های $R_1, R_7, ..., R_M$ باشند، می توان انرژی حالت پایهٔ E را بر حسب موقعیت این هسته ها با استفاده از معادلهٔ شرودینگر مستقل از زمان و غیرنسبیتی بدست آورد:

$$H\psi = E\psi \tag{1.7}$$

در رابطهٔ فوق H عملگر هامیلتونی و ψ ویژه حالت های هامیلتونی می باشند (ψ_n یک جواب با ویژه مقدار متناظر E_n که یک عدد حقیقی است، می باشد). معادلهٔ شرودینگر را بصورت زیر خواهیم داشت [۱۹] :

$$\left[-\frac{\hbar^{\mathsf{Y}}}{\mathsf{Y}m}\sum_{j=1}^{N}\nabla^{\mathsf{Y}} + \sum_{j=1}^{N}V(\vec{r}) + \sum_{j=1}^{N}U(\vec{r})\right]\psi = E\psi \qquad (\mathsf{Y}.\mathsf{Y})$$

در این رابطه ، m جرم الکترون و عبارت های داخل براکت بترتیب از چپ به راست انرژی جنبشی الکترون، انرژی برهمکنش بین هر الکترون و مجموعه هسته های اتمی و انرژی برهمکنش بین الکترونهای مختلف است. ψ تابع موج الکترونی است که تابع مختصات فضایی الكترون است و E انرژی حالت یایهٔ الكترون هاست. می توان تابع موج ψ را بصورت Nحاصلضرب توابع موج متعلق به هر الکترون $\psi_{N}(\vec{r})...\psi_{N}(\vec{r})$ تقریب زد که این بیان به ضرب هارتری (معروف است. با توجه به اینکه تعداد الکترون ها N ، بسیار بزرگتر از تعداد هسته ها M ، می باشد (چون هر اتم یک هسته و تعداد زیادی الکترون دارد) در حل معادلهٔ شرودینگر عبارت مربوط به برهمکنش الکترون ها بیشترین و مهمترین سهم را دارا می باشد. بنابراین معادلهٔ شرودینگر یک معادلهٔ بس ذره ای و از اساسی ترین مسائل مکانیک کوانتومی می باشد. نکته مهم اینکه نمی توان تابع موج یک مختصات خاص را مستقیما مشاهده کرد بلکه تنها می توان احتمال اینکه N الکترون در مجموعهٔ خاصی از مختصات $\vec{r}_1, ..., \vec{r}_N$ باشند را محاسبه کرد. این احتمال متناسب با $\psi(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_N) \psi(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_N)$ می باشد که علامت ستاره معرف هميوغ مختلط مي باشد. توجه كنيد كه ما در عمل نمي دانيم كه در ماده كدام الكترون با ۱ و کدام الکترون با ۲ برچسب گذاری شده اند. بنابراین آنچه که از لحاظ فیزیکی مورد توجه است احتمال این است که یک مجموعه N الکترونی در مختصات $\vec{r}_{1}, ..., \vec{r}_{N}$ جایگزیده شده باشند. چگالی الکترون ها در یک موقعیت ویژه از فضا $n(\vec{r})$ مرتبط ترین کمیت برای بیان این احتمال مي باشد كه بصورت زير بر حسب توابع موج الكترون نوشته مي شود :

$$n(\vec{r}) = \Upsilon \sum \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r})$$
 (T.Y)

ضریب ۲ بدلیل اسپین الکترون ها می باشد. طبق اصل طرد پائولی ۱ هر تابع موج الکترون می تواند توسط دو الکترون با اسپین مخالف اشغال شود. چگالی الکترون $n(\vec{r})$ تابعی از NN مختصه بوده و از حل تابع موج شرودینگر حاصل می شود.

۲.۱.۲ قضایای هوهنبرگ کوهن

نظریهٔ تابعی چگالی شامل دو اصل می باشد که در سال ۱۹۶۴ توسط هوهنبرگ و کوهن ^۲ مطرح شدند [۲۰] . طبق اصل اول این نظریه ، در سیستم های بس الکترونی ، با داشتن چگالی حالت پایه می توان تمامی خواص سیستم را استخراج نمود. بدین صورت که با داشتن چگالی حالت پایه می توان تمامی خواص سیستم را استخراج نمود. بدین صورت که با داشتن هامیلتونی سیستم های بس الکترونی تعیین شده و با داشتن مامیلتونی سیستم مای بس الکترونی تعیین شده و با داشتن مامیلتونی سیستم مای بس الکترونی تعیین شده و با داشتن مامیلتونی سیستم تمامی ویژه حالت های آن (توابع موج حالت پایه و حالت های برانگیخته) مشخص شده و در نتیجه تمامی خواص سیستم حاصل می شود.مزیت مهم این قضیه این مشخص شده و حالت های برانگیخته) حیکالی حالت پایه سیستم مامی ویژه حالت های آن (توابع موج حالت پایه و حالت های برانگیخته) مشخص شده و در نتیجه تمامی خواص سیستم حاصل می شود.مزیت مهم این قضیه این چگالی حالت پایهٔ سیستم را بدست آورد که از نظر ریاضی پیچیدگی کمتری دارد. تابع موج سیستم بی سیستم بی می توان می سیستم به بی ایکترونها تنها به یک مختصهٔ مکان بستگی دارد. در قضیهٔ دوم هوهنبرگ و کوهن اثبات می الکترونها تنها به یک مختصهٔ مکان بستگی دارد. در قضیهٔ دوم هوهنبرگ و کوهن اثبات می شود که انرژی کل یک سیستم بس الکترونی ها وابسته است در حالی که چگالی حالت پایهٔ آن از یک اصل وردشی شود که انرژی کل یک سیستم بس الکترونی نسبت به چگالی حالت پایهٔ آن از یک اصل وردشی حسب چگالی الکترونی وجود دارد که کمینهٔ این تابع انرژی ، انرژی حلات پایهٔ سیستم است و چگالی الکترونی که این تابع انرژی را کمینه می کند چگالی حالت پایهٔ سیستم است و پر ای ترژی جهان شمول ۶ را بصورت زیر می توان نوشت [۲۰، ۲۰]:

$$E[n(\vec{r})] = T[n(\vec{r})] + \int d^{\mathbf{r}} \vec{r} n(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) + E_{int}[n(\vec{r})]$$
 (F.Y)

در رابطهٔ (۴.۲) جملات بترتیب از چپ به راست انرژِی جنبشی سیستم ، برهمکنش الکترون _ یون و برهمکنش الکترون _ الکترون هستند. بنابراین در نظریهٔ تابعی چگالی با داشتن چگالی حالت پایه می توان به تمامی خواص سیستم دست یافت. در رابطهٔ فوق مانع اصلی ، ناشناخته بودن تابعی های انرژی جنبشی و برهمکنش الکترون _ الکترون است که در ادامه برای این مشکل راهکارهایی ارائه شده ست.

- ²Hohenberg-Kohn
- ³Variational principle

¹Pauli exclusion principle

⁴Universal functional energy

۳.۱.۲ رهیافت کوهن ـ شم

کوهن و شم ^۱ در سال ۱۹۶۵ با در نظر گرفتن یک سیستم کمکی، نظریهٔ تابعی چگالی را کاربردی کردند [۲۱] . آنها برای حل مسالهٔ بس الکترونی ، یک سیستم کمکی در نظر گرفتند که چگالی حالت پایهٔ آن با چگالی حالت پایهٔ سیستم اصلی یکسان باشد اما تابع موج آن چون از ذرات غیر برهمکنشی تشکیل شده ، ساده تر از تابع موج سیستم اصلی است که از الکترون های همبسته تشکیل شده است. سیستم کمکی حاوی ذراتی هم جرم با الکترون است که با یک پتانسیل موثر برهمکنش می کنند. با داشتن چگالی حالت پایهٔ سیستم کمکی و حل هامیلتونی آن می توان به خواص سیستم اصلی دست یافت. انرژی کل سیستم کمکی کوهن_ شم بصورت زیر خواهد بود:

$$E_{ks} = T_{ks} + E_{ext} + E_{eff} \tag{(\Delta.\Upsilon)}$$

که در آن E_{eff} سهم انرژی برهمکنش الکترون ها از طریق پتانسیل موثر ، T_{ks} سهم انرژی جنبشی و E_{ext} سهم انرژی برهمکنش این ذرات با میدان خارجی است و بصورت زیر محاسبه می شوند [۲۱]:

$$T_{ks} = -\frac{\hbar^{\mathsf{Y}}}{\mathsf{Y}m} \sum_{l,\sigma} \left\langle \varphi_l^{\sigma} \left| \nabla^{\mathsf{Y}} \right| \varphi_l^{\sigma} \right\rangle = -\frac{\hbar^{\mathsf{Y}}}{\mathsf{Y}m} \sum_{l,\sigma} \left| \nabla \varphi_l^{\sigma} \right|^{\mathsf{Y}}$$
(۶.۲)

$$E_{ext} = \int d^{\mathsf{r}} r n(r) V_{ext}(r) \tag{Y.Y}$$
$$n(r) = \sum_{l,\sigma} |\varphi_l^{\sigma}|^{\mathsf{r}}$$

که $\varphi_l^{\sigma}(r)$ ویژه حالت های الکترون های مستقل توصیف کنندهٔ سیستم می باشند و شاخص σ مربوط به حالت اسپینی الکترون ها است. انرژی موثر E_{eff} معمولاً بصورت جمع انرژی هارتری ⁷ و انرژی تبادلی و شاخص المربوع می شود ($E_{eff} = E_H + E_{ex}$). در جملهٔ عارتری ^۲ و انرژی تبادلی موبرت می شود ($E_{eff} = E_H + E_{ex}$). در جملهٔ تبادلی همی شود ($E_{eff} = E_H + E_{ex}$). در جملهٔ تبادلی همی شود ($E_{eff} = E_H + E_{ex}$) معمولاً بصورت جمع انرژی الکترون کار در جملهٔ می شود ($E_{eff} = E_H + E_{ex}$). در جملهٔ تبادلی می شود ($E_{eff} = E_H + E_{ex}$) معمولاً بصورت جمع انرژی الرژی کار سیستم می شود. بنابراین الکترون کار سیستم می شود. بنابراین

$$E_{ks} = -\frac{\hbar^{\mathsf{Y}}}{\mathsf{Y}m} \sum_{\sigma,l} |\nabla\varphi_l^{\sigma}|^{\mathsf{Y}} + \int d^{\mathsf{Y}}\vec{r} V_{ext}(r)n(\vec{r}) + \frac{\mathsf{Y}}{\mathsf{Y}}e^{\mathsf{Y}} \int d^{\mathsf{Y}}\vec{r} d^{\mathsf{Y}}\vec{r} \frac{n(\vec{r})n(\vec{r})}{\left|\vec{r} - \vec{r}\right|} + E_{xc}[n(\vec{r})] \quad (\mathsf{A}.\mathsf{Y})$$

از مقایسهٔ رابطهٔ (۸.۲) با رابطهٔ (۴.۲) ، انرژی تبادلی همبستگی بصورت زیر حاصل می شود:

$$T_{ks} + E_{ext} + E_H + E_{xc} = T + E_{ext} + E_{int} \Longrightarrow E_{xc} = (T - T_{ks}) + (E_{int} - E_H) \quad (9.1)$$

 1 Kohn-Shame

 $^{^{2}}$ Hartree

 $^{^{3}}$ Exchange-Correlation Energy

یعنی انرژی تبادلی _همبستگی از دو سهم تشکیل شده است : یکی تفاضل انرژی جنبشی سیستم اصلی و کمکی و دیگری تفاضل انرژی برهمکنش الکترون_الکترون با انرژی هارتری . انرژی تبادلی همبستگی در انرژی کل سهم کوچکی دارد و روش های مختلفی برای تقریب زدن آن ارائه شده است [۲۲].

نخستین تقریب، تقریب چگالی موضعی ((LDA) می باشد. این تقریب ، انرژی تبادلی۔ همبستگی را با حل دقیق یک گاز الکترونی همگن بر مبنای نظریهٔ هارتری۔ فوک ۲ بصورت زیر به ما می دهد:

$$E_{xc}^{homo} \approx \int d^{\mathsf{T}} r n(r) \varepsilon_{xc}^{homo}(n(r)) \tag{10.1}$$

که در آن n(r) چگالی الکترونی و ε_{xc} انرژی تبادلی۔ همبستگی به ازای یک الکترون می باشد و انتگرال گیری روی کل بلور انجام می شود.

تقریب پرکاربرد دیگری که در واقع نسخهٔ بهبود یافتهٔ LDA است ، تقریب شیب تعمیم یافته ^۳ (GGA) است . در این تقریب، انرژی تبادلی۔ همبستگی علاوه بر چگالی الکترونی در هر نقطه ، به تغییرات چگالی در آن نقطه نیز وابسته است. در این تقریب، انرژی تبادلی۔ همبستگی بصورت زیر نوشته می شود [۲۳]:

$$E_{xc}^{GGA} = \int d^{\mathsf{T}} rn(r) \varepsilon_{xc}(n, |\nabla n|) = \int d^{\mathsf{T}} rn(r) \varepsilon_{x}^{homo} F_{xc}(n, |\nabla n|)$$
(11.**Y**)

یک تابع بدون بعد است که بصورت زیر نوشته می شود: F_{xc}

$$F_{xc}(n, |\nabla n|) = F_x(n, |\nabla n|) + F_c(n, |\nabla n|)$$
(11.1)

که محاسبهٔ F_c مشکل تر از محاسبهٔ F_x است اگرچه نقش آن در رابطهٔ فوق کمتر است. چون سهم انرژی همبستگی در مقایسه با انرژی تبادلی بسیار ناچیز است. تقریب شیب تعمیم یافته حاوی اطلاعات فیزیکی بیشتری نسبت به تقریب چگالی موضعی می باشد و با تجربه سازگاری بیشتری دارد ولی لزوماً از آن دقیق تر نیست. از انواع مختلف تقریب شیب تعمیم یافته می توان به تابعی ونگ_پردو (PW۹۱) و تابعی انزرهف_بورگ_پردو (PBE) ه اشاره نمود [TT].

۲.۲ روش های حل معادلات تک ذره ای کوهن_شم

برای حل معادلات تک ذره ای کوهن ـ شم توسط نظریهٔ تابعی چگالی ابتدا یک چگالی الکترونی اولیه حدس زده می شود و از روی این حدس اولیه ، پتانسیل مؤثر (یعنی مجموع پتانسیل

¹Local Density Approximation

²Hartree and Fock

³Generalized Gradient Approximation

 $^{^{4}}$ Perdew-Wang(PW91)

⁵Perdew-Burke-Enzerhof(PBE or PW96)

های هارتری، پتانسیل خارجی و پتانسیل تبادلی همبستگی) بدست می آید. سپس با این پتانسیل مؤثر بدست آمده ، معادلهٔ شرودینگر حل شده تا انرژی و چگالی الکترونی جدیدی حاصل شود. اگر چگالی بدست آمده با چگالی اولیه برابر باشد، چرخهٔ خودسازگار به پایان می رسد و معادلهٔ شرودینگر حل می شود و در غیر اینصورت ، از چگالی الکترونی بدست آمده ، پتانسیل مؤثر دیگری ساخته می شود و مجدداً معادلهٔ شرودینگر با پتانسیل مؤثر جدید حل می شود و این چرخه تا زمانی ادامه می یابد که چگالی الکترونی تا مقدار مورد نظر همگرا شود. حل معادلات تک ذره ای کوهن ـ شم با توجه به نحوهٔ گزینش امواج پایه به چهار روش کلی انجام می گیرد [۲۴]:

PW) روش امواج تخت (PW) 1.**۲**.۲

برای حل معادلات کوهن ـ شم که در واقع همان معادلهٔ شرودینگر برای الکترون های غیر برهمکنشی است، ابتدا باید پایهٔ مناسب برای بسط توابع موج را برگزید.تفاوت اساسی کدهای محاسباتی نیز تفاوت گزینش پایهٔ مورد استفاده در آنهاست. هر قدر رفتار توابع پایه با رفتار واقعی الکترون در بلور تشابه بیشتری داشته باشد، محاسبات دقیق تر و حجم بیشتری خواهند داشت. در صورتی که پتانسیل وارد بر الکترون در بلور ضعیف باشد ، می توان از امواج تخت برای بسط تابع موج استفاده نمود. در اینصورت با تعداد محدودی موج تخت می توان این بسط را انجام داد. اما اگر در برخی نواحی الکترون ها در بلور تحت پتانسیل قوی تر باشند ، بایستی بجای استفاده از پتانسیل واقعی از شبه پتانسیل استفاده نمود. حال اگر بخواهیم رفتار الکترون هایی را مورد بررسی قرار دهیم که در پتانسیل های قوی تر هستند (مانند الکترون های مغزی) بایستی از مدل همبستگی قوی ^{(۱} که اربیتال های اتمی را بعنوان توابع پایه در نظر می گیرد، استفاده نمود [۲۴].

۲.۲.۲ روش امواج تخت بهینه شده (APW)

بسیاری از الکترون های ظرفیت بگونه ای رفتار می کنند که تابع موج و پتانسیل وارد بر آنها در نزدیکی هسته مشابه اتم منزوی و تقریبا کروی است ولی در فواصل بین اتمی پتانسیل و تابع موج هر دو هموار هستند. در اینصورت امواج تخت بهینه شده ^۲ انتخاب مناسب تری برای بسط توابع موج می باشند. بنابراین در این روش بلور را به دو قسمت تقسیم می کنیم: یک قسمت فضای مافین تین (*MT*) که شامل کره های بدون همپوشانی به مرکزیت اتم های یاختهٔ بسیط و دیگری فضای باقیماندهٔ بین کره ها می باشد. در ناحیهٔ مافین تین پتانسیل تقارن کروی دارد در حالی که در فضای بین کره ها پتانسیل تقریبا تخت و هموار است. تقریب

¹Strongly correlated model

²Augmented Plane Wave

مافین تین بجای پتانسیل واقعی ، پتانسیل زیر را در نظر می گیرد:

$$V_{MT}(r) = \begin{cases} V_{\circ} & r \in I \\ V(r_a) & r \in MT \end{cases}$$
(1\...)

در رابطهٔ (۱۳.۲) ، V_{\circ} یک عدد ثابت، a شمارندهٔ کرات مافین تین و r_a طول بردار مکان $\vec{r}_a = \vec{r} - T_a$ می باشد.

اسلیتر برای نواحی بین کره های مافین تین موج های تخت را بکار برد و برای نواحی درون کره ها با حل معادلهٔ زیر ، قسمت شعاعی معادلهٔ موج را بدست آورد:

$$-\frac{1}{r^{\mathsf{Y}}}\frac{d}{dr}(r^{\mathsf{Y}}\frac{da_{\mathsf{Y}}}{dr}) + \left[\frac{l(l+1)}{r^{\mathsf{Y}}} + V(r)\right]u_l = Eu_l \qquad (1\pounds.\Upsilon)$$

قسمت زاویه ای معادلهٔ موج Y_{lm} ها می باشند . بنابراین برای توابع موج خواهیم داشت:

$$\varphi(k_n, \vec{r}) = \begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}_n \cdot \vec{r}} \\ \sum A_{l,m}(K_n) u_l(r, E_l) Y_{lm}(r) \end{cases}$$
(1Δ. ٢)

که Ω حجم یکای یاخته و $\vec{K} = \vec{K} + \vec{k}$ که \vec{k} بردار موج در کل فضا و \vec{K} بردار شبکهٔ وارون است. A_{lm} ها باید بصورتی تعیین شوند که جواب ها روی کره ها پیوسته حاصل شوند. این روش دو ایراد اساسی دارد اولاً چون توابع پایه به انرژی وابسته اند بنابراین باید برای هر ویژه مقدار انرژی یک تابع نوشته شود که این حجم محاسبات را افزایش خواهد داد. ثانیاً شیب تابع موج روی سطح کرهٔ مافین تین ناپیوسته است و این مانعی برای استفاده از این روش است [۲۴].

۳.۲.۲ روش امواج تخت بهینه شدهٔ خطی(LAPW)

در سال ۱۹۵۷ آندرسون APW را خطی سازی نمود و پایه های وابسته به انرژی با یک ترکیب dPW خطی از $u_l^*(r, E) = \frac{\partial u_l}{\partial E}$ جایگزین شدند یعنی :

$$\varphi(k_n, \vec{r}) = \begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}_n \cdot \vec{r}} & r \in I \\ \sum \left[A_{l,m}(K_n) u_l(r, E_l) + B_{lm} u_l^*(r, E_l) \right] Y_{lm}(r) \end{cases}$$
(19.7)

در نتیجه با این سبک نوشتن مشکل ناپیوستگی شیب تابع موج بر روی کره ها رفع گردید اما همگرایی در این روش نسبت به روش APW کندتر می باشد [۲۴].

FP – روش پتانسیل کامل امواج تخت بهینه شدهٔ خطی (- FP – LAPW)

در این روش که اصلاح شدهٔ روش LAPW است، پتانسیل به شکل زیر بسط داده می شود:

$$r(n) = \begin{cases} \sum_{lm} V_{lm}(r) Y_{lm}(r) & r \in MT\\ \sum_{k} V_{k} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} & r \in I \end{cases}$$
(1Y.Y)

در این روش پایه ها به همان شکل LAPW باقی می ماند ولی در هامیلتونی اصلی پتانسیل بصورت بسط بالا قرار داده می شود [۲۴].

فصل ۳

معرفی بستهٔ محاسباتی WienYk

معرفی برنامه WIENTK ۱.۳

بستهٔ محاسباتی Wien۲k به زبان فرترن (و قابل اجرا تحت سیستم عامل لینوکس ^۲ می باشد. این برنامه در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) بوده و مبنای محاسبات آن روش یتانسیل كامل موج تخت بهبود يافتهٔ خطی (FP-LAPW) می باشد. این برنامه در سال ۱۹۹۰ توسط ییتر بلاها و هاینز شوارتز تحت عنوان WIEN نوشته شد و در سال های بعد با ارتقای کیفیت و سرعت محاسبات و رفع خطاها و ایرادهای گزارش شده و تغییر در پتانسیل همبستگی با نام های WIEN۹۳ ، WIEN۹۵ ، WIEN۹۳ و WIEN۲K ارائه شد [۲۵] .این برنامه طیف وسيعي از خواص مانند خواص ساختاري ، الكتروني، مغناطيسي و ايتيكي بلورها را مي تواند محاسبه كند. همچنين قابليت محاسبة ساختار نواري ، چگالي حالات ، چگالي ابر الكتروني ، انرژی کل ، نیروی وارد اتم ها ، بهینه سازی ساختار و ... را دارا می باشد.

¹Fortran ²Linux

۲.۳ ترتیب اجرای برنامه

ترتیب اجرای برنامه شامل دو مرحلهٔ آماده سازی (و حل خودسازگار ۲ می باشد.

۱.۲.۳ برنامه های مرحلهٔ آماده سازی[۲۶، ۲۵]

در مرحلهٔ آماده سازی با تولید چگالی بار اولیه ، شرایط را برای اجرای مرحلهٔ حل خودسازگار مهیا می کنیم. برنامه های این مرحله بترتیب شامل " SYMMETRY ، SGROUP ، NN ، KGEN ، LSTART و DSTART " می باشد که به شرح هر یک از آنها می پردازیم.

NN

این برنامه فاصله های نزدیک ترین همسایه های هر اتم را محاسبه و همپوشانی کره های مافین تین را بررسی می کند که در صورت همپوشانی کره ها بایستی با کاهش شعاع کرهٔ مافین تین از همپوشانی آنها جلوگیری نمود. همچنین در این برنامه می توان پس از شناسایی اتم های معادل ، ساختار را به شکل مناسبی تصحیح نمود.

SGROUP

این برنامه گروه نقطه ای ^۳ مناسب و گروه فضایی ^۴ مناسب را برای بلور تعیین می کند. این برنامه معمولاً سلول واحد کوچکتری را نسبت به سلول داده شده اولیه می یابد و گروه فضایی جدیدی را پیشنهاد می نماید.

SYMMETRY

این برنامه گروه های نقطه ای هر یک از نقاط شبکه و ماتریس های تقارنی متناظر با این گروه های نقطه ای و همچنین مقادیر هماهنگ های کروی را (l_{max}) بر اساس نوع شبکه و موقعیت های اتمی داده شده تعیین می کند.

LSTART

این برنامه تصحیح شدهٔ کد اتمی LSDA ^۵ است که با روش "هارتری_فوک_اسلیتر" نوشته شده است. این برنامه پتانسیل های اتمی درون کره های مافین تین و همچنین چگالی های

³Point group

¹Initialization

²Self Consistent Solution

⁴Space group

⁵Local Spin Density Approximation

اتمی را تولید می کند. چگالی های اتمی تولید شده توسط برنامه dstert مورد استفاده قرار می گیرد تا یک چگالی اولیه برای مرحلهٔ حل خودسازگار تولید کند.

در این مرحله دو پارامتر ورودی قابل تنظیم وجود دارد. ابتدا بایستی تقریب دلخواه را برای پتانسیل تبادلی ـ همبستگی انتخاب نمود. این تقریب ها عبارتند از : GGA۹۶ ، LSDA ، ۶DA ، ۲۹۵۵ ، Vosrove ا Engle . پارامتر ورودی دیگر در این مرحله ، انرژی جداسازی الکترون های ظرفیت (شامل الکترون های ظرفیت و شبه مغزی) و الکترون های مغزی است. انتخاب صحیح این پارامتر اهمیت زیادی دارد چون مبنای محاسبات خودسازگار می باشد. پیش فرض برای انرژی جداسازی ۶ ـ ریدبرگ است. ابتدا برنامه را با این انرژی اجرا می کنیم و خروجی برنامه در مرحلهٔ بعد در ستون هایی مشاهده می کنیم. ستون سمت چپ ویژه مقادیر انرژی پائین بر حسب ریدبرگ می باشند. ملاحظه می شود اعداد فوق پیرامون یک انرژی خاص تغییر پائین بر حسب ریدبرگ می باشند. ملاحظه می شود اعداد فوق پیرامون یک انرژی خاص تغییر را اندکی افزایش می دهیم ویا اینکه در همان مرحله لعدیر انرژی را کترون های با اسپین در همان صفحه خطا (Warrning) مشاهده می شود. برای رفع خطا یا شعاع کرهٔ مافین تین را اندکی افزایش می دهیم ویا اینکه در همان مرحله لعدیر انرژی جداسازی را بتدریج کاهش

Case.in - St توجه شود که بعد از مرحلهٔ LSTART به دو فایل مهم و زیربنایی به نام های Case.in - St و G_{max} و RK_{max} و G_{max} را باید در این فایل Case.in برخورد می کنیم که پارامترهای مهمی مانند RK_{max} و RK_{max} را باید در این فایل all بهینه نمود. RK_{max} محدودهٔ ماتریس همگرایی را مشخص می کند و در روش LAPW مقدار آن بین ۶ تا ۹ پیشنهاد می شود. G_{max} بزرگترین بردار در بسط فوریهٔ چگالی بار را می دهد که مقدار پیش فرض آن عدد ۲۱

KGEN

در این مرحله تعداد نقاط k در ناحیهٔ اول بریلوئن بمنظور مش بندی تولید می شود. هر قدر تعداد نقاط k بیشتری انتخاب شود، حجم محاسبات بیشتر می شود ولی نتایج دقیق تری حاصل می شود.

DSTART

این برنامه، چگالی های اتمی تولید شده در مرحلهٔ LSTART را ترکیب کرده و یک چگالی بار اولیه برای شروع محاسبات خودسازگار تولید می کند.



۲.۲.۳ برنامه های مرحلهٔ حل خودسازگار[۲۶، ۲۵]

در این مرحله ، با استفاده از چگالی بار تولید شده در مرحلهٔ آماده سازی ، معادلات کوهن شم بصورت خودسازگار در طی چند فرآیند حل می شوند. در این چرخه، دو دسته معادله نوشته می شود یکی برای الکترون های مغزه که این معادله کاملاً نسبیتی است و دیگری برای الکترون های ظرفیت که این معادلهٔ نیمه نسبیتی است. مراحل حل خودسازگار بصورت زیرند:

مرحلهٔ «LAPW

این مرحله با استفاده از چگالی بار ورودی ، پتانسیل کامل _{Vtot} را که حاصلجمع دو پتانسیل کولنی و تبادلی_همبستگی است محاسبه کرده و آنرا در حل معادلات کوهن_شم بکار می برد.

مرحلهٔ LAPW۱

این مرحله با استفاده از پتانسیل کامل الکترونی تولید شده در مرحلهٔ قبل و قرار دادن آن در معادلهٔ تک ذره ای کوهن_شم ، ماتریس های همپوشانی را تولید کرده و با قطری کردن آنها ویژه مقادیر و ویژه توابع الکترونی الکترون های ظرفیت را محاسبه می کند.

مرحلة LAPWSO

این مرحله مشابه مرحلهٔ قبل است با این تفاوت که برهمکنش اسپین مدار را در یک روند وردشی مرتبهٔ ۲ در محاسبات الکترون های ظرفیت درون کرات بصورت نسبیتی۔اسکالری لحاظ می کند که این برهمکنش بصورت یک جملهٔ اختلالی به هامیلتونی اضافه می شود. توجه شود که اصل نسبیت را فقط برای الکترون های درون کرات می توان اعمال نمود ، چون الکترون های خارج از کره ها سرعت بالایی نداشته و نمی توان نسبیت را برای آنها اعمال نمود.

مرحلهٔ LAPW۲

این برنامه از ویژه مقادیر محاسبه شده در مراحل LAPWSO و LAPWSO استفاده کرده و انرژی فرمی و بسط های چگالی های بار الکترونی را برای حالات اشغال شدهٔ درون و بیرون کرات مافین تین محاسبه می کند سپس بارهای ظرفیت و شبه مغزی درون و بیرون کره ها را با انتگرال گیری محاسبه می کند.

مرحلة LCORE

این برنامه ویژه مقادیر و ویژه توابع انرژی الکترون های مغزه را با حل نسبیتی معادلهٔ شرودینگر و با در نظر گرفتن قسمت کروی پتانسیل محاسبه می کند. همچنین نیروهای وارد بر اتم ها را محاسبه می کند.

مرحلة MIXER

این برنامه چگالی های الکترونی حالات مغزه ، شبه مغزه و ظرفیت را با هم ترکیب کرده تا یک چگالی جدید حاصل شود. سپس این چگالی جدید نسبت به بار کل هسته ها بهنجار می شود. چون اگر چگالی خروجی یک چرخه مستقیماً بعنوان چگالی ورودی چرخهٔ بعدی استفاده شود، باعث واگرایی در چرخهٔ بعدی خواهد شد.

فصل ۴

بررسی ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نیمرسانای حجمی SigN_F – 6 خالص

۱.۴ مقدمه

دراین بخش با استفاده از بسته محاسباتی Wien ۲k در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و با استفاده از روش پتانسیل کامل امواج تخت بهینه شدهٔ خطی (FP - LAPW) ، توسط دو تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و چگالی موضعی (LDA)، ابتدا به بهینه سازی پارامترهای ورودی این بستهٔ محاسباتی نظیر T_{max} موز یه ابتدا به بهینه سازی پارامترهای ورودی این بستهٔ محاسباتی نظیر FP - LAPW و FR_{max} و سپس با بهینه سازی حجم بستهٔ محاسباتی نظیر FP - LAPW و FR_{max} و میه مازی پارامترهای ورودی این بستهٔ محاسباتی نظیر FP - LAPW و FR_{max} و میه مازی پارامترهای ورودی این بستهٔ محاسباتی نظیر FP - LAPW و FR_{max} و میه مازی پارامترهای ورودی این بستهٔ محاسباتی نظیر FP - LAPW و FR_{max} و میه مازی پارامترهای ورودی این یاخته، پارامترهای تعادلی شبکه را بدست می آوریم.در ادامه ساختار نواری ، چگالی حالات کلی و جزئی و چگالی ابر الکترونی نیمرسانای سیلیکون نیتراید خالص نوع بتا در حالت حجمی را محاسبه کرده و نهایتاً به بررسی خواص اپتیکی این ترکیب مانند بخش های حقیقی و موهومی محاسبه کرده و نهایتاً به بررسی خواص اپتیکی این ترکیب مانند بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک ، ضریب شکست، ضریب خاموشی، ضریب جذب، و یا بازتاب، رسانندگی این ترکیب مانند و مای بازتاب می ایندگی این ترکیب ماند و مرب بازتاب محاستای ای تابع دی الکتریک ، ضریب شکست، ضریب خاموشی و مربه مایند و محاسبای ای تابع دی الی ایرد و تابع اتلاف انرژی الکترون پرداخته خواهد شد.

۲.۴ بهینه سازی پارامترهای ورودی

۱.۲.۴ بهینه سازی نقاط k در ناحیهٔ اول بریلوئن

در ابتدا با استفاده از کارهای تجربی انجام شده [۶] ، ثابت های شبکه را بصورت : a = ۷/۶۰۷A° b = ۷/۶۰۷A° c = ۲/۹۱۱A°

و موقعیت اتم ها را (شامل اتم های نیتروژن نوع ۱، نوع ۲، و اتم های سیلیکون) مطابق جدول ۱.۴ در نظر گرفتیم:

جدول ۱.۴: موقعیت اتم ها در ترکیب سیلیکون نیتراید بتا [۶]							
		x	y	z			
	N١	৽৾৾৻ৼ৸৸৸৸৸	°/ ?????? ?	۰/۲۵			
	N۲	०/٣٣٢٣	0/0 71 F	۰/۲۵			
	Si	°/ \\ ٣٣	°/V۶9۴	∘⁄۲۵			

شعاع کره های مافین تین برای دو نوع اتم نیتروژن و اتم سیلیکون در هر دو تقریب برابر شعاع کره های مافین تین برای دو نوع اتم نیتروژن و اتم سیلیکون در هر دو تقریب برابر $1/\Delta Aa.u$. و انرژی جداسازی ^۱ الکترونهای ظرفیت (و شبه مغزه) و مغزه پس از آزمودن مقادیر مختلف معادل -V/1Ry در نظر گرفته شد. بمنظور مش بندی صحیح ناحیهٔ اول بریلوئن بایستی تعداد نقاط k را در هر راستا در این ناحیه بهینه نمود. مش بندی این ناحیه به روش منخورست-پک ^۲ انجام می شود. برای این منظور ابتدا مقادیر RK_{max} و RK_{max} را مقادیر پیش فرض سیستم که بترتیب ۷ و ۱۲ می باشند قرار می دهیم. سپس با افزایش مقادیر k در هر راستا انرژی مربوط به هر k را بدست می آوریم. مقدار بهینهٔ k مقداری است که به ازای مقادیر بیشتر آن انرژی کل یاخته تغییر نکند. همانگونه که در شکل ۱.۴ مشاهده می شود تعداد ۲۰۰ نقطه در فضای K در هر دو تقریب (GGA و GGA) بهینه گردید.

RK_{max} بهینه سازی ۲.۲.۴

توابع پایه بصورت ترکیبی از توابع کروی در داخل کره های مافین تین و امواج تخت در نواحی بین کره ها بسط داده می شوند. ضرایب بسط امواج تخت با انرژی جنبشی بالا بتدریج کاهش می یابد. می توان با بهینه نمودن انرژی قطع، ضرایب بسط موج تخت و تعداد توابع پایه موج تخت را کاهش داد که این منجر به کاهش حجم محاسبات می شود. در بسته محاسباتی WienTk انرژی قطع توسط پارامتر RK_{max} و طبق رابطهٔ زیر مشخص می شود: [۲۷]

$$RK_{max} = l_{max} \tag{1.f}$$

¹Seperation Energy

 2 Monkhorst-Pack



شکل ۱.۴: بهینه سازی نقاط k برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\text{F}}N_{\text{F}}$ خالص با استفاده از دو تقریب (آ): LDA و (ب): LDA و (ب): M

که R شعاع مافین تین اتم سبک ، K_{max} مجذور انرژی قطع و m_{ma} بیشینهٔ عدد کوانتومی G_{max} مداری می باشد. برای بهینه سازی انرژی قطع، با قرار دادن تعداد نقاط k بهینه شده و g_{max} مداری می باشد. برای بهینه سازی انرژی قطع، با قرار دادن تعداد نقاط k بهینه شده و g_{max} بهینه، فرض، انرژی کل یاخته به ازای RK_{max} های مختلف محاسبه می شود. RK_{max} بهینه، مقداری است که به ازای مقادیر بیشتر از آن انرژی کل یاخته تغییر نکند. با توجه به شکل ۲.۴ معداری است که به ازای RK_{max} و کم شدن میزان تغییرات، مقدار بهینهٔ پارامتر RK_{max} در هر دو تقریب برابر ۸ انتخاب شد.



شکل ۲.۴: بهینه سازی انرژی قطع برای نمونهٔ حجمی β – Si_wN_۴ خالص با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

همگرایی محاسبات از مرتبهٔ ۴-۱۰ در نظر گرفته شد.

G_{max} بهینه سازی ۳.۲.۴

بزرگترین بردار در بسط فوریهٔ چگالی بار است [۲۵] . با استفاده از مقادیر بهینه شدهٔ G_{max} بزرگترین بردار در بسط فوریهٔ چگالی بار است G_{max} همانند دو پارامتر دیگر بهینه خواهد شد. با $k - point = \mathsf{T}^{\circ \circ}$

توجه با شکل (۳.۴) در تقریب GGA چون دامنهٔ تغییرات *G_{max} بین ۱*۳ و ۱۴ ناچیز است، مقدار ۱۴ را برای *G_{max} و در تقریب LDA مقدار ۱*۳ را در نظر می گیریم.



شکل ۳.۴: بهینه سازی پارامتر Gmax برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_r N_f$ خالص با استفاده از دو تقریب (آ): LDA و (ب): LDA

۴.۲.۴ بهینه سازی حجم و محاسبهٔ ثابت های تعادلی شبکه

بعد از بهینه سازی نقاط k در شبکهٔ وارون و انرژی قطع و G_{max} ، گام بعدی بهینه سازی ثابت های تعادلی شبکه می باشد. ثابت های شبکه تاثیر مستقیم روی خواص فیزیکی ماده دارند و بنابراین بهینه سازی آنها بسیار مهم می باشد. برای این منظور با مشخص نمودن تعدادی درصد کاهش و درصد افزایش برای حجم ساختار، تعدادی نقطه حاصل شده و سپس از روی برازش مورناگان نمودار انرژی کل ساختار بر حسب حجم حاصل می شود. نقطه کمینهٔ این نمودار در واقع کمینهٔ حجمی است که به ازای آن انرژی ساختار کمینه خواهد شد(شکل f



شکل ۴.۴: نمودار انرژی کل سلول $\beta - Si_r N_r$ بر حسب حجم در دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

پارامترهای تعادلی شبکه با نسبت یکسانی تغییر می کنند یعنی:

$$\frac{a_t}{a_e} = \frac{b_t}{b_e} = \frac{c_t}{c_e} \tag{7.4}$$

(اندیس t معرف ثابت شبکه تئوری و اندیس e معرف ثابت شبکه تجربی) با داشتن حجم تئوری V_e راندیس t می شود) و حجم تجربی V_t ،از روابط زیر می توان ثابت های تعادلی شبکه را بدست آورد:

$$\left(\frac{V_t}{V_e}\right) = \left(\frac{a_t}{a_e}\right)^{\mathsf{r}} \Longrightarrow a_t = \left(\frac{V_t}{V_e}\right)^{\frac{1}{\mathsf{r}}} \times a_e \tag{(\texttt{r.f})}$$

با روابطی مشابه می توان b_t و b_t را بدست آورد [۲۵] .در جدول ۲.۴ مقادیر ثابت های تعادلی شبکه محاسبه شده برای این ترکیب در هر دو تقریب GGA و LDA و در جدول ۳.۴ مقادیر مدول حجمی محاسبه شده در این کار در هر دو تقریب آورده شده و با سایر کارها مقایسه گردیده است. همانگونه که مشاهده می شود مقادیر حاصل در این کار در توافق خوبی با مقادیر نظری و تجربی می باشد که دیگران انجام داده اند.

ثابت های شبکه(`A									
								دير	مقا
در این کار				در سایر کارهای نظری			تجربی [۲۸]		
LDA GGA		[\\lambda] LDA [\\Y] GGA		aıb	С				
a،b	c	aıb	С	aıb	c	aıb	c		
ν/۵γλ	۲/۹۰	٧/۶۶٧	۲/۹۳۳	٧/8010	४/९०४	٧/۶١٣	۲/۹۱۰	٧/۵٨٦	४∕ ९०४

جدول ۲.۴: پارامترهای تعادلی شبکه برای نمونهٔ حجمی β – Si_WN_F خالص.

جدول ۳.۴: مدول حجمی محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\pi}N_{
m f}$ خالص با استفاده از تقریب های GGA و LDA و مقایسهٔ آنها با سایر کارها.

مدول حجمی نمونهٔ حجمی β – Si _۳ N _۴ خالص (GPa)							
بن کار	در ای	مای نظری	در سایر کارہ	مقدار تجربی[۲۹]			
LDA	GGA	LDA	[۶] GGA	۲۷۰			
781/202	۲۴۰/۵۸	_	798				

۵.۲.۴ واهلش ساختار

در این مرحله که آخرین مرحلهٔ بهینه سازی می باشد، با وارد کردن ثابت های تعادلی شبکه که در مرحلهٔ قبل حاصل شدند به اتم ها اجازه داده می شود تا وردش کوچکی در جایگاهشان داشته باشند تا از این طریق بتوان جایگاهی را که کمینهٔ نیرو به اتم ها وارد می شود بدست آورد. موقعیت های تعادلی حاصل برای اتم ها در جدول ۴.۴ نشان داده شده است. بررسی ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نیمرسانای حجمی $eta - Si_{ extsf{T}}N_{ extsf{F}}$ خالص ۳۸

جدول ۴.۴: موقعیت تعادلی اتم ها در سلول واحد $eta - Si_{ extsf{r}} N_{ extsf{f}}$ حجمی پس از واهلش ساختار در تقریب GGA.

	x	y	z
N١	৽/۳۳۳۳۳۳	°/ ?????? ?	∘⁄۲۵
N۲	°/TT9X1X1Q	৽/৽٣৽١١٢٧١	۰/۲۵
Si	°/17412718	৽៸៴឵۶៱៰៱៴៰៴	∘⁄۲۵

۶.۲.۴ شکل ساختار و طول پیوندها

با بدست آوردن ثابت های تعادلی شبکه و موقعیت های تعادلی اتم ها در سلول واحد، شکل سلول واحد، شکل سلول واحد، شکل سلول واحد ساختار $\beta - Si_{\pi}N_{\epsilon}$



. $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ شكل ۵.۴: سلول واحد نمونهٔ حجمی ۵.۴

محاسبهٔ طول پیوندها به جهت محاسبه دقیق تر شعاع کره های مافین تین مهم می باشد. LDA میانگین طول پیوند های Si - N در این کار در تقریب I/V۴۷ A° GGA میانگین طول پیوند های N/V۴۷ در این کار در توافق خوبی می باشد [۶، ۱۶].

$eta - Si_{m}N_{ m f}$ بررسی خواص الکترونی ترکیب ۳.۴

۱.۳.۴ محاسبهٔ ساختار نواری

برای محاسبهٔ ساختار نواری ابتدا بایستی با انجام محاسبات خودسازگار انرژی فرمی مشخص شود. سپس با توجه به اینکه ترکیب $\beta - Si_m N_F$ در ساختار ورتسایت متبلور می شود، در منطقهٔ اول بریلوئن ⁽ که در شکل ۶.۴ نشان داده شده است، مسیر انتگرال گیری مناسب انتخاب می شود که در این کار بصورت زیر در نظر گرفته شد :

 $\Gamma \longrightarrow K \longrightarrow H \longrightarrow A \longrightarrow \Gamma \longrightarrow M \longrightarrow L \longrightarrow A$

 $^{1}\mathrm{Primitive}$ Brillioun Zone



شکل ۶.۴: مسیر انتگرال گیری در منطقهٔ اول بریلوئن در ساختار ورتسایت.

با در نظر گرفتن سطح انرژی صفر برای انرژی فرمی، ساختار نواری این ترکیب در مسیر ذکر شده در گسترهٔ انرژی ۱۰eV – تا ۱۰eV بدست آمد(شکل ۷.۴). همانگونه که در شکل ۷.۴



شکل ۲۰.۴: ساختار نواری محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی β – Si_۳ N_۴ خالص با استفاده دو تقریب (آ): GGA (ب): LDA.

مشاهده می شود در هر دو تقریب بیشینهٔ نوار ظرفیت بین نقاط Γ و A و کمینهٔ نوار رسانش در نقطهٔ Γ رخ می دهد. بنابراین گاف نواری این ترکیب در هر دو تقریب غیرمستقیم می باشد.

بررسی ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نیمرسانای حجمی $eta = Si_{ extsf{T}}N_{ extsf{F}}$ خالص $extsf{F}$

مقدار گاف نواری محاسبه شده در این کار و مقایسهٔ آن با مقادیر محاسبه شده در سایر کارها در جدول ۵.۴ گزارش شده است که توافق نسبتاً خوبی با مقادیر تجربی و کارهای نظری انجام شده دارد [۶، ۱۰، ۱۷].

جدول ۵.۴: گاف نواری محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\rm T}N_{\rm f}$ خالص با استفاده از تقریب های GGA و LDA و مقایسهٔ آنها با سایر کارها

$({ m eV})$ گاف نواری نمونهٔ حجمی $eta_{ m F} N_{ m f}$ خالص						
در این کار		های نظری	مقدار تجربی[۱۰]			
LDA	GGA	[٣º] LDA	[<mark>\Y</mark>] GGA	$r/2-\Delta/\Delta$		
4/11	۴/۲	4/90	4/20			

۲.۳.۴ محاسبهٔ چگالی حالت های کلی (DOS) وجزئی (PDOS)

همانگونه که قبلاً اشاره شد، منظور از چگالی حالت ها ،(DOS) تعداد حالت های الکترونی قابل دسترس در واحد حجم در واحد انرژی می باشد. یک DOS بزرگ در یک نوار انرژی به معنی اینست که در آن نوار انرژی تعداد حالت های الکترونی بیشتری برای اشغال شدن وجود دارد. چگالی حالت های صفر در یک نوار انرژی به معنی اینست که در آن نوار، هیچ حالتی برای اشغال شدن توسط الکترون وجود ندارد.

نقطهٔ مرجع انرژی را، انرژی فرمی در نظر می گیریم که بصورت خطی عمودی بین نوار ظرفیت و رسانش در شکلها مشاهده می شود و معادل صفر الکترون ولت اختیار شده است. با توجه به نتایج بدست آمده مشاهده می شود که در تراز فرمی هیچ حالتی برای اشغال شدن وجود ندارد. ترازهای با انرژی بیشتر از انرژی فرمی مربوط به نوار رسانش و ترازهای با انرژی کمتر از آن مربوط به نوار ظرفیت می باشند. گاف نواری بدست آمده از ساختار نواری همخوانی خوبی با گاف نواری بدست آمده از چگالی حالت ها دارد. با توجه به شکل ۸.۴ ، بدلیل نبود هیچگونه قطبش اسپینی و تقارن چگالی حالت های با اسپین بالا و پائین در هر دو تقریب، مشخص می شود که سیلیکون نیتراید نوع بتا در حالت حجمی هیچگونه خاصیت مغناطیسی از خود نشان نمی دهد. چگالی حالت های کلی جمع چگالی حالت های جزئی اتم های تشکیل دهندهٔ ترکیب می باشد. شکل ۹.۴ چگالی حالت های جزئی با اسپین بالا را برای اتم های سیلیکون و نیتروژن در ترکیب $\beta - Si_{\sf T}N_{\sf F}$ در هر دو تقریب GGA و LDA نشان می دهد. با توجه به این شکل در نوار ظرفیت ، در تقریب GGA و در کل بازه انرژی صفر تا ۱۰ الکترون ولت بیشترین سهم مربوط به اتم های N۲ و سپس بترتیب اتم های N۱ و Si است. ولی در تقریب LDA اتم های N۱ مشارکتی بیشتر و در حد اتم های N۲ دارند. در نوار رسانش، در تقریب GGA بیشترین سهم مربوط به هر دو اتم N۲ و Si و اتمهای N۱ مشارکت کمتری دارند لیکن در تقریب LDA در محدودهٔ انرژی های ۴٬۵e۷ تا ۶e۷ نتیجه ای مشابه GGA ولی در انرژی های بالاتر اتم های *N*۱ مشارکت بیشتری را نسبت به تقریب GGA نشان می



شکل ۸.۴: چگالی حالات کلی محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ خالص با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب) LDA:



شکل ۹.۴: چگالی حالت های جزئی با اسپین بالا محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\text{F}}N_{\text{F}}$ خالص با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب) :LDA.



شکل ۱۰.۴: چگالی حالت های جزئی اتم های نیتروژن محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ خالص با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب) :LDA.

دهند. در شکل های ۲۰.۴ و ۱۱.۴ سهم اربیتالی هر یک از اتم ها در این ترکیب در هر دو تقریب GGA و LDA مشخص شده است و هر دو نتایج تقریباً یکسانی را نشان می دهند. با توجه به این شکل ها در نوار ظرفیت، در هر دو تقریب در محدودهٔ انرژی های ۰ تا ۱۰ الکترون ولت سهم عمده مربوط به اربیتال های p = N - p می باشد. در تشکیل نوار رسانش نیز در هر دو تقریب، اربیتال های N - p مشارکت بیشتری دارند.



شکل ۱۱.۴: چگالی حالت های جزئی اتم های سیلیکون محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ خالص با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب) :LDA.

۳.۳.۴ توزیع چگالی ابر الکترونی

بمنظور مشخص شدن نقش پیوندی اتم های سیلیکون و نیتروژن، محاسباتی روی توزیع الکترون های ظرفیت در ساختار تعادلی صورت گرفت. شکل ۱۲.۴ توزیع الکترون های ظرفیت سلول واحد را نشان می دهد. همانگونه که مشاهده می شود توزیع بار اطراف اتم های سیلیکون و نیتروژن کروی نیست و بدلیل تفاوت در الکترون خواهی آنها، چگالی بارها از اتم های سیلیکون بطرف اتم های سیلیکون و نیتروژن کروی نیست و بدلیل تفاوت در الکترون خواهی آنها، چگالی بارها از اتم های سیلیکون و نیتروژن کروی نیست و بدلیل تفاوت در الکترون خواهی آنها، چگالی بارها از اتم های سیلیکون و نیتروژن کروی نیست و بدلیل تفاوت در الکترون خواهی آنها، چگالی بارها از اتم های سیلیکون بطرف اتم های نیتروژن کشیده شده است. پیوند $N - Sir_N$ در ترکیب می تواند از نوع یونی و هم از نوع کوالانسی باشد [۶] . توزیع بارهای ظرفیت بیشتر در اطراف موقعیت های نیتروژن جایگزیده شده اند.

$\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ بررسی خواص اپتیکی ترکیب ۴.۴

۱.۴.۴ تابع دی الکتریک

تابع دی الکتریک از دو بخش حقیقی ٤٦ و موهومی ٤٦ تشکیل شده است. بخش حقیقی از تبدیل کرامرز گرونیک و بخش موهومی از عناصر ماتریس تکانه قابل محاسبه هستند. در شکل های ١٣٠۴ و ١۴.۴ بترتیب بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک محاسبه شده



 $eta = \frac{1}{2} C$ با $z = \frac{1}{2} C$ در سلول واحد $\beta - Si_{T}N_{F}$ های ظرفیت در صفحهٔ x - y با $z = \frac{1}{2} C$ در سلول واحد

با دو تقریب GGA و LDA در گسترهٔ انرژی صفر تا ۱۴e۷ برای هر سه راستای x و y و z نشان داده شده است. مشاهده می شود در دو راستای x و y نمودارها کاملاً یکسان بوده و بنابراین نمونهٔ حجمی Si_w N_F – Si_w خالص در دو راستای x و y خواص اپتیکی یکسانی دارد. بخش موهومی تابع دی الکتریک مستقیماً به ساختار بلوری ترکیب بستگی دارد. هر قله در



شکل ۱۳.۴: بخش حقیقی تابع دی الکتریک در نمونهٔ حجمی β – Si_۳N_۴ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

نمودار (ω) نمودار (ω) نمودار بانگر یک گذار بین نواری در ساختار نواری ترکیب می باشد. در نمودار بخش موهومی، اولین نقطه بحرانی در انرژی حدود ۴/۲e۷ رخ می دهد.این نقطه آستانهٔ گذار اپتیکی بین بیشینهٔ نوار ظرفیت و کمینهٔ نوار رسانش است که لبهٔ جذب یا همان گاف نواری نامیده می شود. مقدار (ω) می در فرکانس صفر نشان دهندهٔ پاسخ دی الکتریک به میدان الکتریکی استاتیک است که در مودار (ω) می شود. مقدار (ω) ماری در فرکانس صفر نشان دهندهٔ پاسخ دی الکتریک به میدان الکتریک می شود. می شود، می دو تقریب حدود ۳/۴ می باشد. همانگونه که در نمودار شکل ۱۳۰۴ می مشاهده می شود، فرکانس پلاسمایی در تقریب GGA معادل ω می باشد. در انرژی معادل LDA معادل ω می شوده و بنابراین ترکیب می باشد. می باشد. در انرژی های باراین ترکیب می باشد. در انرژی های بزرگتر از مقادیر فوق (ω) منفی بوده و بنابراین ترکیب

 $\beta - Si_{\eta}N_{\varphi} + Si_{\eta}N_{\varphi}$ خاصیت فلزی از خود نشان می دهد و تابش فرودی را جذب می کند. در نمودار ۹/۶eV و ۹/۶eV و ۹/۶eV و ۹/۶eV مشاهده می شود که گذارهای اپتیکی شدت بیشتری دارند. سایر قله ها که شدت کمتری دارند مربوط به گذار از نوارهای ظرفیت پائین تر به اولین نوار رسانش می باشند.



شکل ۱۴.۴: بخش موهومی تابع دی الکتریک در نمونهٔ حجمی β – Si_۳N_۴ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

۲.۴.۴ ضریب شکست و ضریب خاموشی

برای کاربرد یک ماده در قطعات اپتیکی لازم است ابتدا ضریب شکست آنرا بدانیم. هرگاه ضریب شکست یک ترکیب با افزایش انرژی و فرکانس زیاد شود، آن ترکیب شفاف خواهد بود و هرگاه ضریب شکست ترکیبی با افزایش انرژی و فرکانس کاهش یابد، جذب اتفاق می افتد [۳۱]. تمامی قله های ظاهر شده در ضریب شکست به قله های بخش موهومی تابع دی الکتریک مربوطند.

ضریب خاموشی معیاری از جذب فوتون در ماده است [۳۲]. هرقدر ضریب خاموشی کوچکتر باشد عبور امواج الکترومغناطیسی از درون ماده راحت تر و هر قدر ضریب خاموشی بزرگتر باشد نفوذ امواج الکترومغناطیسی به درون ماده دشوارتر خواهد بود [۳۳].

شکل های ۱۵.۴ و ۱۶.۴ بترتیب منحنی های مربوط به ضریب شکست و ضریب خاموشی نمونهٔ $S = Si_{\rm T}N_{\rm f}$ خالص را در دو تقریب GGA و GGA نشان می دهند و هر دو تقریب نتایج تقریباً یکسانی را نشان می دهند. در نمودار مربوط به ضریب شکست در هر دو تقریب، مقدار ضریب شکست استاتیک در انرژی صفر حدود ۱/۸۴ و بیشینهٔ ضریب شکست برای این ترکیب در انرژی حدود ۹/۷ev و برابر ۳/۱ بدست آمد. همچنین در انرژی های حدود ۹/۵ev تا ۱۰ev ضریب شکست ترکیب بسرعت افت و ضریب خاموشی بسرعت صعود می کند. یعنی در این محدوده جذب خوبی اتفاق می افتد.





شکل ۱۶.۴: نمودار ضریب خاموشی محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ با استفاده از دو تقریب (آ): LDA ((ب): GGA ((ب): CDA)

۳.۴.۴ ضریب جذب

رفتار ضریب جذب مشابه رفتار ضریب خاموشی است. شکل ۱۷.۴ نمودار ضریب جذب محاسبه شده برای ترکیب $Si_{\pi}N_{\epsilon} - \beta$ خالص را در دو تقریب GGA و LDA نشان می دهد و هر دو تقریب نتایج تقریباً یکسانی را نشان می دهند. با توجه به نمودار مشاهده می شود که تا لبهٔ جذب، جذبی صورت نمی گیرد. با گذر از لبهٔ جذب، نمودار به شدت صعودی می شود. یعنی در این نواحی انرژی، جذب خوبی صورت می گیرد. قله های اصلی نمودار ضریب جذب در محل قله های بخش موهومی تابع دی الکتریک رخ می دهد. ۴۶ بررسی ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نیمرسانای حجمی $\beta - Si_{\texttt{T}}N_{\texttt{F}}$ خالص



شکل ۱۷.۴: نمودار ضریب جذب محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ با استفاده از دو تقریب (آ): LDA و (ب): LDA.

۴.۴.۴ رسانندگی اپتیکی

شکل ۱۸.۴ رسانندگی اپتیکی محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی β -Si_wN_F خالص را در دو تقریب GGA و LDA نشان می دهد. این نمودار از انرژی معادل با گاف نواری آغاز می شود. در نقاط قله بیشترین میزان جریان رسانش الکترونی مشاهده می شود. با توجه منحنی بیشترین میزان رسانندگی اپتیکی در تقریب GGA درانرژی 9/9eV و در تقریب LDA در انرژی 1000 درانرژی رساند می دهد که با نمودار تغییرات ضریب جذب (۱۷.۴) در توافق می باشد.



شکل ۱۸.۴: نمودار رسانندگی اپتیکی محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی β – Si_۳N_۴ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

۵.۴.۴ بازتابندگی

شکل ۱۹.۴ نمودار بازتابندگی محاسبه شده برای ترکیب $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ خالص را در دو تقریب GGA و LDA نشان می دهد. با توجه به نمودار مشاهده می شود که مقدار بازتابندگی در

انرژی صفر (ضریب بازتاب)در هر دو تقریب برابر ۸۳۰/۰۰ می باشد و تا لبهٔ جذب بازتابندگی با شیب ملایم افزایش می یابد. با شروع فرآیند جذب، بازتابندگی نیز افزایش می یابد.



شکل ۱۹.۴: نمودار بازتابندگی محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی β – Si_r N_۴ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

۶.۴.۴ اتلاف انرژی

این تابع، اتلاف انرژی الکترونی در ماده را توضیح می دهد. شکل ۲۰.۴ طیف اتلاف انرژی را در گسترهٔ انرژی صفر تا ۱۴ الکترون ولت برای نمونهٔ حجمی $\beta = Si_{7}N_{8} - \beta$ خالص در دو تقریب GGA و LDA نشان می دهد. قله های حاضر در طیف اتلاف، مشخصه های مربوط به فرکانس پلاسما هستند [۳۱]. با توجه به نمودار، بیشترین اتلاف در هر دو تقریب در بازهٔ انرژی های ۱۰eV تا ۱۰/۵eV رخ می دهد که در واقع همان انرژی مربوط به پلاسمون های حجمی است. از مقایسه طیف اتلاف با نمودار ضریب خاموشی مشخص می شود که در همان بازه های انرژی که طیف اتلاف بیشترین مقدار را دارد، ضریب خاموشی نیز بیشترین مقدار خود را دارد.

۵.۴ نتیجه گیری

در این فصل ساختار الکترونی نمونهٔ حجمی $N_{\rm F} = \beta - Si_{\rm T} N_{\rm F}$ خالص شامل ساختار نواری، چگالی حالت های کلی و جزئی، چگالی ابر الکترونی، همچنین خواص اپتیکی نمونه شامل بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضرایب شکست، خاموشی، جذب، بازتاب، رسانندگی اپتیکی و تابع اتلاف انرژی الکترونی با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و تقریب چگالی موضعی(LDA) محاسبه گردید.

محاسبات ساختار نواری این ترکیب نشان داد که گاف نواری نمونهٔ حجمی خالص این ترکیب غیر مستقیم می باشد که در تقریب GGA و LDA به ترتیب معادل ۴/۲*eV* و ۴/۲۸*eV*حاصل ۴۸ بررسی ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نیمرسانای حجمی $\beta - Si_{\texttt{T}}N_{\texttt{F}}$ خالص



شکل ۲۰.۴: نمودار تابع اتلاف انرژی الکترون محاسبه شده برای نمونهٔ حجمی $\beta - Si_{7}N_{6}$ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

شد که در توافق خوبی با کارهای نظری و تجربی گزارش شدهٔ دیگران می باشد. همچنین ضرایب دی الکتریک استاتیک و شکست محاسبه شده برای این ترکیب و مقایسهٔ آن با سایر کارهای محاسباتی در جدول ۶.۴ گزارش شده است.

جدول ۶.۴: مقادیر محاسبه شده ثابت دی الکتریک استاتیک و ضریب شکست و مقایسهٔ آن با سایر کارها برای نمونهٔ حجمی $eta - Si_{ au} N_{ au}$ خالص .

ىىت	ضريب شك		ثابت دی الکتریک		
در این در سایرکارها در سایر کارها			در سایر کارها	در سایرکارها	در این
[۳۴](تجربی)	(نظری)[<mark>۱۵</mark>]	کار	(تجربی)	(نظری)[۱ <mark>۶</mark>]	کار
1/99 - 7/04	۲/۳۵	١/٨۴	_	۴/۰۵	۳/۴
فصل ۵

بررسی ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نانو ورقه های خالص N_F – *β*

۱.۵ مقدمه

در این مبحث، ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نانو ورقه های سیلیکون نیتراید فاز بتا در حالت خالص مورد بررسی قرار خواهد گرفت. در این مطالعه، چگالی حالت های کلی و جزئی، گاف نواری ترکیب، چگالی ابر الکترونی و همچنین خواص اپتیکی نظیر بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضرایب شکست ، خاموشی و جذب، رسانندگی اپتیکی، بازتابندگی و تابع اتلاف انرژی الکترون با استفاده از دو تقریب گرادیان شیب تعمیم یافته (GGA) و با چگالی موضعی (LDA) بررسی خواهند شد. محاسبات در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و با استفاده از نرم افزار Wien7k انجام شده است.

۲.۵ بهینه سازی پارامترهای ورودی

بمنظور انجام محاسبات مربوط به نانو ورقه $N_{\mathsf{F}} = Si_{\mathsf{T}}N_{\mathsf{F}}$ ، ابتدا سلول واحد ۱۴ اتمی حالت محمی را در نظر گرفته و به منظور جلوگیری از برهمکنش اتم ها، یک خلاء به میزان $10A^\circ$ در راستای محور Z و عمود بر صفحهٔ y = x - y وارد کردیم. در نتیجه یک ابر سلول ۱۴ اتمی

 $eta - Si_{ extsf{N}}N_{ extsf{F}}$ بررسی ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نانو ورقه های خالص δ°

شامل ۸ اتم نیتروژن و ۶ اتم سیلیکون داشتیم.

1.۲.۵ بهینه سازی نقاط k در ناحیهٔ اول بریلوئن

بمنظور بهینه سازی نقاط k برای نانو ورقهٔ $Si_{7}N_{6} - \delta$ در فضای وارون، مشابه حالت حجمی عمل می کنیم با این تفاوت که چون در نانو ورقه یک ناحیهٔ خلاء در راستای محور z اعمال کرده ایم، یک درجه آزادی کمتر نسبت به حالت حجمی داریم و بایستی در مش بندی نقاط شبکهٔ وارون، در راستای محور z محدودیت اعمال کنیم. با در نظر گرفتن مقادیر پیش فرض شبکهٔ وارون، در راستای محور z محدودیت اعمال کنیم. با در نظر گرفتن مقادیر پیش فرض برای RK_{max} و به ازای مقادیر پیش فرض شبکهٔ وارون، در راستای محور z محدودیت اعمال کنیم. با در نظر گرفتن مقادیر پیش فرض مرای RK_{max} و به ازای مقادیر مختلف برای k - point نمودارهای شکل k. ایرای دو GGA ورون برای دو مرای RK_{max} و به ازای مقادیر به معادیر به معان کنیم. با در نظر محدولی محدودیت اعمال کنیم و با در نظر محدولی مقادیر پیش فرض برای RK_{max} و به ازای مقادیر مختلف برای GGA معردارهای شکل R در شبکهٔ وارون برای هر دو تقریب به صورت k - point محاسبه گردید.



شکل ۱.۵: بهینه سازی نقاط k در شبکهٔ وارون برای نانو ورقهٔ خالص $\beta - Si_{\text{F}}N_{\text{F}}$ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA و (ب)

۲.۲.۵ بهینه سازی انرژی قطع

همانگونه که در مبحث ۲.۲.۴ مطرح گردید، انرژی قطع در بستهٔ محاسباتی Wien^{Tk} توسط پارامتر _{RKmax} مشخص می شود. با قرار دادن تعداد نقاط k بهینه شده و مقدار _{Gmax} که در تقریب *GGA* برابر ۱۴ و در تقریب *LDA* برابر ۱۳ در نظر گرفته می شود، انرژی کل ابر سلول را در هر دو تقریب GGA و LDA به ازای _{RKmax} های مختلف محاسبه می کنیم. با توجه به مقادیر حاصل و نمودارهای شکل ۲.۵ مقدار بهینهٔ پارامتر _{RKmax} در هر دو تقریب برابر ۸/۵ انتخاب شد.



شکل ۲.۵: بهینه سازی انرژی قطع برای نانو ورقهٔ خالص $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

۳.۲.۵ بهینه سازی حجم ابر سلول و محاسبهٔ ثابت های تعادلی شبکه

پس از بهینه سازی تعداد نقاط k در شبکهٔ وارون و پارامتر RK_{max} ، گام بعدی بهینه سازی ثابت های تعادلی شبکه می باشد. شکل ۳.۵ نمودار مربوط به بهینه سازی حجم ابر سلول توسط برازش مورناگان را در هر دو تقریب GGA و LDA نشان می دهد. با توجه به این نمودارها و روابط (۲۰۴ $\beta - Si_{m}N_{f}$ مقادیر جدول ۱.۵ بدست آمدند:



شکل ۳.۵: بهینه سازی حجم و ثابت های تعادلی شبکه برای ابر سلول β – *Si*۳*N*_۴ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

 $eta - Si_{ extsf{r}} N_{ extsf{f}}$ بررسی ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نانو ورقه های خالص eta

	<u> </u>	<u></u>	<u> </u>	. 0	<u> </u>
ثابت های شبکه([°] A)				می (GPa)	مدول حج
LDA		GGA		LDA	GGA
aıb	с	aıb	С		
٧/٦٥٧	7/947	٧/٧۵٢	7/988	229/6819	T1X/0144

جدول ۱.۵: پارامترهای تعادلی شبکه و مدول حجمی برای نانو ورقهٔ $\beta - Si_{\text{F}}N_{\text{F}}$ خالص.

۳.۵ محاسبهٔ ساختار نواری

ساختار نواری نانو ورقهٔ خالص $Si_{\pi}N_{F} - \beta$ در راستای مسیرهای پرتقارن در منطقهٔ اول بریلوئن و در گسترهٔ انرژی های $V \circ I$ تا $V \circ I$ در هر دو تقریب GGA و GGA در شکل ۴.۵ نشان داده شده است. با توجه به این شکل ها مشخص شد که در هر دو تقریب گاف نواری ترکیب $\beta - Si_{\pi}N_{F} - \beta$ خالص در حالت نانو ورقه در نقطهٔ *T* و مستقیم است. همچنین مقدار این گاف نواری در تقریب GGA حدود *V*/26 و در تقریب LDA حدود *V*/77 اندازه گیری می شود که نسبت به حالت حجمی کاهش خوبی را نشان می دهد. گاف نواری محاسبه شده در توافق خوبی با کار گروه شانموگاکومار و همکاران [۲] می باشد که در سال ۲۰۱۶ گاف نواری نانو ورقه های این ترکیب را در تقریب GGA برابر *V*/96 و مستقیم محاسبه نمودند.



شکل ۴.۵: ساختار نواری نانو ورقهٔ خالص $Si_{m}N_{4}$ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA

۴.۵ محاسبهٔ چگالی حالت های کلی و جزئی

بمنظور مشخص شدن سهم هر یک از اتم ها در حالات اشغال شدهٔ نانو ورقهٔ $Si_{\pi}N_{\pi} = \beta - \beta$ و سهم اربیتالی آنها، چگالی حالات کلی و جزئی این ترکیب را محاسبه نمودیم. شکل ۵.۵ چگالی حالت های کلی با اسپین بالا و پائین را برای نانو ورقهٔ خالص $Si_{\pi}N_{\pi} = \beta - \beta$ در دو تقریب GGA و CGA در حالت های کلی با اسپینی بالا و پائین را برای نانو ورقهٔ خالص $Si_{\pi}N_{\pi} = \beta - \beta$ در دو تقریب LDA و بنابراین ترکیب زمان می دهد. با توجه به این شکل ها، هیچگونه قطبش اسپینی مشاهده نمی شود. بنابراین ترکیب زمان می ندارد. شکل ۶.۵



شکل ۵.۵: چگالی حالت های کلی با اسپین بالا و پائین برای نانو ورقهٔ خالص β – Si_{w Ne} با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.



شکل ۶.۵: چگالی حالت های جزئی با اسپین بالا برای نانو ورقهٔ خالص β – Si_w N_F با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.



شکل ۲.۵: چگالی حالت های جزئی اتم های نیتروژن نوع ۱ و ۲ در نانو ورقهٔ خالص β – Si_w N_۴ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.



شکل ۸.۵: چگالی حالت های جزئی اتم های سیلیکون در نانو ورقهٔ خالص β – Si_wN_F با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

$\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ بررسی خواص اپتیکی نانو ورقهٔ خالص ۵.۵

۱.۵.۵ تابع دی الکتریک



شکل ۹.۵: نمودار بخش حقیقی تابع دی الکتریک برای نانو ورقهٔ خالص β – Si_w N_F با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

در نمودار بخش حقیقی تابع دی الکتریک، در محدودهٔ فرکانس صفر، پاسخ دی الکتریک به میدان الکتریکی صفر در تقریب GGA تقریباً ۶/۳۶ و در تقریب LDA تقریباً ۶/۹۲ است. در نواحی که بخش حقیقی تابع دی الکتریک منفی می شود،ترکیب خاصیت فلزی از خود نشان میدهد و تابش فرودی را جذب می کند. فرکانسی که قسمت حقیقی تابع دی االکتریک به ازای آن منفی می شود را فرکانس پلاسما می نامیم. همانگونه که از روی نمودارهای (ω) مشاهده می شود فرکانس پلاسما برای دو تقریب GGA و LDA بترتیب ۹/۶۴e بدست می آید. بنابراین انتظار داریم در انرژی های فوق با توجه به ظاهر شدن خصلت فلزی بیشترین میزان جذب و جریان رسانشی الکترون ها را شاهد باشیم.



شکل ۱۰.۵: نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک برای نانو ورقهٔ خالص $\beta - Si_{\pi}N_{\epsilon}$ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

۲.۵.۵ ضریب شکست و ضریب خاموشی

شکل ۱۱.۵ نمودارهای ضریب شکست و ضریب خاموشی نانو ورقهٔ خالص $\beta - Si_{\rm T}N_{\rm F}$ را در دو تقریب GGA و GGA نشان می دهد. با توجه به نمودار ضریب شکست، مقدار ضریب شکست مقدار ضریب شکست مقدار ضریب شکست مقدار ضریب شکست محمد استاتیک در انرژی صفر در دو تقریب فوق بترتیب ۲/۵۲ و ۲/۶۳ حاصل شد. در فرکانس پلاسما که خصلت فلزی ظاهر می شود و برای دو تقریب GGA و GGA و GGA بترتیب ۹/۶۴eV و ۹/۶۴ محملت فلزی ظاهر می شود که ضریب شکست به سرعت کاهش و ضریب خاموشی به سرعت افزایش می یابد. این بدان معنی است که از این انرژی ها به بالا، نانو ورقهٔ $\beta - Si_{\rm T}N_{\rm F}$ و ۲/۶۳ محملت فلزی خاموشی به سرعت فلزی فلوم می شود که ضریب شکست به سرعت کاهش و ضریب خاموشی به سرعت افزایش می یابد. این بدان معنی است که از این انرژی ها به بالا، نانو ورقهٔ $\beta - Si_{\rm T}N_{\rm F}$



شکل ۱۱.۵: نمودار ضرایب شکست و خاموشی محاسبه شده برای نانو ورقهٔ خالص $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

۳.۵.۵ ضریب جذب

نمودار ضریب جذب محاسبه شده برای نانو ورقهٔ خالص $\beta - Si_m N_{\rm f}$ در شکل ۱۲.۵ و برای هر دو تقریب GGA و LDA نشان داده شده است. این نمودار رفتاری بسیار مشابه با رفتار نمودار ضریب خاموشی دارد. همانگونه که از روی این نمودارها مشاهده می شود، فرآیند جذب از لبهٔ جذب که همان گاف نواری ترکیب می باشد بتدریج شکل می گیرد و با افزایش انرژی و فرکانس افزایش می یابد. قله های مشاهده شده در نمودار ضریب جذب توافق خوبی با قله های مشاهده شده در نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک دارند.



شکل ۱۲.۵: نمودار ضریب جذب محاسبه شده برای نانو ورقهٔ خالص $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA و (ب)

۴.۵.۵ رسانندگی اپتیکی

همانگونه که قبلاً اشاره شد، رسانندگی اپتیکی به گذار بین نواری مربوط است. پس انتظار داریم آستانهٔ رسانندگی اپتیکی در محدودهٔ گاف نواری اتفاق بیفتد. شکل ۱۳.۵ نمودار رسانندگی اپتیکی محاسبه شده برای نانو ورقهٔ خالص ۶*i*_W*N* م را در دو تقریب GGA و LDA نشان می دهد. در محل قله ها بیشترین جریان رسانشی الکترون ها وجود دارد. با توجه به این نمودارها مشاهده می شود بیشترین میزان رسانندگی اپتیکی در دو تقریب GGA و LDA ب بترتیب در انرژی های ۹/۶۴eV و ۷۹°۹/۹ رخ می دهد که همان فرکانس پلاسما می باشند. رسانندگی اپتیکی رابطهٔ مستقیمی با بخش موهومی تابع دی الکتریک دارد و قله های هر دو نمودار در موقعیت های مشابه رخ می دهد.

۵.۵.۵ بازتابندگی

شکل ۱۴.۵ نمودار بازتابندگی محاسبه شده برای نانو ورقهٔ خالص $\beta - Si_{\text{W}}N_{\text{F}}$ را در دو تقریب GGA و LDA نشان می دهد. در نمودار بازتابندگی، در قله ها بیشترین بازتاب رخ می دهد.

 $eta - Si_{ extsf{w}} N_{ extsf{k}}$ بررسی ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نانو ورقه های خالص eta A



شکل ۱۳.۵: نمودار رسانندگی اپتیکی محاسبه شده برای نانو ورقهٔ خالص β – Si_۳N_۴ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

با توجه به این نمودارها، در انرژی های حدود ۹٬۵e۷ تا ۱۰٬۵e۷ که فرکانس پلاسما نیز در این محدوده قرار می گیرد و نانو صفحات از خود رفتار فلزی نشان می دهند، بیشترین میزان بازتابندگی (درخشندگی)را شاهد هستیم و این رفتار در هر دو تقریب یکسان است. همچنین میزان بازتابندگی در انرژی صفر(ضریب بازتاب) در تقریب GGA معادل ۱۹/۰ و در تقریب LDA معادل ۲/۰ بدست آمد.



شکل ۱۴.۵: نمودار بازتابندگی محاسبه شده برای نانو ورقهٔ خالص $\beta - Si_{7}N_{6}$ با استفاده از دو تقریب (آ): LDA و (ب): LDA و (ب)

۶.۵.۵ اتلاف انرژی

شکل ۱۵.۵ طیف اتلاف انرژی الکترونی نانو ورقهٔ خالص $\beta - Si_{\pi}N_{\epsilon}$ را در دو تقریب GGA و LDA نشان می دهد. قله های مشاهده شده در طیف اتلاف مشخصه های مربوط به نوسان LDA نشان می دهد. با توجه به این نمودار، بیشترین اتلاف در هر دو تقریب در انرژی حدود



۱۱/۳ الکترون ولت رخ می دهد که انرژی مربوط به پلاسمون های حجمی است.

شکل ۱۵.۵: نمودار اتلاف انرژی الکترونی محاسبه شده برای نانو ورقهٔ خالص $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ با استفاده از دو تقریب (آ): GGA و (ب): LDA.

۶.۵٪ نتیجه گیری

در این فصل پس از ساخت ابر سلول و انجام بهینه سازی های لازم، ساختار الکترونی نانو ورقه های خالص $\beta = Si_{\rm W}N_{\rm F}$ شامل ساختار نواری و چگالی حالت های کلی و جزئی؛ همچنین خواص اپتیکی نانو ورقه های این ترکیب شامل بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضرایب شکست ، خاموشی، جذب، بازتاب، رسانندگی اپتیکی و تابع اتلاف انرژی الکترونی با استفاده از دو تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و چگالی موضعی (LDA) محاسبه گردید.

محاسبات ساختار نواری نشان داد که گاف نواری $N_{F} - \beta$ خالص در حالت نانو ورقه مستقیم شده که معادل LDA در تقریب GGA و معادل ۳/۲*eV* در تقریب LDA بدست آمد که در توافق خوبی با کارهای دیگران است [۲۱، ۷]. مقدار (ω)، ε در فرکانس صفر که نشان دهندهٔ پاسخ دی الکتریک به میدان الکتریکی استاتیک است، در تقریب های GGA و LDA بترتیب ۶/۳۶ و ۶/۹۲ بدست آمد. با استفاده از منحنی ضریب شکست، مقدار ضریب شکست استاتیک در انرژی صفر در تقریب GGA برابر ۲/۵۲ و در تقریب LDA برابر ۲/۶۳ محاسبه گردید. همچنین با استفاده از طیف بازتاب، بازتابندگی در انرژی صفر (ضریب بازتاب) در دو تقریب GGA و GGA بترتیب ۱۹۸۰ و ۲/۵ بدست آمدند. مشاهده گردید در فرکانس پلاسما که در دو تقریب GGA و GGA بترتیب ۹/۶۰ و ۵/۹ بدست آمدند، بدلیل ظهور خصلت فلزی در نانو ورقه، جذب و بازتاب افزایش چشمگیری داشتند. همچنین بیشترین اتلاف انرژی که مربوط به پلاسمون های حجمی است در هر دو تقریب در انرژی حدود ۱/۲ رخ می دهد.

فصل ۶

بررسی ساختار الکترونی نانو ورقه های آلایش یافتهٔ β – Si_w N_k

در این کار ابتدا نانو ورقهٔ $Si_{\pi}N_{
m F}$ با عنصر اکسیژن با درصدهای ۶/۲۵ ، ۱۲/۵ و ۲۵ آلایش شده و سپس ساختار نواری و چگالی حالت های کلی و جزئی و خواص اپتیکی این ترکیب را با تقریب GGA محاسبه و نتایج حاصل با نتایج نانو ورقهٔ خالص $\beta - Si_{\pi}N_{
m F}$ مقایسه شدند.

۱.۶ شيوهٔ آلايش

بمنظور انجام آلایش، ابتدا باید به طراحی ابر سلول ^۱ بپردازیم. ابر سلول انتخابی ما برای انجام آلایش های مورد نظر، یک ابرسلول ۱ × ۲ × ۲ است که شامل ۵۶ اتم (۲۴ اتم Si و ۳۲ اتم آلایش های مورد نظر، یک ابرسلول ۲ × ۲ × ۲ است که شامل ۵۶ اتم (۲۴ اتم Si و ۳۲ اتم ۱۵) می باشد. برای این کار در راستای Z خلائی به میزان ^۵ ۸۸ اعمال شد. ابر سلول انتخابی در شکل ۱۰۶ نمایش داده شده است. در این ابر سلول ۲۸ جایگاه مستقل برای اتم ها وجود دارد که ۲۰ جایگاه آن متعلق به اتم های نیتروژن و ۲۲ جایگاه مستقل برای اتم ها وجود دارد که ۲۰ جایگاه آن متعلق به اتم های نیتروژن و ۲۲ جایگاه آن متعلق به اتم های سیلیکون می باشد. با توجه به اینکه نیتروژن و اکسیژن اعداد اتمی بسیار نزدیک به یکدیگر دارند پس دارای خواص فیزیکی مشابه اند و با ورود آلایش اکسیژن احتمال جانشینی آنها با دارند پس دارای خواص فیزیکی مشابه اند و با ورود آلایش اکسیژن احتمال جانشینی آنها با اتم های نیتروژن در نانو ورقهٔ $\beta - Si_r N_{\rm f}$

 $^{^{1}}$ SuperCell



شكل ۱.۶: ابرسلول انتخابي شامل ۵۶ اتم براي انجام آلايش

مشابه نیز انرژی جانشینی اکسیژن بجای نیتروژن و اکسیژن بجای سیلیکون محاسبه گردیده که انرژی جانشینی اکسیژن بجای نیتروژن بسیار کوچکتر حاصل شده که در مرور مقالات ذکر گردید [۱۷]. لیکن به منظور جانشینی اتم های اکسیژن بجای نیتروژن ابتدا بایستی جایگاه های مناسب برای این آلایش را در بین اتم های نیتروژن بیابیم. با پارامترهای ورودی یکسان، برای ۱۶ جایگاه مستقلی که برای اتم های نیتروژن وجود دارد، بترتیب اتم اکسیژن را جانشین کرده و در هر حالت انرژی کل ساختار را بدست می آوریم. جایگاههایی که کمینهٔ انرژی ساختار را دارا هستند، جایگاه مناسب برای جانشینی اکسیژن می باشند.جدول ۱.۶ انرژی کل ساختار را در هر جایگاه جانشینی اتم اکسیژن نشان می دهد. با توجه به انرژی های ذکر شده در جدول مشاهده می شود جایگاه های ۸۷ ، ۸۱۰ ، ۸۱۳ و ۸۱۶ دارای کمترین انرژی هستند، یعنی $eta - Si_{m}N_{5}$ مناسب ترین جایگاه برای جانشینی می باشند. برای آلایش ۶/۲۵ درصد نانو ورقهٔ با اکسیژن کافیست بجای اتم های نیتروژن جایگاه ۱۰ اتم های اکسیژن جانشین نمائیم. همچنین برای آلایش ۱۲/۵ درصد بایستی اتم های N۱۰ و N۱۶ و برای آلایش ۲۵ درصد، اتم های ۸۷، ۸۱۰، ۸۱۳ و ۸۱۴ را با اکسیژن جانشین نمائیم. شکل ۲.۶ ابر سلول ساخته شده را در حالت آلایش ۶/۲۵ درصد اکسیژن، شکل ۳.۶ ابر سلول ساخته شده را در حالت آلایش ۱۲/۵ درصد اکسیژن و شکل ۴.۶ این ابر سلول را در حالت آلایش ۲۵ درصد اکسیژن نشان می دهند.

بهینه سازی پارامترهای ورودی و ثابت های تعادلی شبکه ۶۳

انرژی ساختار(Ry)	جایگاه های نیتروژن	انرژی ساختار(Ry)	جایگاه های نیتروژن
-1V212/8982V	N٩	-14010/V°9V1	N١
-1Y212/Y1Y00	N) \circ	-14010/V09V1	N۲
-17212/71879	N	-14010/V°941	N٣
-1V212/8988°	NIT	-14010/V°941	N F
-17212/11899	N۱۳	-18010/81889	N۵
-17212/71879	N۱۴	-17010/89109	N \$
-1V212/8988°	N۱۵	-18010/81899	NY
-17212/11899	N \%	-18010/81889	N A

جدول ۱.۶: مقادیر انرژی محاسبه شده برای جانشینی اکسیژن در جایگاه های مختلف نیتروژن.





شکل ۲.۶: ابر سلول $\beta - Si_{\rm T} N_{\rm F}$ شامل ۵۶ اتم در آلایش ۶/۲۵ درصد اکسیژن.

۲.۶ بهینه سازی پارامترهای ورودی و ثابت های تعادلی شبکه

پارامتر G_{max} با توجه به اینکه از تقریب استفادهGGA می کنیم برابر ۱۴ در نظر گرفته شد. پارامتر RK_{max} آلایش های مختلف بررسی گردید و در همه حالات همانند ابرسلول ۱۴ اتمی برابر ۸/۵ بهینه گردید. پارامتر بعدی، تعداد نقاط k در فضای وارون می باشد. با توجه به اینکه حجم ابر سلول ساخته شده تقریباً ۴ برابر حجم ابر سلول اولیه می باشد و با در نظر گرفتن اینکه افزایش حجم ابرسلول در فضای واقعی باعث کاهش حجم آن در فضای وارون



شکل ۳.۶: ابر سلول $eta - Si_{ extsf{m}} N_{ extsf{s}}$ شامل ۵۶ اتم در آلایش ۱۲/۵ درصد اکسیژن.



شکل ۴.۶: .ابر سلول $\beta - Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ شامل ۵۶ اتم در آلایش ۲۵ درصد اکسیژن

خواهد شد، در نتیجه می توان تعداد نقاط K را برای این ابر سلول کوچکتر در نظر گرفت. پس از آزمودن مقادیر مختلف مقدار $1 \times 7 \times 7$ برای تعداد نقاط K بهینه گردید. شکل های ۵.۶ و ۶.۶ و ۷.۶ نمودارهای انرژی بر حسب حجم را بترتیب برای آلایش های ۶/۲۵، ۱۲/۵



و ۲۵ درصد اکسیژن در تقریب GGA نشان می دهند. با استفاده از روابط (۲.۴) و (۳.۴)

شکل ۵.۶: نمودار انرژی بر حسب حجم محاسبه شده برای آلایش ۶/۲۵ درصد اکسیژن.



شکل ۶.۶: نمودار انرژی بر حسب حجم محاسبه شده برای آلایش ۱۲/۵ درصد اکسیژن.



شکل ۷.۶: نمودار انرژی بر حسب حجم محاسبه شده برای آلایش ۲۵ درصد اکسیژن.

ثابت های تعادلی شبکه در این آلایش ها بدست آمدند که نتایج آن در جدول ۲.۶ گزارش شده است.

	ثابت های تعادلی شبکه (^A)		
آلايش	a, b	с	
۶/۲۵ درصد اکسیژن	10/249	۲/۹۱۷	
۱۲/۵ درصد اکسیژن	10/779	۲/۹۲۳	
۲۵ درصد اکسیژن	10/304	۲/۹۳۷	

. $eta - Si_{ extsf{T}}N_{ extsf{F}}$ جدول ۲.۶: ثابت های تعادلی شبکه برای آلایش اکسیژن در نانو ورقهٔ

۳.۶ محاسبهٔ ساختار نواری و چگالی حالات کلی و جزئی

ساختار نواری نانو ورقهٔ $Si_{\pi}N_{\epsilon} = \beta$ آلاییده با اکسیژن در گسترهٔ انرژی های $1 \circ eV$ تا $1 \circ eV$ با درصدهای مختلف در تقریب GGA محاسبه شد. همچنین بمنظور مشخص شدن سهم هر یک از اتم ها در نانو ورقه های آلاییده، چگالی حالت های کلی و جزئی اتم ها و نیز سهم اربیتالی آنها محاسبه شدند.

۱.۳.۶ آلایش ۶/۲۵ درصد اکسیژن

شکل ۸.۶ ساختار نواری نانو ورقهٔ $\beta - Si_{rr}N_{
m F}$ آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن را نشان می دهد. با توجه به این شکل بروز نوار های ناخالصی در مجاورت تراز فرمی و در محدودهٔ انرژی های -۱/۷۹eV تا ۱eV، مشاهده می شود که این یدیده میتواند ،گذار الکترون از بیشینهٔ نوار ظرفیت به کمینهٔ نوار رسانش را نسبت به نمونهٔ خالص تسهیل نماید. همچنین مشاهده می شود در نوارهای ظرفیت و رسانش نوارها در مقایسه با حالت حجمی و نانو ورقهٔ خالص فشرده تر شده اند. شکل ۹.۶ چگالی حالت های کلی نانو ورقهٔ $\beta - Si_{\rm T}N_{\rm F}$ آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن را نشان می دهد. با توجه به شکل و تقارن اسپین های بالا و پائین، مشخص می شود آلایش اکسیژن هیچگونه قطبش اسپینی در نانو ورقه های $eta - Si_{m T} N_{m F}$ ایجاد نمی کند. شکل های ۱۰.۶ تا ۱۳.۶ چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ β – Sim N_F آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن را نشان می دهند. در شکل ۱۰.۶ مشاهده می شود نوار های شکل گرفته درون گاف نواري مربوط به ناخالصي اکسيژن مي باشند. همچنين مشاهده مي شود در نوار ظرفيت و در محدودهٔ انرژی های ۴/۲ – تا ۹/۵–الکترون ولت سهم عمده مربوط به حالت های وابسته به اتم های نیتروژن می باشد. از محدودهٔ انرژی ۱/۸ev که نوارهای ناخالصی شکل می گیرند تا حدود انرژی ۵*eV* در نوار رسانش سهم عمده مربوط به اربیتال های اتم های اکسیژن می باشد. همچنین در چگالی حالت های جزئی مشاهده می شود در اتم نیتروژن هم در نوار N-s ظرفیت و هم در نوار رسانش سهم غالب با اربیتال های N-p بوده و اربیتال های



شکل ۸.۶: (آ)ساختار نواری نانو ورقهٔ ۶/۲_۳، آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA. شکل (ب)مربوط به حالت خالص این نانو ورقه می باشد.



شکل ۹.۶: چگالی حالت های کلی نانو ورقهٔ $N_{\mathsf{F}} - Si_{\mathsf{T}} N_{\mathsf{F}}$ آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.

اندکی در نوار رسانش و در محدودهٔ انرژی های ۱/۵ تا ۲/۵ الکترون ولت و همچنین اندکی در تراز فرمی سهم دارند. در اتم سیلیکون هم در نوار ظرفیت و هم در نوار رسانش سهم غالب با اربیتال p = Si می باشد و اربیتال s = Si مشارکت کمتری دارد. در اتم اکسیژن، هم در نوار ظرفیت و هم در زوار می در ازم اکسیژن، می در نوار اربیتال و می در نوار می در ازم ای در ازم ای در ازم ای در ازم در ازم ای در ازم در نوار اربیتال و می در نوار می در نوار فرفیت و هم در نوار می در ازم ای در ازم ای در ازم ای در ازم ای در ازم در نوار ازمی در ازم ای در ازم ای در ازم در نوار ازمی در ازم ای در ازم ای در ازم ای در ازم ای در ازم در نوار ازمی در نوار ازمی در نوار ازمی در نوار ازمی در نوار ازم در ازم ای در ازم ای در ازم در نوار ازمی در نوار ازمی در نوار ای در ازم در در ازم در ازم در ازم در در ازم در ازم در ازم در ازم در در ازم در ازم در ازم در ازم در ازم در ازم در در ازم در در ازم در ازم درم در ازم درم در ازم در ازم درم در ازم در ازم درم درم در ازم درم درم درم درم



شکل ۱۰.۶: چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $S = Si_{\rm T}N_{\rm F}$ آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.



شکل ۱۱.۶: چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $S - Si_{\rm T}N_{\rm f}$ آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.



شکل ۱۲.۶: چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $S = Si_{\rm T}N_{\rm F}$ آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.



شکل ۱۳.۶: چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ *Si*۳*N*_۴ آلاییده با ۶/۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.

۲.۳.۶ آلایش ۱۲/۵ درصد اکسیژن

شکل ۱۴.۶ ساختار نواری نانو ورقهٔ $Si_{7}N_{6} = \beta$ که ۱۲/۵ درصد با اکسیژن آلاییده شده است را نشان می دهد. با توجه به این شکل همانند آلایش ۶۶/۲۵درصد، بروز نوارهای ناخالصی در مجاورت تراز فرمی و در محدودهٔ انرژی های ۱/۸۴e۷ – تا ۶۹۰/۰ مشاهده می شود. همچنین مشاهده می شود هم در نوار ظرفیت و هم در نوار رسانش، نوارها فشرده تر می شوند. همچنین تعداد نوارهای ناخالصی نسبت به نمونهٔ ۶/۲۵ آلاییده با اکسیژن، افزایش می یابد. شکل ۱۵.۶



شکل ۱۴.۶: (آ)ساختار نواری نانو ورقهٔ ۶i_۳N_۴ م آلاییده با ۱۲/۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA. شکل (ب)مربوط به حالت خالص این نانو ورقه می باشد.

چگالی حالت های کلی نانو ورقهٔ $\beta - Si_{W}N_{
m f}$ آلاییده با ۱۲/۵ درصد اکسیژن را نشان می دهد. با

توجه به این شکل مشاهده می شود در آلایش ۱۲/۵ درصد اکسیژن نیز قطبش اسپینی در نانو $\beta - Si_7 N_8$ ورقه ها نخواهیم داشت. شکل های ۱۹.۶ تا ۱۹.۶ چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ



شکل ۱۵.۶: چگالی حالت های کلی نانو ورقهٔ β – Si_۳N_۴ آلاییده با ۱۲/۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.

که ۱۲/۵ درصد با اکسیژن آلاییده شده است را نشان می دهد. در شکل ۱۶.۶ مشاهده می شود در نوار ظرفیت در محدودهٔ انرژی های ۴/۴ – تا۹/۵ – الکترون ولت، سهم غالب مربوط به حالت های اتم های نیتروژن می باشد. در گا ف نواری و از محدودهٔ انرژی حدود ۱/۸*eV – که* نوارهای ناخالصی شکل می گیرند تا انرژی حدود ۵*eV* در نوار رسانش سهم غالب مربوط به اربیتال های اتم های اکسیژن می باشد. در شکل ۱۷.۶ مشاهده می شود هم در نوار ظرفیت



شکل ۱۶.۶: چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ *Si*۳*N*_۴ آلاییده با ۱۲/۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.

و هم در نوار رسانش سهم عمده با الکترو ن های اربیتال p نیتروژن می باشد و الکترونهای اربیتال s نیتروژن تنها در نوار رسانش و در محدودهٔ انرژی های ۱ تا ۳ الکترون ولت مشارکت دارند. با توجه به شکل ۱۸.۶ مشاهده می شود برای اتم سیلیکون در نوار ظرفیت و رسانش سهم عمده با الکترون های p می باشد و اندکی در نوار رسانش و در محدودهٔ انرژی ۵/۵e۷



شکل ۱۷.۶: چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $Si_{\pi}N_{
m F}$ آلاییده با ۱۲/۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.



شکل ۱۸.۶: چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $Si_{
m W}N_{
m F}$ آلاییده با ۱۲/۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.



شکل ۱۹.۶: چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $Si_{\pi}N_{
m F}=eta$ آلاییده با ۱۲/۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.

الکترون های s سیلیکون مشارکت دارند. در شکل ۱۹.۶ مشاهده می شود هم در نوار رسانش و هم در نوار ظرفیت، الکترون های اربیتال p اکسیژن سهم عمده را دارا هستند و فقط در $eta - Si_{ extsf{r}}N_{ extsf{f}}$ بررسى ساختار الكتروني نانو ورقه هاى آلايش يافتهٔ $N_{ extsf{f}}$

تراز فرمی که زیر نوار رسانش قرار گرفته است تا انرژی حدود ۱٬۸e۷– که نوار های ناخالصی حضور دارند، الکترون های اربیتال s اکسیژن سهم غالب را دارا می باشند.

۳.۳.۶ آلایش ۲۵ درصد اکسیژن

شکل ۲۰.۶ ساختار نواری نانو ورقهٔ $Si_{\pi}N_{\epsilon}$ که ۲۵ درصد با اکسیژن آلاییده شده است را نشان می دهد. با توجه به این شکل مشاهده می شود که این بار نیز نوارهای ناخالصی درون گاف نواری و در مجاورت تراز فرمی و در محدودهٔ انرژی های ۲۰۰۶eV تا ۱۰۶/۰ مشاهده می شود. همچنین نوارها نسبت به نمونهٔ خالص فشرده تر می شوند. شکل ۲۱.۶ چگالی حالت



شکل ۲۰.۶: (آ)ساختار نواری نانو ورقهٔ *Si*۳*N*_۴ آلاییده با ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA. شکل (ب)مربوط به حالت خالص این نانو ورقه می باشد.



شکل ۲۱.۶: چگالی حالت های کلی نانو ورقهٔ *Si_m N*_۴ آلاییده با ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.



شکل ۲۲.۶: چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ آلاییده با ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.



شکل ۲۳.۶: چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $Si_{
m N_{
m F}} = \beta$ آلاییده با ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.



شکل ۲۴.۶: چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $Si_{ au}N_{ au} = eta$ آلاییده با ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.



شکل ۲۵.۶: چگالی حالت های جزئی نانو ورقهٔ $Si_{\text{T}}N_{\text{F}}$ آلاییده با ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.

۴.۶ خواص اپتیکی

در این بخش، خواص اپتیکی نانو ورقهٔ $Si_{\pi}N_{
m F}$ که بترتیب با ۶/۲۵ ، ۱۲/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن آلاییده شده است در تقریب GGA مورد بررسی قرار گرفت.

۱.۴.۶ تابع دی الکتریک

شکل های ۲۶.۶ و ۲۷.۶ بترتیب نمودارهای بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک را برای نانو ورقه های $Simp_{\rm NF} = \beta$ آلاییده با ۲۸/۵ ، ۲۵/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن که در تقریب GGA محاسبه شده اند، نشان می دهند. با توجه به شکل گرفتن نوارهای میانی درون گاف نواری و تقسیم گاف نواری به گاف های کوچکتر، انتظار می رود گذار اپتیکی در انرژی های پائین تری صورت گیرد. همانگونه که در نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک مشاهده می شود گذار در انرژی های می می دهند. با توجه به شکل گرفتن نوارهای میانی درون گاف نواری و تقسیم گاف نواری به گاف های کوچکتر، انتظار می رود گذار اپتیکی در انرژی های می شود و با توجه می موهومی تابع دی الکتریک مشاهده می شود گذار در انرژی های بینین تری صورت گیرد. همانگونه که در نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک مشاهده می شود گذار در انرژی های بسیار پائین تری نسبت به نانو ورقهٔ خالص رخ می دهد و با توجه به اینکه در آلایش ۲۵ درصد اکسیژن گاف های کوچکتری داریم، لبهٔ جذب در نمودار بخش موهومی این آلایش، در انرژی کمتری نسبت به سایر درصدهای اکسیژن قرار می گیرد.



شکل ۲۶.۶: بخش حقیقی تابع دی الکتریک در نانو ورقهٔ ۶i۳N_۴ – *β* آلاییده با ۶/۲۵، ۱۲/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.

در نمودار بخش حقیقی تابع دی الکتریک، در محدودهٔ فرکانس صفر، پاسخ دی الکتریک به میدان الکتریکی صفر در تقریب GGA و برای نانو ورقه های آلاییده با ۶/۲۵ و ۱۲/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن بترتیب ۵/۲۱ ، ۸–۱۴/۰ و ۱۷/۵۸ و برای نمونهٔ خالص ۶/۳۶ محاسبه شده بود.همچنین مقادیر فرکانس پلاسما که خصلت فلزی در آن نمود پیدا می کند برای آلایش اکسیژن با درصدهای ۶/۲۵ و ۱۲/۵ و ۲۵ اندازه گیری شد که بترتیب مقادیر ۱/۷۸e۷ و ۱/۳۱e۷ و ۱/۲e۷ و برای نمونهٔ خالص مقدار ۹/۶۴e۷ محاسبه شده بود. با توجه به مقادیر فرکانس



شکل ۲۷.۶: بخش موهومی تابع دی الکتریک در نانو ورقهٔ $\beta - Si_{\rm T}N_{
m f}$ آلاییده با ۶/۲۵، ۱۲/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.

پلاسما،در آلایش ۲۵ درصد اکسیژن، در انرژی پائین تری خصلت فلزی ظاهر می شود بنابراین در آلایش ۲۵ درصد فرایند جذب زودتر اتفاق می افتد.

۲.۴.۶ ضرایب شکست و خاموشی

شکل های ۲۸.۶ و ۲۹.۶ بترتیب نمودارهای ضرایب شکست و خاموشی را برای نانو ورقه های Sign_γ – *β*آلاییده با ۲۸/۵ ، ۲۵/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن که در تقریب GGA محاسبه شده اند، نشان می دهند. در نمودار ضریب شکست، مقادیر ضریب شکست استاتیک برای نانو ورقۀ آلاییده با ۲/۵۵ ، ۲/۱۵ و ۲۵ درصد اکسیژن، بترتیب ۲/۲۸، ۲/۷۵ و ۴/۱۹ بدست آمد که در مقایسه با ضریب شکست محاسبه شده برای نانو ورقۀ خالص در تقریب GGA ، در آلایش مقایسه با ضریب شکست محاسبه شده برای نانو ورقۀ خالص در تقریب GGA ، در آلایش شاهد هستیم. همچنین مشاهده می شود در انرژی های نزدیک به فرکانس پلاسما و ظاهر شدن خصلت فلزی در نانو ورقه های آلاییده، ضریب شکست بطور قابل توجهی افزایش می در آلایش ۲۸/۵ درصد رخ میدهد و در آلایش ۲۵/۵ درصد رخ میدهد و سپس برای آلایش ۲/۵ درصد رخ میدهد و در آلایش (۲۹.۶ با شدت بسیار کمتری رخ می دهد. با گذر از قله و افت ضریب شکست، ضریب خاموشی (شکل ۲۹.۶) صعودی شده و فرآیند جذب صورت می گیرد.

۳.۴.۶ ضریب جذب

شکل ۲۰.۶ نمودارهای ضریب جذب محاسبه شده برای نانو ورقهٔ $\beta - Si_{r}N_{r}$ لاییده با ۶/۲۵، GGA 17/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن را در تقریب GGA نشان می دهد و رفتار آن بسیار مشابه رفتار



شکل ۲۸.۶: نمودار ضریب شکست در نانو ورقهٔ ۶*i*۳*N*_۴ آلاییده با ۶/۲۵، ۱۲/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.



شکل ۲۹.۶: نمودار ضریب خاموشی در نانو ورقهٔ $eta = Si_{ au} N_{ au}$ آلاییده با ۶/۲۵، ۱۲/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.

ضریب خاموشی است. با توجه به نمودار های ضریب جذب مشاهده می شود فرآیند جذب از لبهٔ جذب که حدود ΔeV است شروع شده و در فرکانس پلاسمایی که خصلت فلزی در نانو ورقه ها ظاهر می شود، رشد صعودی داشته و سپس افت می کند. در انرژی های ΔeV تا P/TeV در نانو ورقه های آلاییده جذبی نخواهیم داشت ولی از انرژی P/TeV به بالا فرآیند جذب در هر سه آلایش سیر صعودی خواهد داشت. با توجه به اینکه که ضریب جذب نمونه ها از مرتبه $\frac{1}{cm}$ بوده که مقدار بزرگی است، نتیجه می گیریم این نمونه ها برای استفاده در کاربردهای اپتیکی بسیار مناسب هستند.



شکل ۰.۶°: نمودار ضریب جذب در نانو ورقهٔ $Si_{\rm T}N_{
m F} = eta$ آلاییده با ۶/۲۵، ۱۲/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.

۴.۴.۶ رسانندگی اپتیکی

شکل ۲۱.۶ نمودار رسانندگی اپتیکی محاسبه شده برای نانو ورقهٔ $Si_{\pi}N_{5} - Si_{\pi}N_{5}$ ، شکل ۲۱.۶ و ۲۵ درصد اکسیژن را در تقریب GGA نشان می دهد. رسانندگی اپتیکی به گذارهای بین نواری مربوط است و با قسمت موهومی تابع دی الکتریک رابطهٔ مستقیم دارد. انرژی آستانه در رسانندگی اپتیکی همان گاف نواری نانو ورقه های $\beta - Si_{\pi}N_{5}$ آلاییده با اکسیژن است. در نمودار مشاهده می شود که در انرژی های بزرگتر از ۶۰۷ بهترین رسانندگی مربوط به می دارد. انرژی است. در نمودار مشاهده می شده با اکسیژن است. در نمودار مشاهده می شود که در انرژی های بزرگتر از ۶۰۷ بهترین رسانندگی مربوط به نانو ورقه آلاییده با ۵

۵.۴.۶ بازتابندگی

شکل ۲.۶۳ نمودار بازتابندگی محاسبه شده برای نانو ورقه های $N_{\rm F} = \beta$ آلاییده با ۶/۸٬ شکل ۲۵ درصد اکسیژن را در تقریب GGA نشان می دهد. با توجه به نمودار مقدار بازتابندگی در انرژی صفر برای ۲۸/۵، ۲۸/۵ و ۲۵ درصد آلاییدگی اکسیژن بترتیب ۵/۰۰، ۳۳/۰ و ۲۸/۰ در انرژی صفر برای ۲۵/۵، ۲۲/۵ و ۲۵ درصد آلاییدگی اکسیژن بترتیب ۵/۰۰، ۲۰/۵، ۲۸/۰ و ۲۸/۰ بدست آمد که در مقایسه با نانو ورقه های خالص $N_{\rm F} = \beta$ که ۱۸/۵ محاسبه شده بود، در آلایش های ۲/۵ و ۲۵ از نشان می دهد. در محدودهٔ انرژی های ۲۵/۰۰ تا ۲/۵ الایش های ۱۲/۵ و ۲۵ درصد آلاییدگی اکسیژن بترتیب ۵/۰۰ و ۲۸/۰ و ۲۸/۰ بدست آمد که در مقایسه با نانو ورقه های خالص $N_{\rm F} = \beta$ که ۱۸/۵ محاسبه شده بود، در آلایش های ۱۲/۵ و ۲۵ افزایش را نشان می دهد. در محدودهٔ انرژی های ۱/۲e۷ تا ۲/۵e۷ که فرکانس پلاسمای نانو ورقه های $S_{\rm F} = \beta$ آلاییده در آن محدوده قرار می گیرد، بدلیل نمود پیدا کردن خصلت فلزی، بازتابندگی افزایش چشمگیری خواهد داشت، اما سپس کاهش داشته ولی در انرژی های بزرگتر بازتابندگی مجدداً رفتار افزایشی از خود نشان می دهد.



شکل ۳۱.۶: نمودار رسانندگی اپتیکی در نانو ورقهٔ β-Si_T N_F آلاییده با ۶/۲۵، ۱۲/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.



شکل ۳۲.۶: نمودار بازتابندگی در نانو ورقهٔ $S_F N_F = \beta$ آلاییده با ۶/۲۵، ۱۲/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.

۶.۴.۶ اتلاف انرژی

شکل ۳۳.۶ نمودار اتلاف انرژی الکترونی محاسبه شده برای نانو ورقه های $\beta - Si_{\pi}N_{5}$ آلاییده با ۲۲.۶ نمان می دهد. قله های مشاهده با ۲۲/۵ (۲۵ و ۲۵ درصد اکسیژن را در تقریب GGA نشان می دهد. قله های مشاهده شده در نمودارها، مربوط به نوسان های پلاسما هستند. بیشینهٔ اتلاف انرژی برای نانو ورقه های آلاییده با ۲/۱۵ (۲/۱۵ و ۲۵ درصد اکسیژن و نمونهٔ خالص بترتیب در انرژی های ۲/۱۰۷، r/1eV ، ۲/۱eV



شکل ۳۳.۶: نمودار تابع اتلاف انرژی در نانو ورقهٔ $\beta - Si_{\rm T}N_{\rm F}$ آلاییده با ۶/۲۵، ۱۲/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن محاسبه شده در تقریب GGA.

۵.۶٪ نتیجه گیری

در این فصل ابتدا با ساخت ابرسلولی شامل ۵۶ اتم، نانو ورقه های $Si_{7}N_{7} - \beta$ ساخته شدند که بدلیل اعمال خلاء به مقدار °۱۵*A* در راستای محور z امکان برهمکنش بین ورقه ها وجود ندارد. سپس با محاسبهٔ انرژی جانشینی جایگاه های مختلف اتم ها، جایگاه مناسب برای جانشینی اتم های اکسیژن یافت شد و با درصدهای آلایش ۶/۲۵، ۲/۵ و ۲۵ درصد اکسیژن، نانو ورقه های $Si_{7}N_{7}$ آلاییده با اکسیژن ساخته شد. در ادامه پس از بهینه سازی های لازم در هر آلایش، خواص الکترونی نانو ورقه های $Si_{7}N_{7}$ آلاییده با اکسیژن شامل ساختار نواری و چگالی حالت های کلی و جزئی، همچنین خواص اپتیکی آنها شامل قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضرایب شکست، خاموشی، جذب و بازتاب و نیز رسانندگی اپتیکی و طیف اتلاف انرژی آنها با استفاده از تقریب GGA محاسبه شدند.

محاسبات ساختار نواری در هر سه غلظت آلاییدگی ، بروز نوارهای ناخالصی را درون گاف نواری و در محدودهٔ تراز فرمی نشان داد. هم در نوار ظرفیت و هم در نوار رسانش فشردگی زیادی در نوارها نسبت به نمونهٔ خالص این ترکیب مشاهده گردید. بروز این نوارهای ناخالصی باعث شد گذار اپتیکی در انرژی های بسیار کوچکتری نسبت به نمونهٔ خالص رخ دهد.

نتیجه گیری کلی

در این پژوهش ساختار الکترونی و خواص اپتیکی سیلیکون نیتراید نوع بتا در حالت خالص حجمی و نانو ورقه های خالص و نیز نانو ورقه های آلاییده با اکسیژن با درصدهای مختلف بررسی شد. محاسبات مربوط به ساختار حجمی خالص و نانو ورقه خالص با استفاده از هر دو تقریب GGA و LDA و محاسبات مربوط به نانو ورقه های آلاییده بکمک بستهٔ محاسباتی *Wien*7k انجام شد. در بررسی ساختار الکترونی، ساختار نواری و چگالی حالت های کلی و جزئی محاسبه گردید. مطالعهٔ خواص اپتیکی نیز شامل بررسی تابع دی الکتریک، ضرایب شکست، خاموشی، جذب، بازتاب، رسانندگی اپتیکی و تابع اتلاف انرژی می باشد. بررسی ساختار الکترونی نشان داد گاف نواری نمونهٔ حجمی خالص این ترکیب غیر مستقیم و در ورقه به مستقیم تبدیل شده که در تقریب های GGA برابر ۶۸۸*e*7 می باشد. این گاف در حالت نانو ورقه به مستقیم تبدیل شده که در تقریب های GGA و GGA بترتیب *P*۸*e*7 بدست آمد. محاسبات مربوط به نانو ورقه های آلاییده با ناخالصی اکسیژن، بروز نوارهای ناخالصی را درون گاف نواری و در محدودهٔ تراز فرمی نشان داد . همچنین مشاهده گردید با افزایش را درمد آلاییدگی اکسیژن، تراکم نوارهای ناخالص بیشتر می شود. همچنین هم در نوار ظرفیت و هم در نوار رسانش فشردگی نوارها مشاهده شد.

پیشنهادهای مطالعات آتی

۱ مطالعه روی نانو سیم ها و نانو ذرات ترکیب $S_{ir}N_{\mathsf{F}} - Si_{ir}N_{\mathsf{F}}$ مطالعه روی نانو صفحات $S_{ir}N_{\mathsf{F}} - Si_{ir}N_{\mathsf{F}}$ آلاییده با عناصری مانند ایندیوم جهت کاهش بیشتر گاف نواری و تبدیل آن به گاف نواری مستقیم.

مراجع

[۱] على عمر، فيزيك حالت جامد. جلد اول، ترجمه غلامرضا نبيونى، انتشارات دانشگاه اراک، اراک

- [2] fa.wikipedia.org
- [3] www.tf.uni-kiel.de
- [4] Moustakas, T.D. and Pankove, J.I. eds., 1998. Semiconductors and Semimetals. Academic Press.
- [5] Peng, H., 2004. Spark plasma sintering of Si3N4-based ceramics. Dept. of Inorganic Chemistry, Vol. Doctoral Dissertation. Stockholm University, Stockholm, Sweden.
- [6] Belkada, R., Shibayanagi, T., Naka, M. and Kohyama, M., 2000. Ab Initio Calculations of the Atomic and Electronic Structure of -Silicon Nitride. Journal of the American Ceramic Society, 83(10), pp.2449-2454.
- [7] Shanmugakumar, H.V., Veerappan, N. and Ramanathan, C., 2016. First-principles insights on mechanical and electronic properties of TiX (X= C, N) in -Si3N4 based ceramics. Process. Appl. Ceram., 10(3), pp.153-160.
- [8] Gritsenko, V.A., 2012. Electronic structure of silicon nitride. Physics-Uspekhi, 55(5), p.498.
- [9] Giebultowicz, T.M., Luo, H., Samarth, N., Furdyna, J.K. and Rhyne, J.J., 1993. Strain-engineered magnetic phenomena in MnSe/ZnSe, MnTe/ZnTe, and MnSe/ZnTe superlattices. IEEE transactions on magnetics, 29(6), pp.3382-3387.
- [10] Liu, A.Y. and Cohen, M.L., 1990. Structural properties and electronic structure of low-compressibility materials: -Si 3 N 4 and hypothetical -C 3 N 4. Physical Review B, 41(15), p.10727.

- [11] Grün, R., 1979. The crystal structure of -Si3N4: structural and stability considerations between -and -Si3N4. Acta Crystallographica Section B: Structural Crystallography and Crystal Chemistry, 35(4), pp.800-804.
- [12] chemtube3d.com
- [13] Pearton, S.J., Abernathy, C.R. and Ren, F., 2006. Gallium nitride processing for electronics, sensors and spintronics. Springer Science & Business Media.
- [14] Wolf, S.A., Awschalom, D.D., Buhrman, R.A., Daughton, J.M., Von Molnar, S., Roukes, M.L., Chtchelkanova, A.Y. and Treger, D.M., 2001. Spintronics: a spinbased electronics vision for the future. science, 294(5546), pp.1488-1495.
- [15] Kutlu, E., Narin, P., Atmaca, G., Sarikavak-Lisesivdin, B. and Lisesivdin, S.B., 2016. Effect of substitutional As impurity on electrical and optical properties of -Si3N4 structure. Materials Research Bulletin, 83, pp.128-134.
- [16] Huang, Z., Chen, F., Su, R., Wang, Z., Li, J., Shen, Q. and Zhang, L., 2015. Electronic and optical properties of Y-doped Si3N4 by density functional theory. Journal of Alloys and Compounds, 637, pp.376-381.
- [17] Pan, H., 2014. Ab initio design of nanostructures for solar energy conversion: a case study on silicon nitride nanowire. Nanoscale research letters, 9(1), p.531.
- [18] Dresselhaus, M. S. (1999). Solid State Physics Part II Optical Properties Of Solids.
- [19] Sholl, D., Stecked, J. A.(2011). Density functional theory: a practical introduction. John wiley Sons.
- [20] R.G.Parr and W.Yang, (1989), DENSITY-FUNCTIONAL THEORY OF ATOMS AND MOLECULES, Oxford University Press. New York Clareendon Press.Oxford.
- [21] R.M.Martin,(2004), Electronic structure:basic theory and practical methods,Cambridge University Press,Cambridge(UK).
- [22] K.Y.Phoa, V.Subramanian, (2008), Nanoscale organic electronics: Experimental and theoretical studies on alkyl thiophene and rotaxane, Electrical Engineering and computer Sciences University of California at Berkeley.pp,20-24
- [23] J.P.Perdew, K.Burke, M.Ernzerhof, (1996), Phys.Rev.Lett.77,3865
[24] S. Cottenier.(2004)"Density Functional Theory and the Family of (L)APWmethods:a step-by-step introduction",vol.1.05

[۲۵] اسماعیل عبدلی، نوید روهنده، حمید رضا علائی، ۱۳۹۵ ''آشنایی با کد محاسباتی چاپ اول، انتشارات نظری

- [26] Pete. Blaha, Karlheinz. Schwarz, Georg. Madsen, Dieter. Kvasnicka, (2010), "User's Guide, WIEN2K 10.1", Vienna University Of Technology, Austria, pp1. Inst.
- [27] R.G.Parr, W.yang,(1998),"Density functional theory for atoms and molecules", Vol.338, axford university press, pp.47-69
- [28] W.Y. Ching, Y.N. Xu, J.D. Gale, M. Rühle, Ab-initio total energy calculation of a-and b-silicon nitride and the derivation of effective pair potentials with application to lattice dynamics, J. Am. Ceram. Soc. 81 (12) (1998) 3189–3196.
- [29] Ching, W.Y., Xu, Y.N., Gale, J.D. and Rühle, M., 1998. Ab-initio total energy calculation of -and -silicon nitride and the derivation of effective pair potentials with application to lattice dynamics. Journal of the American Ceramic Society, 81(12), pp.3189-3196.
- [30] Kutlu, E., Narin, P., Atmaca, G., Sarikavak-Liłesivdina, B. and Özbay, E., 2017. Electronic structure of -Si3N4 crystals with substitutional icosagen group impurities.
- [31] Guo, L., Zhang, S., Feng, W., Hu, G. and Li, W., 2013. A first-principles study on the structural, elastic, electronic, optical, lattice dynamical, and thermodynamic properties of zinc-blende CdX (X= S, Se, and Te). Journal of Alloys and Compounds, 579, pp.583-593.
- [32] Cao, X., Cai, X., Feng, Q., Jia, S. and Wang, N., 2012. Ultrathin CdSe nanosheets: synthesis and application in simultaneous determination of catechol and hydroquinone. Analytica chimica acta, 752, pp.101-105.
- [33] Jasprit singh, (2003), Semiconductor optoelectronics physics and thechnology. University of michigan, Mc Graw-Hill, Inc, chapter2
- [34] Knoll, R.W. and Henager, C.H., 1992. Optical and physical properties of sputtered Si: Al: O: N films. Journal of materials research, 7(5), pp.1247-1252.

- [35] V. Nagarajan VS, R. Chandiramouli. DFT investigation on structural stability and electronic properties of -Si3N4 and -Si3N4 nanostructures. nternational Journal of ChemTech Research.2014;Volume.6, NUMBER.14.
- [36] Xu, Y.N. and Ching, W.Y., 1995. Electronic structure and optical properties of and phases of silicon nitride, silicon oxynitride, and with comparison to silicon dioxide. Physical Review B, 51(24), p.17379.
- [37] Gan, Z., Wang, C. and Chen, Z., 2018. Material Structure and Mechanical Properties of Silicon Nitride and Silicon Oxynitride Thin Films Deposited by Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition. Surfaces, 1(1), pp.59-72.
- [38] Tao, S.X., Theulings, A., Smedley, J. and van der Graaf, H., 2015. DFT study of electron affinity of hydrogen terminated -Si3N4. Diamond and Related Materials, 53, pp.52-57.
- [39] Hintzsche, L.E., Fang, C.M., Watts, T., Marsman, M., Jordan, G., Lamers, M.W.P.E., Weeber, A.W. and Kresse, G., 2012. Density functional theory study of the structural and electronic properties of amorphous silicon nitrides: Si 3 N 4– x: H. Physical Review B, 86(23), p.235204.
- [40] Huang, L., Han, B., Han, B., Derecskei-Kovacs, A., Xiao, M., Lei, X., O'Neill, M.L., Pearlstein, R.M., Chandra, H. and Cheng, H., 2014. Density functional theory study on the full ALD process of silicon nitride thin film deposition via BDEAS or BTBAS and NH 3. Physical Chemistry Chemical Physics, 16(34), pp.18501-18512.
- [41] He, T., Zhao, M., Li, W., Song, C., Lin, X., Liu, X., Xia, Y. and Mei, L., 2007. Geometric and electronic structures of hydrogen-stabilized silicon nitride nanosheets and nanotubes. The Journal of Physical Chemistry C, 111(45), pp.16840-16845.
- [42] Chen, K., Huang, Z., Liu, Y.G., Fang, M., Huang, J. and Xu, Y., 2013. Synthesis of -Si3N4 powder from quartz via carbothermal reduction nitridation. Powder technology, 235, pp.728-734.
- [43] Deshpande, S.V., Gulari, E., Brown, S.W. and Rand, S.C., 1995. Optical properties of silicon nitride films deposited by hot filament chemical vapor deposition. Journal of Applied Physics, 77(12), pp.6534-6541.

[44] Taguchi, T., Yamamoto, H. and Shamoto, S., 2008. The synthesis and structure of suspended ultra-thin Si3N4 nanosheets. Nanotechnology, 19(48), p.485601.

Abstract

In this thesis, the electronic structure and optical properties of silicon nitride(Si_3N_4) semiconductor in β phase(hexagonal), were investigated. The calculations were carried out based on Density Functional Theory (DFT) using wien2k code and the generalized gradient approximation(GGA) and local density approximation(LDA) for bulk, pure and Oxygen (6.25, 12.5 and 25 percent)-doped $\beta - Si_3N_4$ nano-sheets. For these purposes, the band structure and density of states (DOSs), real and imaginary parts of the dielectric function, refraction coefficient, extinction and absorption coefficients, reflectivity, optical conductivity, and electron energy- loss function were investigated. Our results showed that bulk $\beta - Si_3N_4$ has an indirect bandgap. Using GGA and LDA the calculated bandgap was in the range of 4.2 and 4.18 eV, respectively. In $\beta - Si_3N_4$ nano-sheets the bandgap was converted to direct. This calculated direct bandgap was about 3.5 and 3.2 in GGA and LDA, respectively. In O-doped $\beta - Si_3N_4$ nano-sheets some impurity bands related to Oxygen atoms appeared in the bandgap around the Fermi level. Moreover, the bands in the valance band and the conduction band of the doped $-Si_3N_4$ compared to the un-doped samples were condensed.

Keywords: Density Functional Theory (DFT), Generalized Gradient Approximation (GGA), Local Density Approximation(LDA), Silicon Nitride($_{3}N_{4}$), Band structure, Density of States (Dos), Optical Properties, Electronic Structure, $\beta - Si_{3}N_{4}$ Nano-sheets, O- doped $\beta - Si_{3}N_{4}$ Nano-sheets, .



Faculty Of Physics and Nuclear Engineering

MSc Thesis in Nano physic

Study of electronic structure and optical properties of silicon nitride nanostructures

By: Mohammad Khosravi

Supervisors:

Dr. Morteza IzadiFard Dr. Mohammad Ebrahim Ghazi

September 2019