

مطالعه ثابتهای شبکه و ثابتهای اپتیکی بلور کادمیم تلورید با استفاده از نظریه تابعی چگالی

طیبه مولاروی

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود.

چکیده

خواص اپتیکی کادمیم تلورید نظیر تابع دی الکتریک اپتیکی خطی، ضریب شکست و ضریب خاموشی با استفاده از اصول اولیه محاسبه شده است. نتایج نشان می دهد که ضریب شکست و تابع دی الکتریک در جهت محورهای x و z متفاوت بوده و حول این محورها ناهمسانگرد می باشند. با توجه به توابع اپتیکی محاسبه شده، مشاهده می شود که بیشترین جذب اپتیکی در انرژی حدود 3.5 eV اتفاق می افتد که مربوط به انتقال بین نواری حالت های $Cd-4d$ است. نتایج بدست آمده در این پژوهش در توافق خوبی با داده های گزارش شده تجربی است.

Density Functional Theory Study of Lattice Constants and Optical Constants of CdTe Crystal

Movlaroooy, Tayebbeh

Department of Physics, Shahrood University of Technology, Shahrood.

Abstract

Optical properties of CdTe as dielectric function, refractive index and extinction coefficient has been calculated using first principles. The results revealed that the refractive index and dielectric function are anisotropic along x and z directions. The calculated optical spectra show that maximum optical adsorption occurs at 3.5 eV which is related to the $Cd-4d$ transitions. Our results are in good agreement with experimentally reported data.

مقدمه

گرفته است [۴-۶]. در سالهای اخیر، خواص اپتیکی بسیاری از نیمرساناها به کمک نظریه تابعی چگالی با روشهای مختلف از جمله تقریب چگالی موضعی (LDA) محاسبه شده است. تقریب چگالی موضعی فقط برای سیستم الکترونی همگن در حالت پایه معتبر است. در موادی که سیستم الکترونیکی آن ناهمگن است و بخصوص دارای حالت های جایگزیده اند از سایر روشها نظیر LDA+LO استفاده می شود. در مقاله حاضر، محاسبات با روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی (FP-LAPW) با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) با استفاده از کد Wien2k [۹-۷] انجام شده است. تانسور دی الکتریک و سایر ضرایب اپتیکی این ماده در فاز هگزاگونال با استفاده از ساختار نواری و انتقالات بین نواری تعیین شده است.

کادمیم تلورید (CdTe) که یک نیمرسانای شفاف در مقابل نور مرئی است به سبب خواص اپتیکی منحصر به فرد، در گستره دمایی بزرگ، کاربرد وسیعی در ساخت قطعات اپتوالکترونیک دارد. این ماده بهترین ماده نیمرسانا برای صفحات خورشیدی (فتوسل) به علت انطباق آن با طیف نور می باشد. از طرف دیگر نسبت به رطوبت مقاومت بالایی دارد و با قیمت مناسبی در دسترس است [۱-۳]. کادمیم تلورید در فاز زینک بلند مکعبی (گروه فضایی $F\bar{4}3m$) و یا فاز ورتسایت هگزاگونال (گروه فضایی $P\bar{6}3mc$) متبلور می شود. در شکل بلوری یک نیمرسانا با گاف نواری مستقیم حدود 1.56 eV است. مطالعات نظری و تجربی متعددی روی تابع دی الکتریک خطی نیمرساناها انجام