



9114803

دانشگاه شهید چمران اهواز

دانشکده علوم

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک

گرایش حالت جامد نظری

عنوان :

بررسی برخی ویژگی های فیزیکی گالیم بیسموت، با استفاده از نظریه تابعی چگالی

استاد راهنما:

دکتر حمداله صالحی

استاد مشاور:

دکتر پیمان امیری

نگارنده :

مسعود علوی

دی ماه 1393

تقدیم به

پدر و مادر مهربان

و

همسر عزیزم

حمد و سپاس پروردگار را که توانایی تحصیل علم به
من ارزانی داشت.

از خانواده عزیزم که با حمایت‌های بی‌دریغشان
همواره حامی من بودند و در راه تحصیلم از هیچ تلاشی
فروگذار نکردند، سپاسگزارم.

با تشکر از جناب آقای دکتر حمداله صالحی که
همواره از تجربیات ارزشمندشان استفاده کردم و
جناب آقای دکتر پیمان امیری که از راهنمایی‌های
بی‌دریغشان بهره‌مند شدم.

از دوستان همیشگی‌ام آقای محمد معدلی و خانم‌ها
زینب ایزدی، زهره چاودانی و شیوا معاوات کمال
تشکر و قدردانی را دارم.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول: آشنایی با ترکیب گالیم بیسموت.....	1
1-1 بررسی ویژگی‌های عناصر تشکیل دهنده ترکیب گالیم بیسموت.....	3
2-1 ساختار بلندروی	4
3-1 ساختار سنگ‌نمکی (RockSalt).....	5
4-1 ساختار سزیم کلرید (CsCl)	5
5-1 مطالعات انجام شده بر روی ترکیب گالیم بیسموت در شرایط معمولی	6
فصل دوم: نظریه تابعی چگالی و توصیف کد محاسباتی.....	12
1-2 سیستم‌های بس ذره‌ای	14
2-2 روش کوآنتومی	15
3-2 تقریب بورن - اپن هایمر	16
4-2 نظریه تابع موجی	18
1-4-2 تقریب هارتری - فوک	18
2-4-2 تقریب هارتری - فوک - اسلیتر	19
5-2 نظریه تابعی چگالی	20
1-5-2 مدل توماس - فرمی	22
2-5-2 قضیه‌های هوهنبرگ - کوهن	23
1-2-5-2 قضیه اول هوهنبرگ - کوهن	24
2-2-5-2 قضیه دوم هوهنبرگ - کوهن	24
3-5-2 رهیافت کوهن - شم	25
6-2 پتانسیل تبادلی - همبستگی	27
1-6-2 تقریب چگالی موضعی	28

30	تقریب شیب تعمیم یافته.....	2-6-2
31	روش حل معادلات کوهن - شم.....	7-2
33	روش امواج تخت (PW).....	1-7-2
33	روش امواج تخت متعامد (OPW).....	2-7-2
34	روش امواج تخت بهبود یافته (APW).....	3-7-2
35	روش شبه پتانسیل.....	4-7-2
37	شبه پتانسیل ابتدایه ساکن.....	1-4-7-2
38	کد محاسباتی.....	8-2
41	نمونه فایل های اجرایی در بسته محاسباتی کوآتوم اسپرسو.....	9-2
44	فصل سوم: محاسبه ویژگی های ساختاری، الکترونی و دینامیکی ...	
45	بخش اول: بررسی ویژگی های ترکیب گالیم بیسموت در فاز پایدار.....	1-3
45	روش انجام محاسبات.....	1-1-3
47	بهینه سازی پارامترهای محاسباتی.....	2-1-3
47	بهینه سازی مقدار انرژی قطع تابع موج.....	1-2-1-3
48	بهینه سازی تعداد نقاط k	2-2-1-3
50	بررسی ویژگی های ساختاری.....	3-1-3
50	تعیین پارامترهای شبکه.....	1-3-1-3
51	مدول حجمی و تراکم پذیری.....	2-3-1-3
52	بررسی ویژگی های الکترونی.....	4-1-3
52	ساختار نواری و چگالی حالت های الکترونی.....	1-4-1-3
59	چگالی ابر الکترونی.....	2-4-1-3
61	بررسی ویژگی های دینامیکی.....	5-1-3
65	بررسی ویژگی های گرمایی.....	6-1-3
67	انرژی آزاد نوسانی.....	1-6-1-3

68.....	آنترپی	2-6-1-3
69.....	میانگین مربع جابه‌جایی	3-6-1-3
71.....	ظرفیت گرمایی ویژه مربوط به ارتعاشات شبکه در حجم ثابت	4-6-1-3
73.....	بخش دوم: بررسی ویژگی‌های ترکیب گالیم بیسموت در فازهای تحت فشار	2-3
74.....	بهینه‌سازی پارامترهای محاسباتی	1-2-3
74.....	بررسی ویژگی‌های ساختاری	2-2-3
74.....	بهینه‌سازی پارامترهای شبکه	1-2-2-3
75.....	بررسی ترتیب پایداری	2-2-2-3
76.....	فشار گذار	3-2-2-3
77.....	مدول حجمی و تراکم‌پذیری	4-2-2-3
78.....	بررسی ویژگی‌های الکترونی	3-2-3
78.....	ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی	1-3-2-3
81.....	چگالی ابر الکترونی	2-3-2-3
83.....	بررسی ویژگی‌های دینامیکی	4-2-3
85.....	نتیجه‌گیری	
87.....	پیشنهادات	
88.....	انتشارات	
89.....	مراجع	

فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
شکل 1-1: ساختار فاز بلندروی.	4
شکل 2-1: ساختار فاز سنگ‌نمکی.	5
شکل 3-1: ساختار فاز سزیم کلرید.	6
شکل 4-1: ساختار نواری محاسبه شده برای ترکیب گالیم بیسموت در فاز بلندروی ...	7
شکل 5-1: ساختار نواری محاسبه شده برای ترکیب گالیم بیسموت در فاز بلندروی ...	9
شکل 6-1: نمودار پراکندگی فونونی و چگالی حالت‌های فونونی محاسبه شده ...	10
شکل 7-1: نمودار تغییرات بار مؤثر برون بر حسب فشار محاسبه شده ...	11
شکل 1-2: شمای کلی حل معادلات کوهن - شم.	28
شکل 1-3: ساختار بلوری ترکیب گالیم بیسموت در فاز بلندروی.	46
شکل 2-3: تغییرات انرژی نسبت به انرژی قطع تابع موج برای ترکیب گالیم بیسموت ...	48
شکل 3-3: تغییرات انرژی نسبت به مش‌بندی نقاط k برای ترکیب گالیم بیسموت ...	49
شکل 4-3: منطقه اول بریلوئن به‌همراه مسیرهای تقارنی در بلور مکعبی مرکز سطحی ...	53
شکل 5-3: (الف) ساختار نواری (ب) چگالی حالت‌های کلی برای ترکیب ...	54
شکل 6-3: (الف) ساختار نواری، (ب) چگالی حالت‌های کلی برای ...	55
شکل 7-3: (الف) ساختار نواری، (ب) چگالی حالت‌های کلی برای ...	55
شکل 8-3: چگالی حالت‌های کلی برای ترکیب گالیم بیسموت ...	56
شکل 9-3: نمودار چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اربیتال‌های ...	57
شکل 10-3: نمودار چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اربیتال‌های ...	58
شکل 11-3: سهم اربیتال‌های متفاوت در ایجاد نوارهای انرژی ...	59
شکل 12-3: چگالی ابر الکترونی برای ترکیب گالیم بیسموت ...	60
شکل 13-3: چگالی ابر الکترونی برای ترکیب گالیم بیسموت ...	60
شکل 14-3: چگالی ابر الکترونی برای ترکیب گالیم بیسموت ...	60
شکل 15-3: ساختار فونونی همراه با چگالی حالت‌های آن برای ...	63

- شکل 3-16: ساختار فونونی همراه با چگالی حالت‌های آن برای ... 64.....
- شکل 3-17: تغییرات انرژی آزاد نوسانی بر حسب دما برای ترکیب گالیم بیسموت ... 68.....
- شکل 3-18: تغییرات آنتروپی بر حسب دما برای ترکیب گالیم بیسموت در ساختار بلندروی. 69.....
- شکل 3-19: میانگین مربع جابه‌جایی نسبت به حالت تعادل برای اتم‌های ... 70.....
- شکل 3-20: میانگین مربع جابه‌جایی نسبت به حالت تعادل برای اتم‌های ... 70.....
- شکل 3-21: میانگین مربع جابه‌جایی نسبت به حالت تعادل برای اتم‌های ... 71.....
- شکل 3-22: نمودار تغییرات ظرفیت گرمایی ویژه مربوط به ارتعاشات ... 72.....
- شکل 3-23: ساختار بلوری ترکیب گالیم بیسموت در فاز (الف) سزیم کلرید، (ب) سنگ‌نمکی. 75.....
- شکل 3-24: نمودار انرژی به ازای هر جفت ذره بر حسب حجم ... 76.....
- شکل 3-25: نمودار آنتالپی بر حسب فشار فازهای ترکیب گالیم بیسموت ... 77.....
- شکل 3-26: منطقه اول بریلوئن و مسیر تقارنی ساختار (الف) سزیم کلرید، (ب) سنگ‌نمکی. 78.....
- شکل 3-27: (الف) ساختار نواری، (ب) چگالی حالت‌های کلی ... 79.....
- شکل 3-28: (الف) ساختار نواری، (ب) چگالی حالت‌های کلی ... 79.....
- شکل 3-29: نمودار چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اربیتال‌های ... 80.....
- شکل 3-30: نمودار چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اربیتال‌های ... 81.....
- شکل 3-31: چگالی ابر الکترونی در فاز سزیم کلرید با تقریب ... 82.....
- شکل 3-32: چگالی ابر الکترونی در فاز سنگ‌نمکی با تقریب ... 83.....
- شکل 3-33: نمودار پراکندگی فونونی در فاز سنگ‌نمکی با تقریب ... 84.....
- شکل 3-34: نمودار پراکندگی فونونی در فاز سزیم کلرید با تقریب ... 84.....

فهرست جدول‌ها

عنوان	صفحه
جدول 1-1: ساختار الکترونی عناصر تشکیل دهنده ترکیب گالیم بیسموت.....	4
جدول 2-1: پارامترهای ساختاری محاسبه شده برای ترکیب گالیم بیسموت در فاز بلندروی.....	8
جدول 3-1: فرکانس‌های فونونی برای نقاط با تقارن بالا برای ترکیب گالیم بیسموت در فاز بلندروی.....	10
جدول 3-1: مقدار انرژی قطع بهینه برای فاز بلندروی ترکیب گالیم بیسموت (بر حسب ریدبرگ).....	48
جدول 3-2: مقادیر بهینه برای نقاط k برای فاز بلندروی ترکیب گالیم بیسموت.....	49
جدول 3-3: پارامترهای ساختاری برای ترکیب گالیم بیسموت در فاز پایدار بلندروی.....	51
جدول 3-4: نتایج محاسبات مدول حجمی، مشتق آن و تراکم‌پذیری ترکیب گالیم بیسموت ...	52
جدول 3-5: گاف نواری محاسبه شده برای ترکیب گالیم بیسموت در فاز پایدار بلندروی ...	56
جدول 3-6: گاف فرکانسی محاسبه شده برای ترکیب گالیم بیسموت در فاز پایدار بلندروی ...	64
جدول 3-7: فرکانس‌های فونونی برای نقاط با تقارن بالا برای ترکیب گالیم بیسموت ...	65
جدول 3-8: مقادیر میانگین مربع جابه‌جایی در دمای 300 کلوین نسبت به حالت تعادل ...	71
جدول 3-9: مقدار انرژی قطع بهینه برای فازهای تحت فشار ترکیب گالیم بیسموت ...	74
جدول 3-10: مقادیر بهینه برای نقاط k برای فازهای تحت فشار ترکیب گالیم بیسموت ...	74
جدول 3-11: پارامترهای ساختاری برای ترکیب گالیم بیسموت در سایر فازها ...	75
جدول 3-12: نتایج محاسبات مدول حجمی، مشتق آن و تراکم‌پذیری ...	78

چکیده

نام خانوادگی: علوی	نام: مسعود	شماره دانشجویی: 9114803
عنوان پایان نامه: بررسی برخی ویژگی های فیزیکی گالیم بیسموت با استفاده از نظریه تابعی چگالی		
استاد راهنما: دکتر حمداله صالحی		
استاد مشاور: دکتر پیمان امیری		
درجه تحصیلی: کارشناسی ارشد	رشته: فیزیک	گرایش: جامد نظری
دانشگاه: شهید چمران اهواز	دانشکده: علوم	گروه: فیزیک
تاریخ فارغ التحصیلی: تعداد صفحه: 93		
کلید واژه ها: گالیم بیسموت، نظریه تابعی چگالی، ساختار نواری، مدهای فونونی، ظرفیت گرمایی، محاسبات نسبیتی		
<p>در این تحقیق ویژگی های ساختاری، الکترونی و دینامیکی ترکیب گالیم بیسموت در فاز پایدار بلندروی و دو فاز احتمالی بررسی شده است. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل، در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام شده است. شبه پتانسیل های مورد استفاده با شرایط بارپایسته و فوق نرم ساخته شده اند و تابعی تبدلی - همبستگی آنها از نوع LDA و GGA می باشد. محاسبات نسبیتی کامل ساختار نواری بیانگر این است که این ترکیب در فاز بلندروی شبه فلز است و دارای گاف جزئی با مقداری منفی است و در دو ساختار سنگ نمکی و سزیم کلرید فلز می باشد. نتایج حاصل از تراکم پذیری نشان می دهد که تراکم پذیری ساختار بلندروی از فاز سنگ نمکی بیشتر و از فاز سزیم کلرید کمتر است. نمودار پراکندگی فونونی مشخص می کند که فازهای سنگ نمکی و سزیم کلرید، فازهای ناپایداری برای این ترکیب می باشند. ویژگی های ترمودینامیکی محاسبه شده برای فاز بلندروی با قوانین تجربی مطابقت خوبی دارند.</p>		

پیشگفتار

ترکیبات GaZ ($Z = As, Sb, \dots$)، ترکیباتی دوتایی از عنصر گالیم (گروه III) و عنصری از گروه V هستند، که دارای خاصیت نیم‌رسانایی در ساختار بلندروی می‌باشند؛ نیم‌رساناها کاربردهای بسیاری در صنعت، از جمله در دیودهای نوری، دیودهای لیزری جهت انتقال داده‌ها، خواندن و نوشتن دی‌وی‌دی‌ها و سلول‌های خورشیدی با قابلیت عملکرد بالا دارند. اما ترکیبات III - Bi به میزان قابل توجه‌ای نسبت به سایر نیم‌رساناهای III - V متفاوت می‌باشند و خاصیت شبه‌فلزی به خود می‌گیرند.

طی نیم قرن گذشته، بر روی ترکیبات نیم‌رسانای III - V، مطالعات نظری و تجربی گسترده‌ای صورت گرفته است. اکثر این مطالعات بر روی موادی که شامل تنها چهار ردیف از عناصر یعنی $Sb, As, P, N, In, Ga, Al, B$ می‌باشند، صورت گرفته‌اند. ترکیب بیسموت با ترکیبات III - V، ماده جالب و جدیدی را که شامل ترکیبات نیم‌رسانا و شبه‌فلز هستند، حاصل می‌کند. بنابراین آلیاژهای (V - Bi) - III، دارای پتانسیل قوی جهت استفاده در لیزرهای دیودی و آشکارسازهای نوری فعال در ناحیه فروسرخ و نزدیک به فروسرخ و سلول‌های خورشیدی پیوند چهارگانه¹ می‌باشند.

به دلیل اهمیت کاربردی ترکیب گالیم بیسموت²، در این پایان‌نامه به بررسی ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، فونونی و ترمودینامیکی این ترکیب در فاز پایدار پرداخته شده است. مطالب ارائه شده در این پایان‌نامه به شرح زیر می‌باشند:

فصل اول، به معرفی ساختارهای احتمالی ترکیب مورد نظر و برخی از کارهای تجربی و نظری انجام شده بر روی این ترکیب اختصاص یافته است.

در فصل دوم، به مطالعه سیستم‌های بس‌ذره‌ای و نظریه تک‌الکترونی، تقریب‌های لازم برای تبدیل معادله شرودینگرگونه بس‌ذره‌ای به معادلات تک‌ذره‌ای و همچنین نظریه تابعی چگالی

¹ The quadruple junction solar cell

² Gallium-Bismuth (GaBi)

پرداخته شده است.

فصل سوم، به دو بخش تقسیم شده است، اولین بخش به بررسی و مطالعه ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، فونونی و ترمودینامیکی این ترکیب در فاز پایدار می‌پردازد و در دومین بخش نیز، ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و فونونی این ترکیب در دو فاز مکعبی احتمالی آن مورد بررسی و مطالعه قرار می‌گیرند.

در انتها نیز نتیجه‌گیری، پیشنهاداتی جهت ادامه کار، انتشارات و مراجع آورده شده‌اند.

فصل اول

آشنایی با ترکیب گالیم بیسموت

مقدمه

ترکیب گالیم بیسموت متعلق به گروه III - V می باشد. اکثر ترکیبات این گروه نیم رسانا بوده و کاربردهای بسیاری در صنعت دارند. اما ترکیب گالیم بیسموت، به علت وجود اربیتال 6s اتم بیسموت و با بررسی نسبیتی آن، دارای ویژگی هایی است که به میزان قابل توجهی نسبت به سایر نیم رساناهای III - V متفاوت می باشند، به گونه ای که ساختار نواری معکوسی برای این ترکیب یافته شده که می تواند نشان دهنده یکی از ویژگی های شبه فلزی این ترکیب باشد [1].

با تجزیه و تحلیل ماهیت پیوندهای شیمیایی از نظر انتقال چگالی بار ظرفیت، سه ماهیت متفاوت از پیوندها نشان داده می شود. محاسبات چگالی بار ظرفیت نشان می دهد که ترکیبات III - Bi به جز BBi شبیه سایر ترکیبات III - V با انتقال بار کوچکی به سمت اتم بیسموت که نقش آنیون را ایفا می کند، رفتار می کنند [1].

در میان نیم رساناهای III - V، ترکیبات شامل Bi از جمله InBi, GaBi, AlBi, BBi به خوبی سایر ترکیب ها و آلیاژها، مهندسين و دانشمندان علاقمند بسیاری را در سال های اخیر به خود جذب نموده است. با توجه به مطالعات انجام شده انتظار می رود، که اکثر ترکیبات III - Bi بایستی گاف نواری کوچک یا حتی منفی داشته باشند. بنابراین اضافه نمودن بیسموت به نیم رساناهای III - V ماده جالب و جدیدی را که شامل ترکیبات نیم رسانا و شبه فلز هستند، حاصل می کند؛ و از این حیث از اهمیت زیادی در ویژگی های الکترونی و اپتیکی بسیاری از ابزارها از جمله لیزرها، سلول های خورشیدی، ترانزیستورها و وسایل بر پایه اسپین ترونیک دارا می باشد [2].

با توجه به بررسی های انجام شده توسط فرهات¹ و همکارش در سال 2006 [1]، مادوری² و همکارانش در سال 2008 [3] و تأکید سایرین، این ترکیب در فشار معمولی در فاز مکعبی مرکز سطحی با پایه دو اتمی (بلندروی) متبلور می شود؛ همچنین از مقایسه با ترکیب های

¹ M. Ferhat

² D. Madouri

هم گروه، می توان چنین انتظار داشت که این ترکیب را می توان در فشارهای متفاوت در فازهای ورتسایت¹، سنگ نمکی²، سزیم کلرید³ و ارتورومبیک (با گروه فضایی CmCm) یافت [1].

با توجه به این که فازهای فشار بالای این ترکیب تاکنون بررسی نشده اند و همچنین از نظر تجربی ترتیب پایداری یا ترتیب گذار فازی برای این ترکیب مشخص نشده است؛ لذا با در نظر گرفتن این موضوع که اولین فاز تحت فشار ترکیب گالیم آنتیموان (که نزدیک ترین ترکیب III-V به ترکیب گالیم بیسموت می باشد) سنگ نمکی است، در این پایان نامه سه ساختار مکعبی بلندروی، سنگ نمکی و سزیم کلرید مورد بررسی قرار می گیرند.

قبل از بررسی فازهای مورد نظر، ابتدا ویژگی های عناصر تشکیل دهنده ترکیب گالیم بیسموت آورده می شود.

1-1 بررسی ویژگی های عناصر تشکیل دهنده ترکیب گالیم بیسموت

گالیم، عنصری فلزی است که در دمای 298 کلوین جامد است، اما در دمایی حدود دمای اتاق همانند سزیم و جیوه مایع می باشد. جرم اتمی آن 69,723 gr/mol و با عدد اتمی 31 در گروه III در جدول تناوبی قرار می گیرد؛ نقطه جوش این عنصر 2477 کلوین است. ساختار الکترونی این عنصر در جدول (1-1) آورده شده است.

بیسموت، جامدی فلزی است که جرم اتمی آن 208,980 gr/mol و در گروه V با عدد اتمی 83 قرار می گیرد. نقطه ذوب آن 544 کلوین و نقطه جوش آن 1837 کلوین می باشد. ساختار الکترونی این عنصر نیز در جدول (1-1) آورده شده است.

¹ Wurtzite (W)

² Rocksalt (NaCl)

³ CsCl

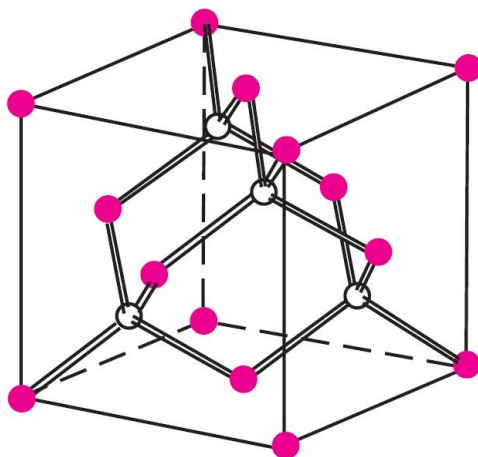
جدول 1-1: ساختار الکترونی عناصر تشکیل دهنده ترکیب گالیم بیسموت.

اتم	ساختار الکترونی
گالیم	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$
بیسموت	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2 6p^3$

در ادامه به معرفی سه ساختار مورد نظر پرداخته می شود.

2-1 ساختار بلندروی

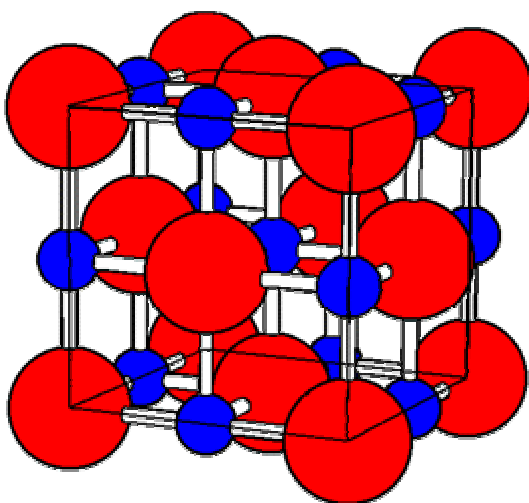
ترکیب گالیم بیسموت در حالت پایدار (فشار معمولی) دارای ساختار بلندروی می باشد. گروه فضایی این ساختار $F\bar{4}3m$ و ثابت شبکه تجربی آن برابر با $6/33$ آنگستروم می باشد [4]. این ساختار از دو ساختار fcc تشکیل شده است، که نسبت به یکدیگر به اندازه یک چهارم قطر اصلی جابه جا شده اند؛ به این صورت که با قرار دادن اتم های گالیم روی یک شبکه fcc و اتم های بیسموت بر روی شبکه fcc دیگر این ساختار شکل می گیرد. در این ساختار در هر نقطه پایه دو اتم وجود دارد که مختصات مربوط به هر یک از آنها به صورت $(0,0,0)$ و $(1/4,1/4,1/4)$ است. ساختار بلوری این فاز در شکل (1-1) نشان داده شده است [5].



شکل 1-1: ساختار فاز بلندروی [5].

3-1 ساختار سنگ نمکی (RockSalt)

شبکه براوه این ساختار به صورت شبکه مکعبی مرکز سطحی است. در این ساختار پایه شامل یک اتم گالیم و یک اتم بیسموت می باشد که به اندازه نصف قطر اصلی یاخته یکه از یکدیگر فاصله دارند، به طوری که اتم گالیم در $(0,0,0)$ و یک اتم بیسموت در $(1/2,1/2,1/2)$ قرار دارد (شکل (2-1)) [6].



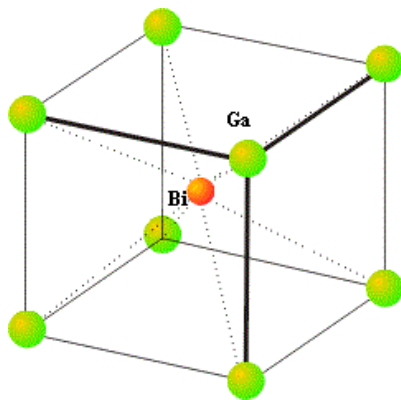
شکل 2-1: ساختار فاز سنگ نمکی [6].

در این بلور هر اتم توسط شش اتم همسایه اول احاطه می شود. بنابر اطلاعات موجود تاکنون هیچ کار نظری و تجربی بر روی این فاز ساختاری انجام نشده است.

4-1 ساختار سزیم کلرید (CsCl)

گروه فضایی این ساختار $Fm3m$ است. این ساختار از تعداد مساوی اتم های گالیم و بیسموت تشکیل شده است، که روی نقاط یک شبکه مکعبی مرکز حجمی قرار دارند، به طوری که نزدیک ترین همسایگان هر یون هشت یون غیر همנוعش هستند. تقارن انتقالی این ساختار، همانند یک شبکه براوه مکعبی ساده است و به همین دلیل، به صورت یک شبکه مکعبی ساده که پایه اش متشکل از یک اتم گالیم در مبدأ $(0,0,0)$ و یک اتم بیسموت در مرکز مکعب، یعنی در $(1/2,1/2,1/2)$ می باشد، توصیف می شود. شکل (3-1) نمایی از ساختار فاز سزیم کلرید را

نشان می‌دهد [7]. بر روی این فاز نیز تاکنون هیچ کار نظری و تجربی انجام نشده است.



شکل 1-3: ساختار فاز سزیم کلرید [7].

5-1 مطالعات انجام شده بر روی ترکیب گالیم بیسموت در شرایط معمولی

در محاسبات نظری که در فصل سوم به آن پرداخته می‌شود، برخی ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، فونونی و ترمودینامیکی ترکیب گالیم بیسموت محاسبه می‌شوند، قبل از آن لازم است که روش ساخت ترکیب‌های شامل بیسموت و سپس کارهای انجام شده بر روی ترکیب گالیم بیسموت آورده شود.

طی نیم قرن گذشته، بر روی ترکیبات نیم‌رسانای III - V، مطالعات نظری و تجربی گسترده‌ای صورت گرفته است. اکثر این مطالعات بر روی موادی که شامل تنها چهار ردیف از عناصر یعنی B, Al, Ga, In, N, P, As, Sb می‌باشند، صورت گرفته‌اند. اما با بهبود تکامل فن‌آوری رشد برآراستی¹، راه برای مطالعه مواد III - V نظیر III - Bi که تا سال‌های اخیر بی‌توجه مانده بودند، هموار شد [1]. در ادامه به کارهای انجام شده بر روی ترکیب مورد نظر پرداخته می‌شود.

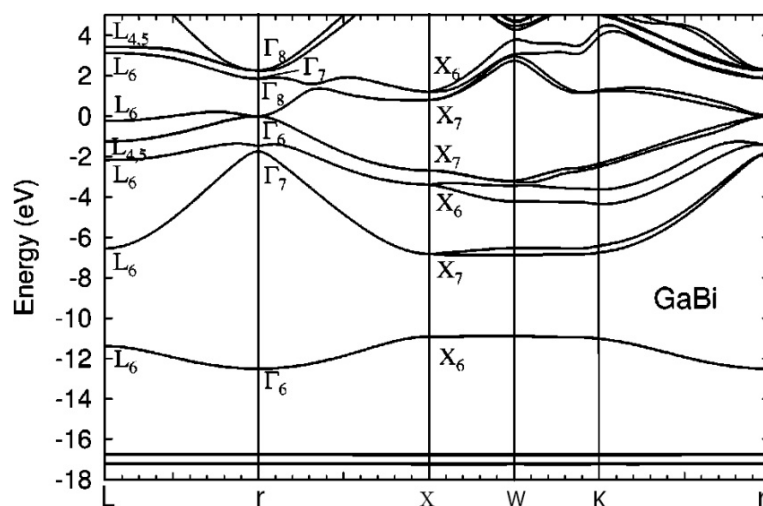
با توجه به اطلاعات موجود می‌توان شروع مطالعات بر روی ترکیب GaBi را از سال 2001 به‌واسطه کار تجربی ورما² و همکارانش بر روی آلیاژ $GaAs_xBi_{1-x}$ دانست؛ که در این بررسی مدهای نوسانی فاز بلندروی ترکیب GaBi را در نقطه G محاسبه کردند. نتایج آن‌ها در جدول

¹ the epitaxial growth technology

² P.Verma

(3-1) آورده شده است [8].

در سال 2002 جانوتی¹ و همکارانش در بررسی که هدف اصلی آن آلیاژ $\text{GaAs}_{1-x-y}\text{N}_x\text{Bi}_y$ بوده است، ترکیب GaBi در ساختار بلندروی را نیز مورد مطالعه قرار دادند و با استفاده از نظریه تابعی چگالی و امواج تخت بهبودیافته خطی به روش پتانسیل کامل توسط نرم افزار وین²، ویژگی های ساختاری این ترکیب را استخراج نمودند (جدول (2-1)). همچنین ساختار نواری آن را جهت به دست آوردن گاف نواری همان طور که در شکل (4-1) مشاهده می کنید، محاسبه کردند [9].



شکل 4-1: ساختار نواری محاسبه شده برای ترکیب گالیم بیسموت در فاز بلندروی توسط جانوتی و همکارانش [9].

در این تحقیق، گاف نواری اصلی آن در $G_{6c} \otimes G_{8n}$ برابر با $-1/45$ الکترونولت محاسبه شد. پس از آن در سال 2003 فرانسوئر³ و همکارانش در یک کار تجربی با استفاده از پراش پرتو x و در بررسی گاف نواری آلیاژ $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ ، توانستند ثابت شبکه ترکیب GaBi را مقداری برابر با $6/33$ آنگستروم به دست آورند [4].

در سال 2005 سئونگ⁴ و همکارانش در یک بررسی جامع تر نسبت به مطالعات ورما و

¹ A. Janotti

² Wien2K

³ S. Francoeur

⁴ M. J. Seong

همکارانش، بر روی مدهای نوسانی آلیاژ $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ با استفاده از طیف‌بینی پراکندگی رامان توانستند تنها در نقطه مرکزی G ، مدهای نوسانی اپتیکی را برای ترکیب GaBi ، GaAs و آلیاژ $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ محاسبه کنند. نتایج این بررسی در جدول (1-3) آورده شده است [10].

در سال 2006 فرهات¹ و زائویی² ویژگی‌های ساختاری و الکترونی برخی ترکیبات گروه III - V نظیر BBi ، AlBi ، GaBi ، InBi را مورد بررسی قرار دادند. در این روش که از نرم‌افزار وین استفاده شده، برخی از پارامترهای ساختاری GaBi را محاسبه کردند (جدول (1-2)). همچنین با استفاده از تقریب شیب تعمیم‌یافته³ (GGA)، ساختار نواری ترکیب GaBi را رسم کردند (شکل (1-5))؛ و متذکر این نکته شدند که تقریب چگالی موضعی⁴ (LDA) نسبت به تقریب شیب تعمیم‌یافته مقدار دقیق‌تری برای گاف نواری به دست می‌دهد [1].

جدول 1-2: پارامترهای ساختاری محاسبه شده برای ترکیب گالیم بیسموت در فاز بلندروی.

پارامترها	نتایج جانوتی [9]	نتایج فرهات [1]
a (Å)	6,324	GGA: 6,47 LDA: 6,28
B (GPa)	45,1	GGA: 35,96 LDA: 46,37
$B\phi$	4,9	GGA: 4,87 LDA: 4,55

¹ M. Ferhat

² A. Zaoui

³ Generalized Gradient Approximation

⁴ Local Density Approximation