

اثر آلایندگی Si روی خواص الکترونی و اپتیکی نانو ساختارهای گالیم آرسنید

حیدرعلی شفیعی گل و محبوبه بیگمردی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان

پست الکترونیکی: mahbubeh.bigmoradi@gmail.com

(دریافت مقاله: ۱۳۹۸/۲/۶؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۹/۶/۱۴)

چکیده

در سال‌های اخیر با پیشرفت‌های به دست آمده در رشد مواد، علاقه قابل ملاحظه‌ای در زمینه نیم‌رساناهای مرکب گروه (III-V) به ویژه GaAs وجود آمده است. سیلیکون مناسب‌ترین ماده برای آلیاژهای نوع n گالیم آرسنید است. در این پژوهش خواص الکترونی نانوبلورهای $\text{Ga}_{1-x}\text{As}_x\text{Si}_x\text{H}_{1-x}$ و $\text{Ga}_{1-x}\text{As}_x\text{Si}_x\text{H}_{1-x}$ با استفاده از روش شبه پتانسیل و فرمول‌بندی نظریه تابعی چگالی (DFT) و با تقریب LDA در بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو مورد بررسی قرار می‌گیرند. نتایج حاصل از محاسبات نشان می‌دهند که هرچه اندازه نانوبلور بزرگ‌تر شود مقدار گاف نواری کاهش می‌یابد. با جایگزینی اتم ناخالصی Si به جای اتم As در نانوبلور $\text{Ga}_{1-x}\text{As}_x\text{Si}_x\text{H}_{1-x}$ گاف انرژی نسبت به حالت غیر آلیاژ شده کوچک‌تر و تراز فرمی به لبه نواری رسانش نزدیک می‌شود که در این حالت نانوبلور $\text{Ga}_{1-x}\text{As}_x\text{Si}_x\text{H}_{1-x}$ یک نیم‌رسانای نوع n خواهد بود. پربند چگالی بار الکتریکی در اطراف اتم‌ها نشان دهنده پیوند یونی-کوالانسی بین اتم‌های Si و Ga است. در این پژوهش به بررسی ویژگی‌های اپتیکی نانوبلورهای گالیم آرسنید نیز پرداخته شده که محاسبات با تقریب تک ذره‌ای انجام شده‌اند. همچنین، از نرم‌افزار گوسین برای به دست آوردن طیف اپتیکی نانوبلورها استفاده شده است. محاسبات طیف اپتیکی برای نانوبلورهای گالیم آرسنید انتقال به آبی را نشان می‌دهند.

واژه‌های کلیدی: ناخالصی نوع n نانوبلور گالیم آرسنید، نظریه تابعی چگالی، کوانتوم اسپرسو، خواص الکترونی، تقریب چگالی موضعی، انرژی جذب

۱. مقدمه

نیم‌رساناهاست. با این حال اشکالات مهمی در این کاربردها وجود دارد؛ زیرا سیلیکون دارای گاف نواری غیر مستقیم با تحرک نسبتاً کم حامل‌هاست [۱]. نیم‌رساناهای مرکب به ویژه نیم‌رساناهای گروه (III-V) با توجه به خواص الکترونی آنها، گاف نواری مستقیم و تحرک الکترونی بسیار بالا، مواد نویدبخشی هستند. مواد نیم‌رسانا کاربرد گسترده‌ای در تولید دستگاه‌های نوری و میکروالکترونیکی مانند ترانزیستورهای

معرفی سیلیکون، صحنه را برای نیم‌رساناهای میکروالکترونیک باز کرد. پس از آن نقش مشابه را نیم‌رساناهای گروه (III-V) جدول تناوبی بازی می‌کنند؛ مانند گالیم آرسنید یا فسفید که نیم‌رساناهای اپتوالکتریک را توسعه می‌دهند. سیلیکون از مدت‌های طولانی ماده انتخاب شده برای صنعت

۱.۳. ساختار نواری نیم‌رسانای GaAs

ساختار نواری می‌تواند اطلاعاتی در مورد ماهیت بلور، فلز یا غیر فلز بودن، عدم یا وجود گاف انرژی، اندازه و نوع گاف انرژی، ارائه دهد. ساختار نواری انرژی الکترونی گالیوم آرسنید حاصل از محاسبات LDA، در امتداد نقاط تقارنی در شکل ۱، رسم شده است. باتوجه به شکل ۱، جدایی لبه بالای نوار ظرفیت و لبه پایین نوار رسانش در نقطه Γ در حدود 0.91 eV به دست آمده است که یک گاف مستقیم را نشان می‌دهد. این مقدار گاف انرژی برای نیم‌رسانای گالیوم آرسنید با تقریب LDA در مقایسه با دیگر نتایج نظری به مقدار تجربی نزدیک‌تر خواهد بود [۷]. هرچه تراکم نوارها بیشتر باشد خواص تراپردی، سرعت الکترون و جرم مؤثر آن بیشتر است.

آنها و همکارانش بر روی ویژگی‌های ساختاری گالیوم آرسنید مطالعه کردند و مقدار پارامتر شبکه و انرژی گاف نواری را برای گالیوم آرسنید به دست آوردند. همان طور که در جدول ۱ مشخص است نتایج به دست آمده در این پژوهش در مقایسه با دیگر نتایج نظری به مقادیر تجربی نزدیک‌تر است بنابراین تقریب LDA برای مطالعه روی گالیوم آرسنید مناسب‌تر از دیگر تقریب‌ها است.

۲.۳. بررسی ساختار نانوبلور $\text{Ga}_x\text{As}_{1-x}\text{H}_{10}$

به منظور مطالعه خواص ساختاری و الکترونی نانو بلور گالیوم آرسنید، ساختاری از GaAs در حالت بلوری با 10 \AA اتم را انتخاب کرده که شامل 6 \AA Ga و 4 \AA As است. در این ساختار اتم‌های Ga و As موجود روی سطح، بازوهای پیوندی آزاد دارند که برای بی اثر کردن آنها، تعداد 10 \AA هیدروژن به اتم‌های Ga و As اضافه شده است. اگر اتم‌های روی سطح، آزاد باشند با اتم‌های همسایه پیوند می‌دهند؛ در این حالت دیگر ساختار نانوبلور پایدار نخواهد بود، به همین دلیل بازوهای آزاد اتم‌های روی سطح با اتم هیدروژن پیوند داده می‌شوند تا حالت اشباع ایجاد شود. نانوبلور حاصل، به صورت $\text{Ga}_x\text{As}_{1-x}\text{H}_{10}$ می‌شود. برای مطالعه تأثیر آلاینده Si در نانو بلور گالیوم آرسنید،

نامتجانس دو قطبی (HBT^۱)، ترانزیستورهای اثر میدانی، دیودهای نوری (LED^۲) و لیزرها دارند. بهبود در عملکرد این دستگاه‌ها به شدت وابسته به خواص اساسی و ویژگی‌های ناخالصی آلاینده شده در نیم‌رساناهای مرکب است. درک درستی از فناوری آلاینش، کلیدی برای ساخت و پیشرفت بسیاری از دستگاه‌های اپتوالکترونیکی با سرعت بالاست. از آنجا که گالیوم آرسنید یک نمونه اولیه از نیم‌رساناهای مرکب گروه (III-V) است، مطالعه آلاینده گالیوم آرسنید ابزاری برای پیش‌بینی رفتار دیگر نیم‌رساناهای مرکب خواهد بود [۲ و ۳].

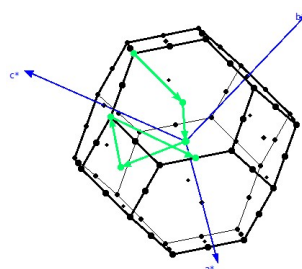
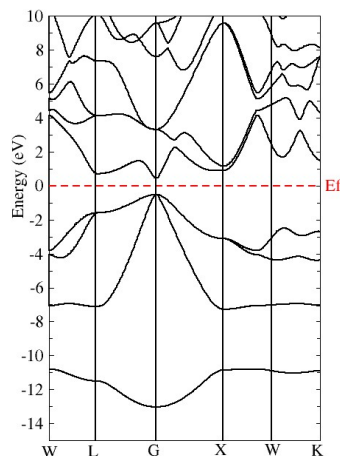
۲. روش محاسبات

هدف ما در این تحقیق، مطالعه خواص الکترونی و اپتیکی نانوبلورهای گالیوم آرسنید با 20 \AA و 78 \AA و همچنین بررسی اثر جایگزینی اتم ناخالصی Si بر خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی نانوبلورهای گالیوم آرسنید به روش نظریه تابعی چگالی (DFT) است. نظریه تابعی چگالی نظریه ای مهم و پایه‌ای برای بسیاری از دستگاه‌های بس ذره‌ای است که به همراه نگرش کان-شم منجر به توصیف تک ذره‌ای از دستگاه‌های بس ذره‌ای می‌شود و تأثیر بسزایی در ساده‌سازی محاسبات دارد [۴-۶]. بهینه‌سازی ساختارها در بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو و تقریب چگالی موضعی (LDA) برای تابعی انرژی تبادل-همبستگی (Exc) انجام شده است. نانوبلورها در مرکز ابر سلول مکعبی با حجم 3600 \AA^3 قرار داده می‌شوند تا با اعمال واهلش بر روی ساختارها، اندازه هر مؤلفه نیروی وارد بر هر اتم به کمتر از 0.01 eV/\AA و همچنین دقت در محاسبه انرژی کل ساختارها نیز به 10^{-4} eV افزایش یابد. همچنین برای اجرای محاسبات، توابع موج قطع با انرژی 40 eV ریدبرگ بر حسب امواج تخت بسط داده می‌شوند و آرایش‌های الکترونی $s^1 p^1, s^2 p^3, s^2 p^2$ و $s^2 p^2$ به ترتیب برای الکترون‌های ظرفیت اتم‌های Ga, As و Si در محاسبات به کار می‌روند.

۳. نتایج و محاسبات

۱. Heterojunction Bipolar Transistor

۲. Light Emitted Diode



منطقه اول بریلوئن

شکل ۱. ساختار نواری نیم‌رسانای GaAs.

جدول ۱. مقایسه مقدار پارامتر شبکه و انرژی گاف نواری محاسبه شده با نتایج تجربی و دیگر داده‌های نظری موجود [۸].

GaAs	نتایج تجربی	نتایج به دست آمده در این پژوهش	دیگر نتایج نظری
$E_g (eV)$ انرژی گاف نواری	۱٫۴۲	۰٫۹۱	GGA-PBE ۰٫۳۹۲ GGA-WC ۰٫۲۰۶ LDA ۰٫۰۹۹ LDA-MBJ ۱٫۶۱۳
a ثابت شبکه (Å)	۵٫۶۵۴	۵٫۶۳	GGA-PBE ۵٫۷۴۹ GGA-WC ۵٫۶۶۵ LDA ۵٫۶۰۷

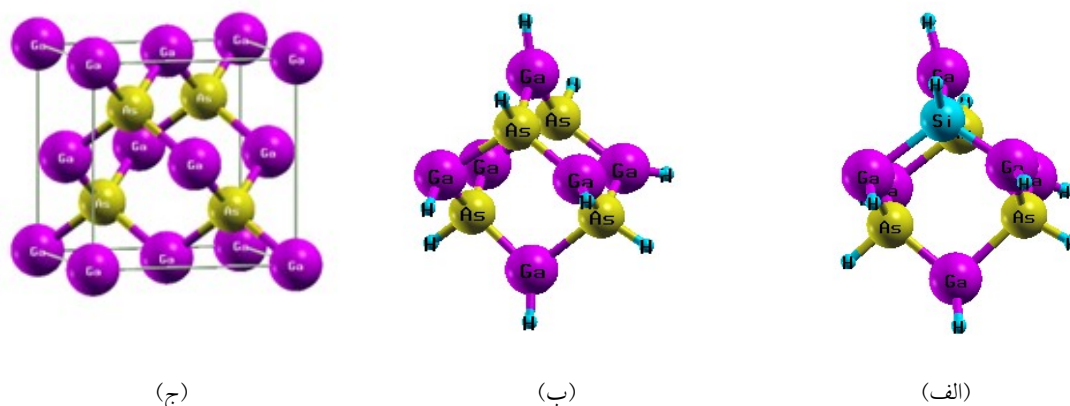
انرژی الکترون‌های نوار رسانش و ظرفیت است. از آنجا که تعداد حالت‌های الکترونی در یک نوار الکترونی (رسانش یا ظرفیت) بسیار زیاد است، برای بیان تعداد این حالت‌ها از مفهوم چگالی حالت‌ها استفاده می‌شود [۹]. در شکل ۳، ابتدا نمودار چگالی حالت‌های الکترونی یک اتم Ga و یک اتم As بررسی می‌شود. نوار ظرفیت اتم Ga به صورت $4s^2 4p^1$ است همان‌طور که در شکل ۳. الف، مشاهده می‌شود، اوربیتال Ga-s در پایین نوار ظرفیت سهم دارد. قسمت بالای نوار ظرفیت شامل سهم کمی از اوربیتال Ga-p است. کمینه نوار رسانش نیز مربوط به اوربیتال Ga-p است. قسمتی از اوربیتال Ga-p که در نوار ظرفیت واقع شده است پر و قسمتی که در نوار رسانش قرار دارد خالی از الکترون است. در شکل ۳. ب، نمودار چگالی

یک اتم Si را در ساختار $Ga_4As_4H_4$ جایگزین یک اتم As کرده تا نانو بلور $Ga_4As_3SiH_4$ حاصل شود. Si اتم گروه (IV) با عدد اتمی ۱۴ است که الکترون‌های ظرفیت آن به صورت $3s^2 3p^2$ است. با جایگزینی اتم Si در ترکیب $Ga_4As_3SiH_4$ به جای اتم As، اتم Si به‌عنوان دهنده عمل کرده و نانوبلور نیم‌رسانای گالیم آرسنید را به نیم‌رسانای نوع n تبدیل می‌کند. نانو بلور گالیم آرسنید غیر آلاینده و آلاینده با اتم ناخالصی Si در شکل ۲، نشان داده شده‌اند.

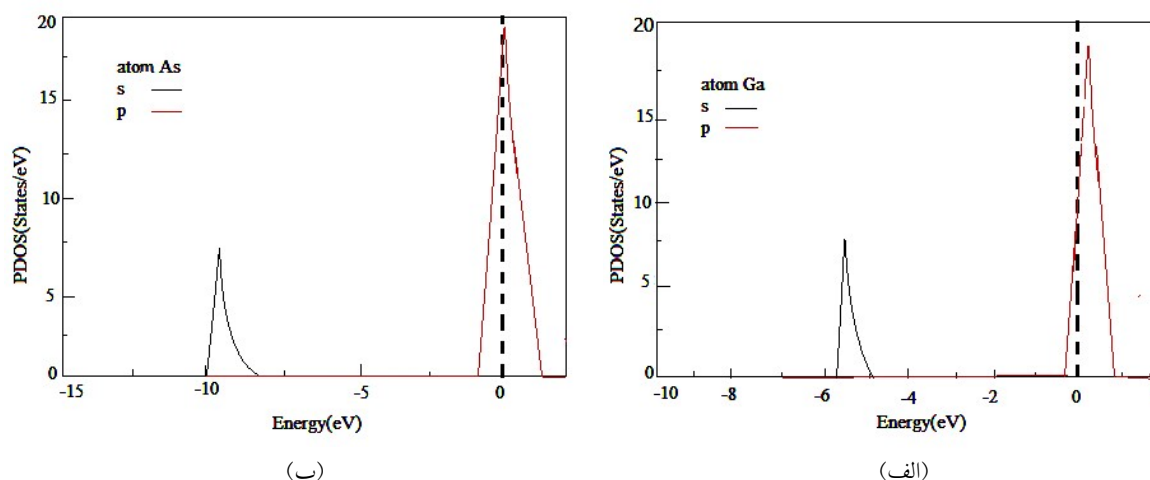
۳.۳. بررسی خواص الکترونی نانوبلور $Ga_4As_3SiH_4$

۱.۳.۳. چگالی حالت‌های الکترونی نانوبلور $Ga_4As_3SiH_4$

از عوامل اساسی در تعیین خواص الکترونی جامدات، توزیع



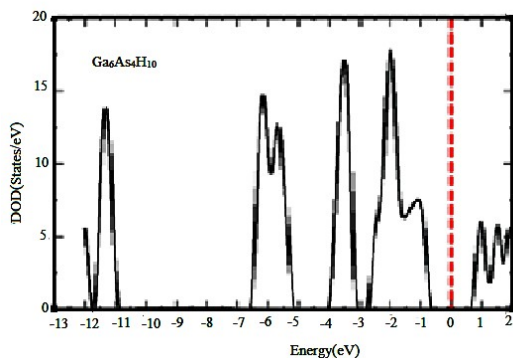
شکل ۲. (الف) سلول واحد GaAs در فاز مکعبی با ۱۸ اتم، (ب) نانوبلور $Ga_6As_7H_{10}$ و (ج) نانوبلور $Ga_6As_7SiH_{10}$.



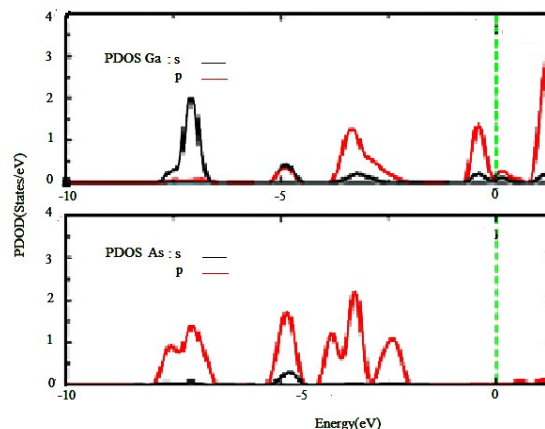
شکل ۳. چگالی حالت‌های جزئی (الف) اتم Ga و (ب) اتم As.

حالت‌های الکترونی برای تک اتم As نشان داده شده است. نوار ظرفیت اتم As به صورت $4s^2 4p^3$ است. همان طور که مشاهده می‌شود اوربیتال $As-s$ در پایین نوار ظرفیت سهم دارد. قسمت بالای نوار ظرفیت شامل اوربیتال $Ga-p$ است که سه الکترون موجود در اوربیتال p در این قسمت قرار گرفته‌اند. کمینه نوار رسانش نیز مربوط به اوربیتال $Ga-p$ است. قسمتی از اوربیتال $Ga-p$ که در نوار رسانش قرار دارد خالی از الکترون است. در شکل ۴، نمودارهای چگالی‌های حالت‌های کلی و جزئی اتم‌های Ga, As در نانوبلور $Ga_6As_7H_{10}$ رسم شده‌اند. DOS کلی نانوبلور $Ga_6As_7H_{10}$ قله پهن و وسیعی در گستره

-12 eV تا 2 eV را نشان می‌دهد. گاف انرژی نانوبلور $Ga_6As_7H_{10}$ مقدار $1/4$ eV به دست آمده است که در شکل ۴. ب، به خوبی مشخص است. همان طور که در شکل مشخص است اوربیتال‌های p اتم‌های Ga و As به سمت چپ (نوار ظرفیت) جابه‌جا شده‌اند. این موضوع نشان دهنده این است که در نانوبلور $Ga_6As_7H_{10}$ ، اوربیتال p اتم‌های Ga و As پر است. بیشترین سهم در نوار رسانش نیز مربوط به اوربیتال $Ga-p$ و سهم کمی از اوربیتال $As-p$ از 0 تا 2 الکترون ولت است. همان طور که در شکل مشخص است سهم مربوط به اتم گالیم در نوار رسانش چند برابر بیشتر از اتم آرسنید است.



(ب)



(الف)

شکل ۴. چگالی حالت‌های جزئی (الف) اتم‌های Ga و As در نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$ و (ب) چگالی حالت‌های کلی نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$.

به لبۀ نوار رسانش نزدیک شده است. طبق تعریف نیم‌رسانای غیر ذاتی نوع n که با اضافه شدن ناخالصی ترازى تحت عنوان تراز دهنده، نزدیک نوار رسانش ایجاد می‌شود در این مورد نیز با اضافه شدن اتم ناخالصی Si به نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$ چنین اتفاقی رخ می‌دهد. بنابراین، اتم ناخالصی Si نانوبلور گالیم آرسنید را به نیم‌رسانای نوع n تبدیل می‌کند. در این حالت گاف انرژی نسبت به حالت غیر آلاینده به 0.39 eV کاهش می‌یابد که به خوبی در شکل نمایان است.

۴.۳. بررسی ترازهای انرژی در طیف کوهن-شم

نتایج به دست آمده از حل معادلات کوهن-شم نشان می‌دهند که ترازهای انرژی اتمی مربوط به یک اتم تنها می‌تواند به تعداد زیادی ترازهای انرژی نزدیک به هم برای خوشه‌ها شکافته شوند. گاف انرژی بین بالاترین تراز اشغال شده (HOMO) و پایین‌ترین تراز اشغال نشده (LUMO) نقش مهمی در خواص فیزیکی و شیمیایی مواد دارد. به عبارت دیگر، گاف HOMO-LUMO معیاری برای واکنش‌پذیری و فعالیت شیمیایی خوشه‌ها یا نانوذرات محسوب می‌شود. با دور شدن ترازهای HOMO و LUMO از یکدیگر، تمایل به واکنش‌پذیری کاهش و با نزدیک شدن ترازها به هم افزایش می‌یابد [۱۰]. شکل ۸، طیف انرژی کوهن-شم برای ترازهای HOMO-۱، HOMO، E_f ، LUMO و LUMO+۱ در نانوبلورهای

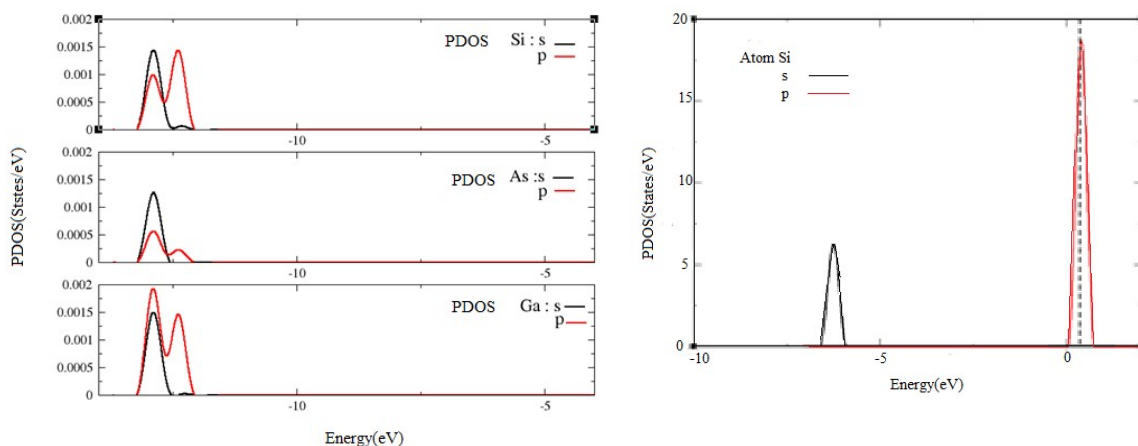
۲.۳.۳. چگالی حالت‌های الکترونی برای نانوبلور آلاینده با

اتم Si

ابتدا نمودار چگالی حالت‌های الکترونی یک اتم Si بررسی می‌شود، که در شکل ۵، نشان داده شده است. الکترون‌های ظرفیت اتم Si به صورت $4s^2 3p^2$ هستند. همان‌طور که در شکل ۵، مشاهده می‌شود، اوربیتال Si-s در پایین نوار ظرفیت سهم دارد که کاملاً پر است. قسمت بالای نوار ظرفیت شامل سهم کمی از اوربیتال Si-p است که دو الکترون در آن قرار دارد. کمینۀ نوار رسانش نیز شامل سهم بیشتری از اوربیتال Si-p است که خالی است.

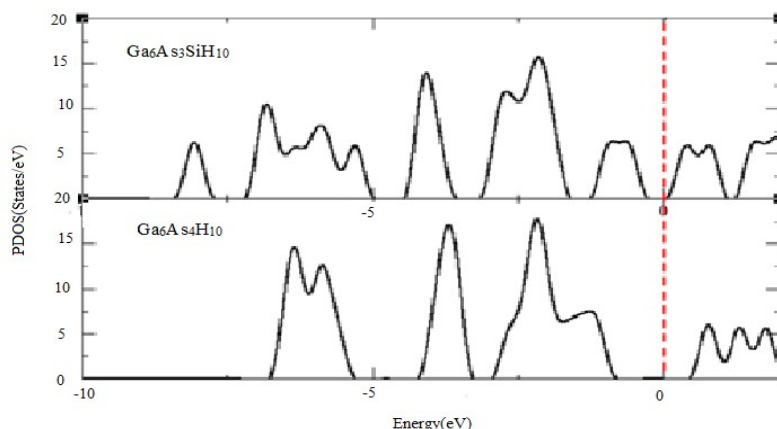
نمودار چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های Ga، Si و As در شکل ۶، نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود بیشترین سهم در نوار ظرفیت، مربوط به اوربیتال Si-s، Si-p و Ga-p است. نقش عمده در انتقال الکترون مربوط به اوربیتال Si-p خواهد بود. جابه‌جایی اوربیتال‌های p به سمت چپ (پایین نوار ظرفیت) نشان دهنده این است که این اوربیتال‌ها در نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_3\text{SiH}_{10}$ کاملاً پر هستند.

همان‌طور که در شکل ۷، مشاهده می‌شود تراز فرمی، برای نانو بلور غیر آلاینده تقریباً در وسط گاف انرژی است. اما در حالت آلاینده که اتم ناخالصی Si به ساختار اضافه شده است، الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش انتقال یافته و تراز فرمی



شکل ۵. چگالی حالت‌های جزئی مربوط به تک اتم Si.

شکل ۶. چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های Ga، As و Si در نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_3\text{SiH}_{10}$.



شکل ۷. چگالی حالت‌های کلی برای نانوبلورهای $\text{Ga}_6\text{As}_3\text{SiH}_{10}$ و $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$.

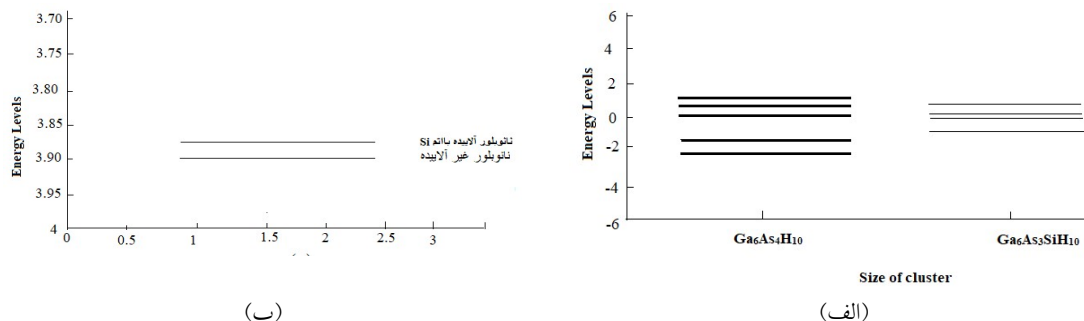
الکترون ولت کاهش می‌یابد. در نتیجه رسانایی نانوبلور افزایش می‌یابد. علاوه بر این مشاهده می‌شود که تراز انرژی فرمی به نوار رسانش نزدیک‌تر شده است (شکل ۸. ب) و این موضوع از ویژگی‌های بارز نیم‌رسانای نوع n خواهد بود. بنابراین، اتم ناخالصی Si نانوبلور گالیم آرسنید را به نیم‌رسانای نوع n تبدیل می‌کند.

۵.۳. چگالی بار الکترونی

۱.۵.۳. چگالی بار الکترونی نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$

چگالی ابر الکترونی که همان چگالی بار است، در واقع نحوه

$\text{Ga}_6\text{As}_3\text{SiH}_{10}$ و $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$ را نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود تراز انرژی فرمی به صفر منتقل شده است. تراز بالای انرژی فرمی (پایین‌ترین تراز اوربیتال خالی) نقش نوار رسانش در بلور را دارد و تراز پایین‌تر از انرژی فرمی، (بالترین تراز اوربیتال پر) HOMO نقش نوار ظرفیت را به خود اختصاص می‌دهد. فاصله دو تراز HOMO-LUMO از هم مقدار گاف انرژی را برای نانوبلور مشخص می‌کند که مقدار این گاف برای نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$ ، ۱/۴ eV است. زمانی که اتم ناخالصی Si در نانوبلور به جای یک اتم As جایگزین می‌شود، ترازهای HOMO-LUMO به هم نزدیک می‌شوند و مقدار گاف نوری از ۱/۴ به ۰/۳۹



شکل ۸. ترازهای انرژی برای نانوبلور $Ga_6As_4H_{10}$ در طیف کان-شم و (ب) چگونگی جابه‌جای تراز فرمی بعد از آلایندگی نانوبلور.

۶.۳. بررسی ساختار نانو بلور $Ga_{33}As_{16}H_{29}$

برای ساخت این ساختار ابتدا سلول واحد $GaAs$ را در جهت محور x ، y و z گسترش داده و سپس ۴۹ اتم از آن را به گونه‌ای انتخاب کردیم که نانوبلور انتخاب شده تقارن هندسی داشته باشد. برای بی اثر کردن پیوندهای آویزان^۱ آزاد اتم‌های Ga و As ، روی سطح به آنها اتم هیدروژن متصل شده‌است که در این صورت تعداد اتم‌ها در نانوبلور به ۷۸ اتم می‌رسد. بعد از واهلش دستگاه فوق، گاف انرژی و چگالی حالات الکترونی محاسبه شده‌اند. نانو بلور واهلش یافته $Ga_{33}As_{16}H_{29}$ در شکل ۱۱ نشان داده شده‌است.

۷.۳. بررسی خواص الکترونی نانو بلور $Ga_{33}As_{16}H_{29}$

۱.۷.۳. چگالی حالت‌های الکترونی

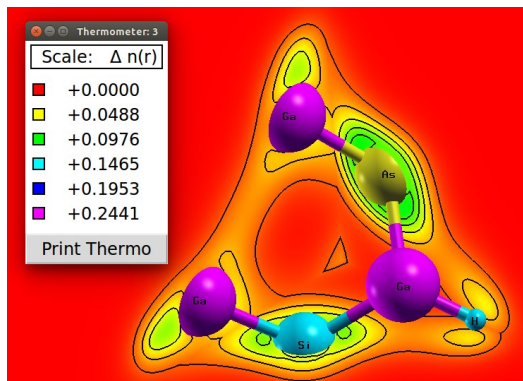
در شکل ۱۲ نمودارهای چگالی‌های حالت‌های کلی و جزئی اتم‌های Ga ، As در نانوبلور $Ga_{33}As_{16}H_{29}$ رسم شده‌اند. DOS کلی نانو بلور $Ga_{33}As_{16}H_{29}$ یک قله پهن و وسیعی در گستره 10 eV تا 2 eV را نشان می‌دهد. گاف انرژی نانوبلور $Ga_{33}As_{16}H_{29}$ مقدار 0.16 eV به دست آمده است که در شکل ۱۲. ب، به خوبی مشخص است. همان طور که در شکل مشخص است اوربیتال p اتم‌های Ga و As به سمت چپ (نوار ظرفیت) جابه‌جا شده‌اند. این موضوع نشان دهنده این است که در نانوبلور $Ga_{33}As_{16}H_{29}$ ، اوربیتال p اتم‌های Ga و As پر است. کمینه نوار رسانش متشکل از حالت‌های هیبریدی

توزیع بار در اطراف اتم را نشان می‌دهد. طبیعت پیوند در یک خوشه را می‌توان با تجزیه و تحلیل توزیع چگالی بار بر روی اتم‌های خوشه مورد بحث و بررسی قرار داد [۱۱]. نحوه توزیع بار الکترونی در ترکیب $Ga_6As_4H_{10}$ در شکل ۹ نشان داده شده است. همان طور، که در شکل مشخص است توزیع بار در اطراف اتم As بیشتر از اتم Ga است. پس، انتقال بار از اتم As به Ga صورت گرفته است. با توجه به کانتورهای آشکار شده در شکل و اختلاف الکترونگاتیوی دو اتم $(1/81)$ Ga و $(2/18)$ As می‌توان گفت که پیوند بین اتم‌های گالیم و آرسنید در نانوبلور خصلت کووالانسی- یونی دارد.

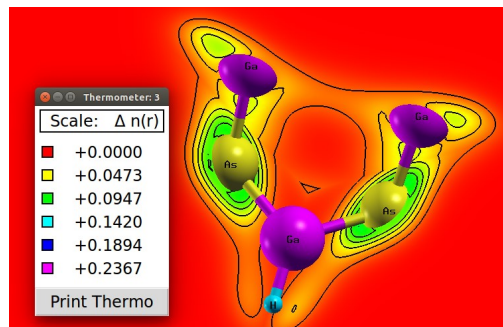
۲.۵.۳. چگالی بار الکترونی نانوبلور $Ga_6As_2SiH_{10}$

نحوه توزیع بار الکترونی در نانو بلور $Ga_6As_2SiH_{10}$ در شکل ۱۰، نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود کانتورهای چگالی بار، اتم‌های Ga و As را احاطه کرده‌اند که بیانگر رفتار کووالانسی بین آنهاست. از طرفی از مقایسه اختلاف الکترونگاتیوی دو اتم $(1/81)$ Ga و $(2/18)$ As (که برابر 0.37 eV است) با دو اتم $(1/90)$ Si و $(1/81)$ Ga (که برابر 0.09 eV است) می‌توان انتظار داشت که پیوندها کاملاً کووالانسی نبوده و مقداری خاصیت یونی دارد. رفتار یونی پیوند $Ga-As$ در مقایسه با $Ga-Si$ بیشتر است. این موضوع از نحوه توزیع چگالی بار حول اتم $Ga-As$ قابل مشاهده است. مقدار توزیع بار در اطراف اتم As بیشتر از Si و Si بیشتر از Ga خواهد بود. بنابراین بار از اتم Si به اتم Ga منتقل شده است.

۱. Dangling bonds

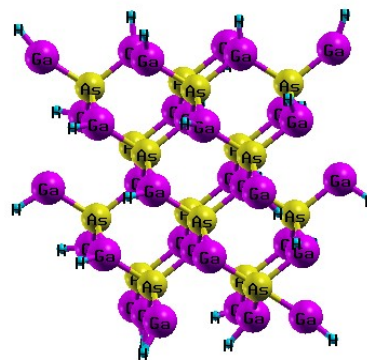


شکل ۱۰. چگالی بار الکترونی برای نانوبلور $\text{Ga}_{33}\text{As}_{16}\text{SiH}_{29}$.



شکل ۹. چگالی بار الکترونی اتم‌های Ga و As در نانوبلور.

می‌شود، دلیل این تغییر را می‌توان به این واقیعت نسبت داد که در نزدیکی سطح، اتم‌های اطراف اتم ناخالصی واهلش زیادی می‌یابند و از مکان‌های قبلی خود قبل از حضور ناخالصی جابه‌جا می‌شوند، در حالی که دور از سطح اتم‌های محیط اطراف ناخالصی در نانو بلور $\text{Ga}_{33}\text{As}_{16}\text{H}_{29}$ تقریباً ثابت و پایدار هستند. بنابراین، زمانی که اتم ناخالصی به سمت سطح حرکت می‌کند، انرژی فرمی کاهش می‌یابد و موقعیت‌های زیرسطح را پایدارتر می‌کند. نانو بلور واهلش یافته $\text{Ga}_{33}\text{SiAs}_{16}\text{H}_{29}$ در شکل ۱۳ نشان داده شده است.



شکل ۱۱. نانوبلور غیر آلاینده $\text{Ga}_{33}\text{As}_{16}\text{H}_{29}$.

۱.۸.۳. انرژی تشکیل ناخالصی (E_F)

انرژی تشکیل برای ناخالصی x به‌عنوان انرژی مورد نیاز اتم ناخالصی x با پتانسیل شیمیایی μ_x بعد از جایگذاری به جای یک اتم پایه تعیین می‌شود [۱۲]. در اینجا نانوبلور پایه $\text{Ga}_{33}\text{As}_{16}\text{H}_{29}$ است. ابتدا اتم ناخالصی Si جایگزین اتم As مرکزی و بار دیگر جایگزین اتم As روی سطح می‌شود. ساختاری که کمترین مقدار انرژی تشکیل ناخالصی را دارد پایدارتر است. بنابراین، لازم است که انرژی‌های تشکیل ناخالصی در دو حالت جایگزینی اتم Si به جای اتم As مرکزی و سطحی محاسبه شوند.

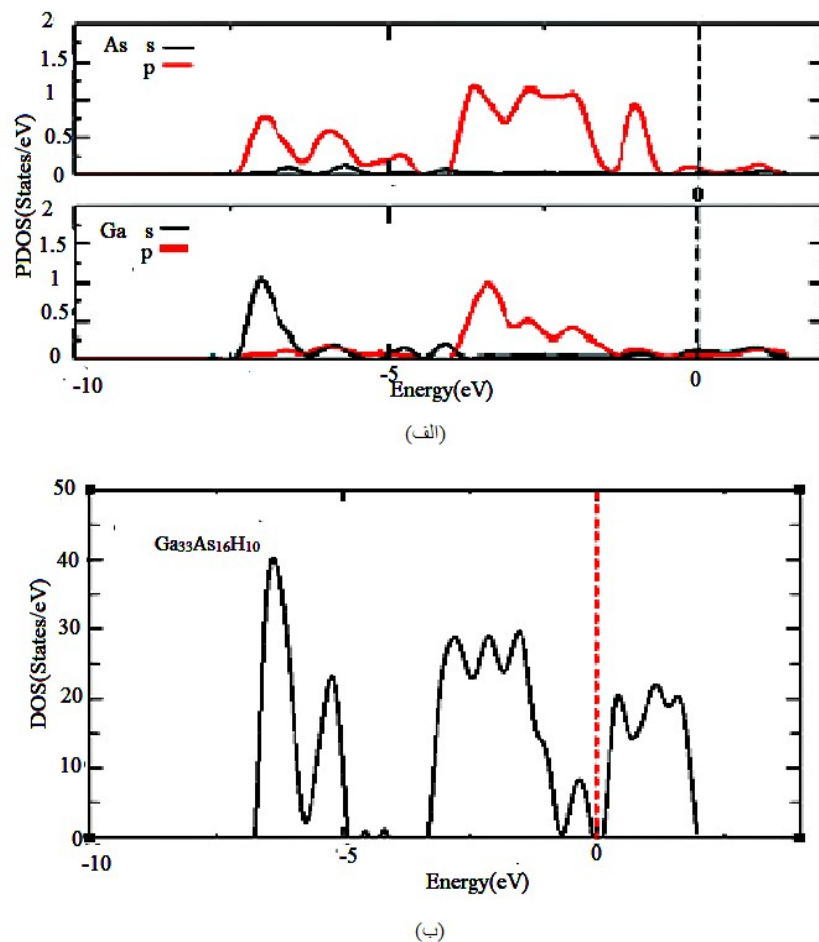
$$E_F = E(\text{Ga}_{33}\text{As}_{16}\text{SiH}_{29}) - E(\text{Ga}_{33}\text{As}_{16}\text{H}_{29}) + \mu_{\text{Ga}} + \mu_{\text{As}} + \mu_{\text{H}} - \mu_{\text{Si}}.$$
 می‌توان نتیجه گرفت که نانو بلورهای آلاینده زمانی که ناخالصی در نزدیک‌ترین مکان همسایه در نزدیکی سطح قرار

اوربیتال‌های s و p اتم‌های Ga و As، از 0° تا 2° الکترون ولت است.

۸.۳. بررسی اثر آلاینده Si روی نانوبلور $\text{Ga}_{33}\text{As}_{16}\text{H}_{29}$

اتم سیلیکون، اتم واقع در گروه (IV) جدول تناوبی، که آرایش الکترون‌های ظرفیت آن به‌صورت $3s^2 3p^2$ است و ۴ الکترون در لایه ظرفیت خود دارد، پس از تزریق در نانوبلور $\text{Ga}_{33}\text{As}_{16}\text{H}_{29}$ تمایل بیشتری به قرار گرفتن در مکان اتم As از خود نشان می‌دهد. برای نانوبلور $\text{Ga}_{33}\text{As}_{16}\text{H}_{29}$ ناخالصی از مرکز نانوبلور به سمت سطح، جابه‌جا شده است. تا وقتی که ناخالصی از سطح نانو بلور دور است، تغییر محسوسی در انرژی مشاهده نمی‌شود، اما زمانی که ناخالصی به نزدیکی سطح می‌رسد افت انرژی برای ترکیب در لایه زیرین سطح مشاهده

۱. Energy of impurity formation

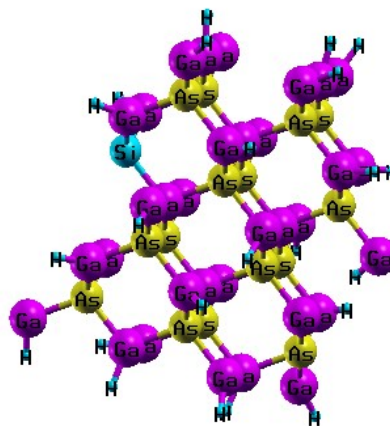


شکل ۱۲. چگالی حالت‌های الکترونی جزئی اتم‌های Ga و As در نانوبلور $\text{Ga}_{33}\text{As}_{16}\text{H}_{10}$ و (ب) چگالی حالت‌های الکترونی کلی برای نانوبلور $\text{Ga}_{33}\text{As}_{16}\text{H}_{10}$.

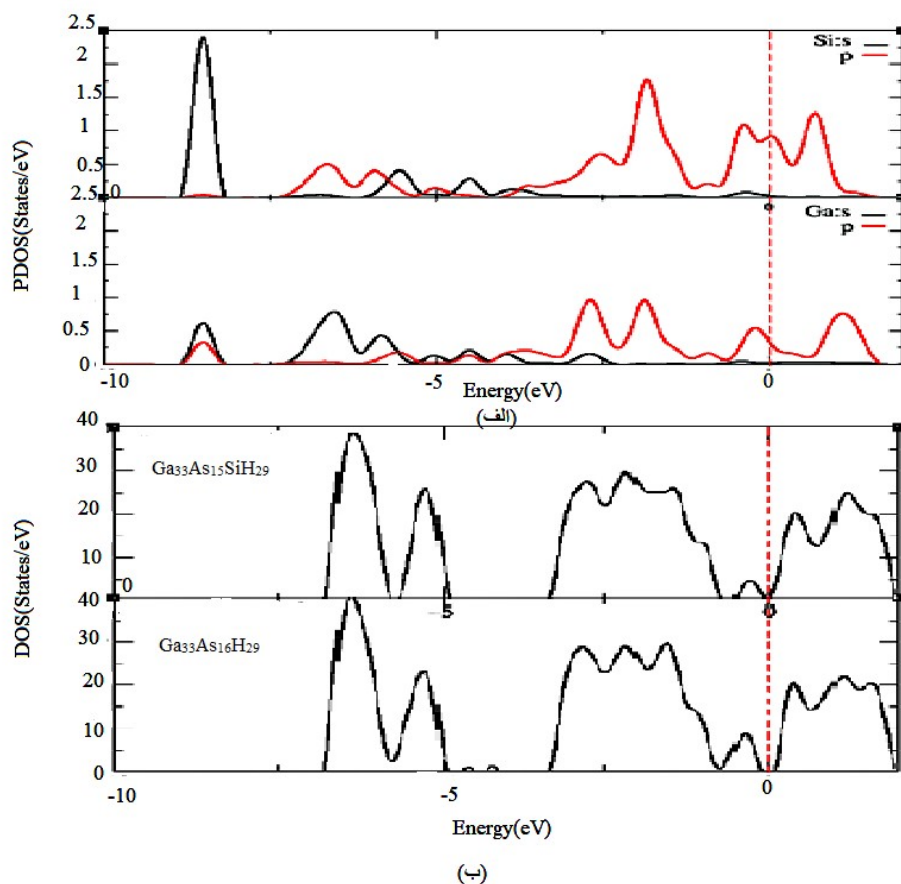
جدول ۲. انرژی تشکیل ناخالصی Si در نانوبلور $\text{Ga}_{33}\text{SiAs}_{15}\text{H}_{29}$.

نوع ساختار	انرژی تشکیل ناخالصی (Ry)
$\text{Ga}_{33}\text{Si}_{\text{cor}}\text{As}_{15}\text{H}_{29}$	۵/۱۲
$\text{Ga}_{33}\text{Si}_{\text{sur}}\text{As}_{15}\text{H}_{29}$	۳/۱۱

گرفته باشد، کمترین میزان انرژی تشکیل را خواهند داشت. با توجه به مقادیر به دست آمده در جدول ۲، نانوبلور آلایندۀ با اتم Si در حالت سطحی پایداری بیشتری نسبت به حالت دورنی دارد.



شکل ۱۳. نانوبلور آلایندۀ با اتم Si جایگزین شده به جای اتم As. سطحی.



شکل ۱۴. (الف) چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های Si و Ga و (ب) چگالی حالت‌های کلی نانوبلور $\text{Ga}_{33}\text{SiAs}_{15}\text{H}_{29}$.

شده است، الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش انتقال یافته و تراز فرمی به لبه نوار رسانش نزدیک شده است. بنابراین، اتم ناخالصی Si نانوبلور گالیم آرسنید را به نیم‌رسانای نوع n تبدیل می‌کند. در این حالت گاف انرژی به ۰/۹ الکترون ولت کاهش می‌یابد.

۱۰.۳. ویژگی‌های اپتیکی نانوبلور گالیم آرسنید

در سال‌های اخیر برای تولید نور و تقویت آن در نیم‌رساناها چندین راهکار مورد تحقیق واقع شده‌اند. یکی از نویدبخش‌ترین آنها ایده کاهش ابعاد نانوبلور، بر روی نانوبلور گالیم آرسنید است که در آن محدودیت کوانتومی، شکستن پیوند و تأثیر سطح، نقش مهمی دارد. LEDها با به کار بردن لایه‌های فعال نانوبلورهای گالیم آرسنید و تزریق جداگانه الکترون‌ها و حفره‌ها به دست می‌آیند [۱۳]. بررسی خواص

۳. اثر آلاینده Si جایگزین شده به جای اتم As سطحی در

نانوبلور $\text{Ga}_{33}\text{As}_{16}\text{H}_{29}$

۳.۹. چگالی حالت‌های الکترونی

نمودارهای چگالی‌های حالت‌های الکترونی جزئی اتم‌های Ga، Si در شکل ۱۴ نشان داده شده‌اند. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود، بیشترین سهم در پایین نوار ظرفیت مربوط به اوربیتال Si-s از ۹- تا ۷- الکترون ولت است و همچنین در بالای نوار ظرفیت از ۴- تا ۰ بیشترین سهم مربوط به اوربیتال‌های Si-p و Ga-p است. در نوار رسانش نیز اوربیتال‌های Ga-p و Si-p نقش دارند. همان‌طور که در شکل ۱۴ ب مشاهده می‌شود، در محدوده تراز فرمی چگالی کل حالت‌ها، برای نانوبلور غیر آلاینده، تراز فرمی در وسط گاف انرژی قرار گرفته است؛ اما در حالت آلاینده که اتم ناخالصی Si به ساختار اضافه

ایپتیک با مطالعه مدل‌های ساده شروع شده است. سپس، نقش جایگزینی اتم Si در نانوبلور گالیم آرسنید بررسی می‌شود.

۱.۱.۳. تقریب ذره مستقل (IPA)

یک فرض اساسی که معمولاً برای دستگاه‌های کوانتومی زیاد استفاده می‌شود تقریب تک ذره یا تقریب ذره مستقل است. که در آن اثرات برهم‌کنشی و همبستگی الکترون‌ها بسیار ناچیز فرض شده‌اند. IPA به عنوان پایه‌ای برای محاسبات نظری استفاده می‌شود [۱۴]. یکی از بهترین روش‌های پاسخ نوری یک بلور در سطوح محاسبه شده از ساختار نواری، استفاده از تقریب ذره مستقل است، جایی که اثر تغییر میدان مغناطیسی بر روی فاصله در شبکه بلوری نادیده گرفته می‌شود [۱۵]. در ادامه طیف جذب نانوبلور گالیم آرسنید با استفاده از تقریب تک ذره بررسی می‌شود.

۲.۱.۳. بررسی اثر ناخالصی Si روی طیف جذب خوشه Ga_6As_4

شکل ۱۵ نمودار شدت جذب بر حسب بسامد را برای خوشه‌های Ga_6As_4 و $\text{Ga}_6\text{As}_3\text{Si}$ نشان می‌دهد. همان طور که در شکل دیده می‌شود، برای خوشه‌های Ga_6As_4 و $\text{Ga}_6\text{As}_3\text{Si}$ یک طیف نوسانی وجود دارد که حداکثر مقدار آن برای Ga_6As_4 حدود ۱ eV است و ممکن است مربوط به انتقال از تراز اشغال شده HOMO به تراز اشغال نشده LUMO باشد. قله‌های دیگر ممکن است مربوط به انتقال از تراز HOMO به سطوح بالاتر از تراز LUMO و یا انتقال از سطوح پایین‌تر از HOMO به تراز LUMO باشد. وقتی اتم Si به جای یک اتم As جایگزین می‌شود، شدت جذب افزایش می‌یابد و قله جذب به سمت انرژی‌های بالاتر جابه‌جا می‌شود که انتقال به آبی^۲ را نشان می‌دهد.

۱.۱.۳. بررسی طیف جذب UV نانوبلورهای گالیم آرسنید

در این قسمت، ساختارهای نانوبلورهای گالیم آرسنید، با کمک

بسته نرم افزاری گوسین ۰۹ و روش هیبریدی B3LYP، بهینه شده‌اند و مقادیر انرژی‌های حالت‌های پایه و برانگیخته آنها محاسبه و سپس، طیف‌های جذب نانوبلورهای گالیم آرسنید با استفاده از نرم‌افزار گوس ۵ رسم شده‌اند. نرم‌افزار گوسین، به کمک روش‌های محاسباتی بر مبنای نظریه تابعی چگالی، ساختار طراحی شده را بهینه کرده و پایدارترین ساختار را ایجاد می‌کند [۱۵-۱۷].

در ادامه طیف‌های جذب نانوبلورهای $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$ و $\text{Ga}_6\text{ZnAs}_4\text{H}_{10}$ بررسی خواهند شد. شکل ۱۶ طیف جذب نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$ را نشان می‌دهد که در آن جذب توسط یک قله بزرگ مشخص شده است. این قله ناشی از ایجاد مستقیم اکسایتون (جفت، الکترون-حفره) است. این قله جذب برای نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$ در طول موج 3×10^{-6} m واقع شده است. این طول موج در محدوده طول موج‌های فروسرخ قرار می‌گیرد.

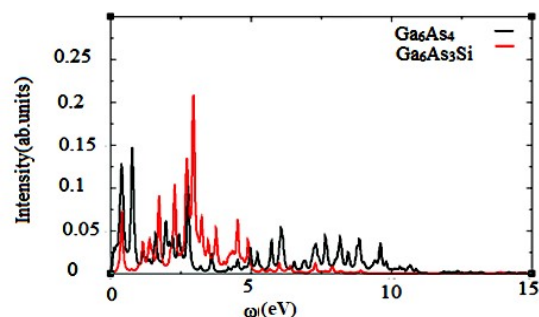
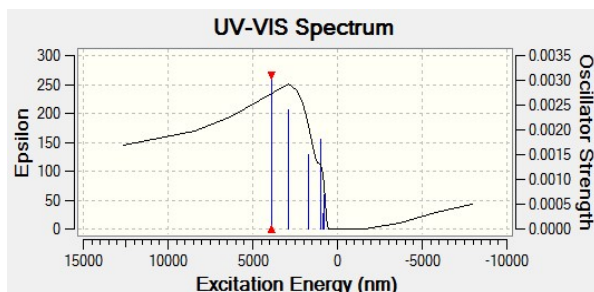
شکل ۱۷ طیف جذب نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_3\text{SiH}_{10}$ را نشان می‌دهد. قله جذب برای نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_3\text{SiH}_{10}$ که در آن یک اتم ناخالصی Si جایگزین یک اتم As شده است در طول موج $1/3 \times 10^{-6}$ m واقع شده است. این طول موج در محدوده طول موج‌های فرو سرخ است و نسبت به نانوبلور غیر آلاییده به سمت طول موج‌های کوتاه‌تر جابه‌جا شده است. در نتیجه حضور اتم ناخالصی Si در نانوبلور فوق منجر به گذار به آبی می‌شود که کاملاً با نتایج تقریب تک ذره مطابقت دارد.

۴. نتیجه‌گیری

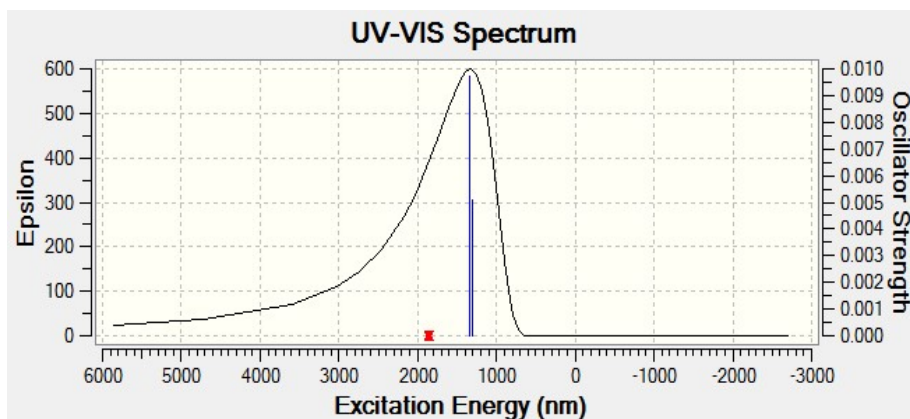
محاسبات در بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو و در چارچوب فرمول‌بندی تابعی چگالی به منظور بررسی اثر اتم ناخالصی Si روی خواص الکترونی و اپتیک نانوبلورهای گالیم آرسنید انجام شده‌اند. بررسی‌های انجام شده روی نانوبلورهای گالیم آرسنید نشان می‌دهند که هرچه اندازه نانوبلور بزرگ‌تر شود مقدار گاف نواری کاهش می‌یابد. با جایگزینی اتم ناخالصی Si به جای اتم As در نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$ گاف نواری نسبت به حالت غیر آلاییده کوچک‌تر می‌شود و تراز فرمی به لبه نوار

۱. Independent Particle Approximation

۲. Blue-shift



شکل ۱۵. نمودار شدت جذب بر حسب بسامد برای خوشه‌های $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$. شکل ۱۶. طیف جذب نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$.
 Ga_6As_4 و $\text{Ga}_6\text{As}_3\text{Si}$. (واحد بسامد با فرض ثابت پلانک برابر با یک، در نظر گرفته شده‌است).



شکل ۱۷. طیف جذب نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_3\text{SiH}_{10}$.

کمتری نسبت به حالتی دارد که ناخالصی در مرکز نانوبلور قرار گرفته باشد. بررسی طیف جذب نانوبلورهای گالیم آرسنید نشان می‌دهد که اضافه شدن اتم ناخالصی Si به نانوبلور $\text{Ga}_6\text{As}_4\text{H}_{10}$ سبب افزایش شدت جذب و جابه جایی طیف جذب به سمت طول موج‌های آبی می‌شود.

رسانش نزدیک می‌شود. در این حالت $\text{Ga}_6\text{As}_3\text{SiH}_{10}$ یک نیم‌رسانای نوع n خواهد بود. پربند چگالی بار الکتریکی در اطراف اتم‌ها نشان دهنده پیوند یونی-کووالانسی، بین اتم‌های Si و Ga است. برای نانوبلور $\text{Ga}_{33}\text{As}_{15}\text{SiH}_{29}$ نیز زمانی که اتم ناخالصی در نزدیک سطح قرار گرفته باشد مقدار انرژی تشکیل

مراجع

1. J Kohanoff, *School of Mathematics and Physics, Queens University Belfast* (2006) 351.
2. O. Auciello, J F Scott, R Ramesh, "Simulation of photonic bandgap", Northren optics conference proceedings (1998) 51.
3. N N, Anua, R Ahmed, M A Saeed, A Shaari and, B U Haq, " DFT investigations of structural and electronic properties of gallium arsenide (GaAs)", AIP Conference Proceedings **1482** (2012) 64.
4. R H Thomas, DAGSI, "Optical properties of Ge, GaAs, GaSb, InAs, and InP at elevated temperatures" Theses and Dissertations 2169 (2010) 47.
5. T Chavanapvanee, " Impurity doping effect in compound semiconductors", Waseda University Graduate School of Science (2007) 645.
6. J I Pankove, " Optical Processes in Semiconductors", New York, (1971) 456.
7. A D Becke, *phys. Rev. A* **38** (1998) 3098.

- Science, Minnesota Supercomputing Institute, University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota (1999) 54.
14. D L Hansen, O Hemmers, H Wang, D W Linde, P Focke, I A Sellin, C Heske, H S Chakraborty, P C Deshmukh and S T Manson, *The American Physical Society* (1999) 756.
15. J E Sipe, *The American Physical Society* (1993) 705.
16. D J Cioslowski, Gaussian 09, Revision A.02, Gaussian, Inc, Wallingford CT (2009).
17. R Habibpour, R Vaziri, " *Computational and theoretical study of electronic, spectroscopic and chemical properties of (ZnO)_n (n≤4) nanoclusters*" Technology (IROST), P.O. Box 33535111, Tehran, Iran (2015) 212.
8. A D Becke, *phys. Rev A* **38** (1998) 3098.
9. I D Yacouba, D T Sibiri, M Yuriy, K Bethuel, F Lashounda, and B Diola, "*Accurate Electronic, Transport, and Bulk Properties of Gallium Arsenide (GaAs)*" NSF (2010-2015) 34.
10. H A ShafieiGol and H A Najari, *JNS* **4** (2014) 325.
11. M I Ziane, Z Bensaad, B Labdelli, and H Bennacer, "*First-principles study of structural, electronic and optical properties of III-arsenide binary GaAs and InAs, and III-nitrides binary GaN and InN: Improved density-functional-theory Study*", Sensors & Transducers (2014) 374.
12. F Iori and S Ossicini, *Physica E* **41** (2009) 939.
13. V Igor, O Serdar and, R Ch, James, "*Ab initio absorption spectra of gallium arsenide clusters*", Department of Chemical Engineering and Material