

بررسی نظری خواص الکترونی بلور $Ga(IO_3)_3$

ساداتی، سیده زینب؛ باعدی، جواد

گروه فیزیک، دانشگاه تربیت معلم سبزوار

چکیده

در این مقاله ویژگی‌های الکترونی ترکیب $Ga(IO_3)_3$ از قبیل چگالی حالت‌ها، ساختار نواری، گاف نواری، نوع پیوندهای ترکیب، در فاز هگزاگونال بر اساس اصول اولیه محاسبه شده است. محاسبات به روش امواج تخت تقویت شده خطی در چارچوب نظریه تابعی چگالی با تقریب شیب تعمیم یافته انجام شده است. در پژوهش انجام شده، مقدار گاف الکترونی این ترکیب $3.5eV$ محاسبه شده است. الکترون‌های اربیتال P اتم‌های ترکیب نقش زیادی در چگالی حالت‌های زیر تراز فرمی و بالای آن دارند که این می‌تواند در فعالیت‌های الکترونی مفید باشد.

Theoretical Investigation on Electronic Properties of $Ga(IO_3)_3$ Crystal

Sadati, Seyede Zeinab ; Baedi, Javad

Physics Department, Sabzevar University of Tarbiat Moallem

Abstract

In this paper electronic properties of $Ga(IO_3)_3$ crystal such as density of state, band structure, band gap, kind of bounds, in the hexagonal phase by initial principle have been computed. The calculations were performed in the frame of density functional theory (DFT), using the full potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method with the generalized gradient approximation (GGA). In this study, the electronic gap have been calculated $3.5eV$ for this compound. P orbital electrons of atoms combined large role in the density of state below the Fermi level and are high that it can work electronic useful.

مقدمه

در هر سلول ترکیب $Ga(IO_3)_3$ سیزده اتم وجود دارد، شامل یک اتم گالیوم، سه اتم ید و نه اتم اکسیژن می‌باشد. این ترکیب دارای ساختار هگزاگونال می‌باشد. به دلیل وجود جفت الکترون تنها در گروه یدیت است که می‌تواند باعث عدم تقارن در ساختار این ترکیب شود. در نتیجه ترکیب دارای خواص صنعتی مهمی از قبیل خاصیت فروالکتریک، پیروالکتریک و پیزوالکتریک شده است و رفتار اپتیکی غیرخطی مرتبه دو از خود نشان می‌دهد و کاربردهای گسترده‌ای در صنعت از قبیل سیستم‌های آشکارساز متحرک، آشکارسازهای فروسرخ و مدولاتورهای الکترواپتیکی دارد [۱ و ۲].

روش محاسبات

محاسبات این مقاله با تقریب گرادیان تعمیم یافته با روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی در چارچوب نظریه تابعی چگالی [۳ و ۴] به صورت نظری صورت گرفته است [۵-۷]. انرژی جدایی بین الکترون‌های ظرفیت و مغزی برابر $10 Ryd$ - در نظر گرفته شده است. شعاع کره مافین تین به گونه‌ای انتخاب می‌شود که انبساط و انقباض ترکیب، منجر به روی هم افتادگی ابر الکترونی اتم‌های همسایه نگردد.