

1.0.VA1E

۸۷/۱/۱۰۳۱۵۸
۸۷/۱/۲۵



دانشگاه پشاور
تحصیلات تکمیلی

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک حالت جامد

عنوان:

ستنز و مشخصه یابی نانو ذرات سولفید روی (ZnS)

استاد راهنما:

دکتر موسی علی احمد

استاد مشاور:

دکتر محمد گشتاسبی راد

تحقیق و نگارش:

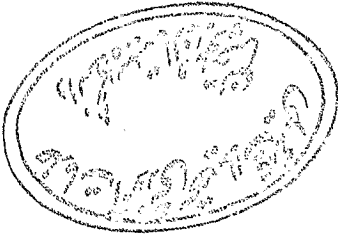
عباس رهدار

شهریوز ۱۳۸۷

۱۰۷۸۱۴

دانشگاه پشاور
کتابخانه مرکزی
شعبه فیزیک

۱۳۸۷ / ۱۰ / ۲۱

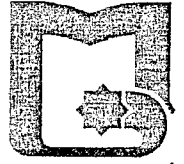


این پایان نامه با عنوان سننز و مشخصه یابی نانوذرات سولفیدروی (ZnS). قسمتی از برنامه آموزشی دوره کارشناسی ارشد..... فیزیک. کاربردی..... توسط دانشجو..... عباس رهدار..... تحت راهنمایی استاد پایان نامه..... دکتر موسی علی احمد..... تهیه شده است. استفاده از مطالب آن به منظور اهداف آموزشی با ذکر مرجع و اطلاع کتبی به حوزه تحصیلات تکمیلی دانشگاه سیستان و بلوچستان مجاز می باشد.

امضاء دانشجو

این پایان نامه ۴ واحد درسی شناخته می شود و در تاریخ ۱۳۹۷/۰۶/۲۰ توسط هیئت داوران بررسی و درجه به آن تعلق گرفت.

نام و نام خانوادگی	امضاء	تاریخ
استاد راهنما: دکتر موسی علی احمد		۱۷/۰۶/۲۰
استاد مشاور: دکتر محمد گشتاسبی راد		۱۷/۰۶/۲۰
داور ۱: دکتر محمد الماسی		۱۷/۰۶/۲۰
داور ۲: دکتر عبدالحمود داور پناه		
نماینده تحصیلات تکمیلی: دکتر علی اکبر مهماندوست		۱۷/۰۶/۲۰



دانشگاه سیستان و بلوچستان

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

تجددنامه اصالت اثر

اینجانب عباس رهدار تایید می کنم که مطالب مندرج در این پایان نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است و به دستاوردهای پژوهشی دیگران که در این نوشته از آن استفاده شده است مطابق مقررات ارجاع گردیده است. این پایان نامه پیش از این برای احراز هیچ مدرک هم سطح یا بالاتر ارائه نشده است.

کلیه حقوق مادی و معنوی این اثر متعلق به دانشگاه سیستان و بلوچستان می باشد.

نام و نام خانوادگی دانشجو: عباس رهدار

امضاء

تقدیم به:

پدر و مادرم و برادران و خواهرانم

چکیده

نیمرساناهای گروه II و ... ، به خصوص در حوزه فناوری نانو مورد توجه محققین قرار گرفته است.

CdS و ZnS موادی هستند که به عنوان دیودهای نیمرسانای گسیلنده نور (LED) شناخته شده اند. در این تحقیق، نانو ذرات ZnS با بکارگیری روش شیمیایی سل-ژل و خاصیت مهارکنندگی ۲- مرکپتو اتانول ($M.E$) سنتز و برخی خواص الکترواپتیکی آن رامورد مطالعه قرار داده ایم . طیفهای جذبی $UV-Visible$ نانو ذرات نیمرسانای سولفیدروی ، با افزایش غلظت عامل مهارکننده، جابجایی به سمت طول موجهای کوچکتر (آبی) و افزایش گاف انرژی را از خود نشان داده اند.

همچنین طیفهای پراش اشعه ایکس، شبکه بلوری مکعبی از نانوذرات نشان داده است، که بیشینه های (۱۱۱)، (۲۲۰) و (۳۱۱) در آنها به خوبی نمایان است اندازه متوسط نانوذرات حاصل شده با استفاده از فرمول شرر و این طیف ها بین $1/88$ تا ۳ نانومتر بدست آمده است. همچنین طیف فوتولومینسانس نانوذرات با تحریک ۲۸۵ نانومتر، بیشینه گسیلی را در ۵۷۲ نانومتر نشان داده است. جهت بررسی شکل ذرات ، تصویر میکروسکوپی SEM از یک نمونه گرفته شد.

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فصل اول: ساختارهایی با ابعاد کوچک

۲	۱-۱- مقدمه
۴	۲-۱- ساختار بلوری نیم رسانای حجمی
۶	۳-۱- ساختار باند الکترونی
۶	۱-۳-۱- تشکیل باندهای انرژی
۱۰	۲-۳-۱- دسته بندی نیم رساناها
۱۱	۳-۳-۱- گاف انرژی
۱۳	۴-۳-۱- نیم رساناها با گاف انرژی مستقیم و غیرمستقیم
۱۶	۴-۱- اکسیتون ها
۲۲	۵-۱- حبس شدگی کوانتومی در نیم رساناها
۲۶	۶-۱- اکسیتون ها و حبس شدگی کوانتومی

فصل دوم: روش های سنتز و ابزار تحلیل نانوذرات

۳۱	۱-۲- مقدمه
۳۲	۲-۲- روش های ساخت نانو خوشه ها
۳۲	۱-۲-۲- روش های فیزیکی
۳۴	۲-۲-۲- روش های شیمیایی
۳۸	۳-۲- ابزار تحلیل نانوذرات
۳۸	۱-۳-۲- طیف نمایی جذبی مرئی فرابنفش
۳۸	۲-۳-۲- آنالیز طیف پراش اشعه X

۴۵ میکروسکوپ‌های الکترونی	۳-۳-۲
۴۵ TEM عبوری الکترونی	۳-۳-۱
۴۵ SEM روبشی الکترونی	۳-۳-۲
۴۶ STM تونل‌زن روبشی	۳-۳-۳
۴۷ AFM نیروی اتمی	۳-۳-۴
۵۰ MFM مغناطیسی	۳-۳-۵
۵۰ LFM نیروی افقی	۳-۳-۶
۵۱ فوتولوومینسانس	۳-۲-۴

فصل سوم: سنتز نانوذرات سولفیدروی

۵۵ مقدمه	۳-۱
۵۵ سنتز نانوذرات به روش کلوییدی	۳-۲
۵۷ تهیه نانوذرات سولفیدروی	۳-۳
۵۹ دستگاه سانتریفوژ	۳-۱
۶۰ خشک‌کن	۳-۲
۶۰ تهیه محلول نانوذرات سولفیدروی	۳-۴
۶۴ تهیه پودر نانوذرات سولفیدروی	۳-۵
۶۴ ملاحظات ویژه آزمایشگاه نانو	۳-۶

فصل چهارم: نتایج سنتز

۶۸ مقدمه	۴-۱
۶۹ نانوذرات نیمرسانای سولفیدروی و طیف جذب فرابنفش	۴-۲
۶۹ تولید نانوذرات سولفیدروی به ازای مقادیر مختلف غلظت مهارکننده	۴-۱-۲
۷۱ تولید نانوذرات سولفیدروی به ازای مقادیر مختلف غلظت مواد اولیه واکنش	۴-۲-۲

- ۴-۲-۳- تولید نانوذرات سولفید روی خشک شده در دمای محیط به ازای مقادیر مختلف غلظت مهارکننده ۷۲
- ۴-۲-۴- تولید نانوذرات سولفید روی به ازای مقادیر مختلف PH ۷۴
- ۴-۲-۵- تولید نانوذرات سولفید روی به ازای مقادیر مختلف غلظت کلرید روی ۷۶
- ۴-۲-۶- تولید نانوذرات سولفید روی به ازای مقادیر مختلف غلظت سولفید سدیم ۷۷
- ۴-۳- پرآش پرتو ایکس نانوذرات سولفید روی ۷۹
- ۴-۴- طیف فوتولومینسانس نانوذرات نیم رسانای سولفید روی ۸۱
- ۴-۵- تصویر SEM برای نانوذرات سولفید روی ۸۳

فصل پنجم: نتیجه گیری و پیشنهادات

فصل اول

ساختارهایی با ابعاد کوچک

۱-۱- مقدمه

ترکیبات نیمرسانای گروه II-VI جدول تناوبی و آلیاژهایشان برای چندین دهه، به لحاظ مطالعات بنیادی و کاربردهای صنعتی از مهمترین حوزه‌های تحقیقاتی به شمار می‌روند. گستردگی گاف انرژی، ثابت‌های شبکه و طبیعت قطبی خوب این مواد از عمده‌ترین فاکتورهایی است که این ترکیبات را از ترکیبات گروه III-V جدول تناوبی متمایز می‌سازد. بعلاوه این ویژگی‌ها، از ترکیبات نیمرسانای گروه II-VI به طور گسترده‌ای در ساخت لیزرهای مادون قرمز، آشکارسازها، وسایل مغناطوپتیکی و آشکارسازهای تابشی، دیودهای گسیل نور، مواد اپتیکی غیر خطی، فوتونیک، کامپیوتر و ارتباطات استفاده می‌شود [۱۵].

با این وجود در طول سالهای ۱۹۶۰ تا ۱۹۷۰ به علت محدودیت در تکنیک‌های رشد و آلاینده‌های این ترکیبات باعث گردید که تا سال ۱۹۸۰ تحقیقات در مورد این ترکیبات پیشرفت چندانی نداشته باشد که در سال ۱۹۸۰ با پیشرفت‌هایی در زمینه رشد این گروه از مواد، مثل تکنیک‌های رشد رونشست پرتو مولکولی^۱ (MBE) و رسوب بخار شیمیایی فلزی-آلی^۲ (MOCVD)، باعث گردید که پژوهش و تحقیق در مورد این ترکیبات نیمه رسانا از سر گرفته شود و در حال حاضر همگام با پیشرفت در حوزه‌های جدید مثل ساخت قطعات اپتیکی غیر خطی، اسپینترونیک و بالاکس ساختارهای یکنواخت کوانتومی موجب گردیده که مطالعه و تحقیق در زمینه ترکیبات نیمرسانای گروه II-VI روند صعودی را داشته باشد.

تا اوایل سال ۱۹۹۰ تحقیق در مورد خواص نیمرساناهای بلوری بویژه گروه II-VI نشان داد که اندازه بلور حجمی نقشی در خواص آن ندارد. بنابراین با پیشرفت در زمینه ایجاد ساختارهای کوانتومی و با حبس حامل‌های بار در یک بعد، دو بعد و سه بعد، که اندازه ابعاد حبس شدگی (اندازه بحرانی) قابل مقایسه با مرتبه‌ای از طول موج دوبروی حامل‌ها یا قابل مقایسه با شعاع اکسیتون بوهر^۳ ماده بوده، باعث گردید که خواص فیزیکی و شیمیایی مختلف آنها به آرامی شروع به تغییر کند که این خواص در مقایسه با خواص مشاهده شده در نیمرسانای متداول حجمی تفاوت عمده‌ای داشت.

¹ Molecular Beam Epitaxy

² Metal Organic Chemical Vapour Deposition

³ Exciton Bohr Radius

خواص فیزیکی و شیمیایی مختلف آنها به آرامی شروع به تغییر کند که این خواص در مقایسه با خواص مشاهده شده در نیمرسانای متداول حجمی تفاوت عمده‌ای داشت.

اندازه بحرانی در گستره یک تا چند صد نانومتر بوده، لذا تعداد اتم‌های موجود در موادی با این مقیاس خیلی کم است که این موضوع سبب افزایش نسبت سطح به حجم در نانوذرات نیمرسانا می‌شود. در نتیجه افزایش نسبت سطح به حجم در نیمرسانا با این ابعاد و حبس شدگی کوانتومی دو فاکتور مهمی بوده که تغییر خواص با اندازه در نانو ساختارها را موجب می‌شوند که به آن "اثر وابسته به اندازه"^۱ گفته می‌شود. کاهش ابعاد در یک جهت منجر به لایه نازک (چاه کوانتومی^۲) شده به طوری که حامل‌های بار مجاز به حرکت کردن در دو بعد هستند و با کاهش ابعاد در دو جهت به ساختارهای سیم مانند (سیم کوانتومی^۳) خواهیم رسید که در آن حامل‌های بار مجاز به حرکت در یک بعد بوده و با کاهش ابعاد در هر سه جهت (نقطه کوانتومی^۴) با ساختاری روبه رو می‌شویم که در آن حامل‌ها در هر سه بعد محدود شدند. در مجموع به این ساختارها، ساختارهایی با ابعاد کوچک^۵ گفته می‌شود و حبس شدگی حامل‌ها^۶ در هر بعد منجر به کوانتس انرژی حامل‌ها در آن بعد خواهد شد به عبارت دیگر، مهمترین ویژگی ساختارهایی با ابعاد کوچک، کوانتس انرژی می‌باشد.

بنابراین خواص وابسته به اندازه در تحقیقات جدید یک مفهوم جذاب است. این موضوع نه تنها باعث بوجود آمدن مواد جدید بهینه شده می‌گردد بلکه کمک می‌کند به اینکه درک کنیم که چگونه با شروع از یک اتم و مولکول، تجمعی از مولکولها یا خوشه‌ها به یک جامد ختم می‌شود. همانگونه که تحقیق در مورد مواد با ابعاد کوچک، داده‌های تجربی جدید و جدیدتری تولید می‌کند، پیشگوییهای نظری نیز علاوه بر کاربردهای جدید مطرح می‌شوند.

¹ Quantum Size Effect

² Quantum Well

³ Quantum Wire

⁴ Quantum Dot

⁵ Low-dimensional Structures

⁶ Carriers Confinment

همانطور که گفته شد کاهش ابعاد با توجه به شرایط رشد می‌تواند در یک یا چند جهت باشد که یکی از آنها کاهش ابعاد در سه جهت بوده که باعث کوانتس انرژری حامل‌ها در هر سه جهت می‌شود که به آنها نقاط کوانتومی یا نانوذرات نیمرسانا گفته می‌شود. در این تحقیق به تهیه نانوذرات نیمرسانای سولفید روی (ZnS) پرداخته می‌شود و تحقیقاتی در مورد بعضی از خواص آن انجام خواهد شد بنابراین در این فصل، در مورد مهمترین خواص فیزیکی ترکیبات نیمرسانای گروه II-VI بویژه سولفید روی بحث خواهیم کرد و در ادامه حبس شدگی کوانتومی¹ و تاثیر آن بر تغییر خواص نیمرسانای مذکور را مورد تجزیه و تحلیل قرار خواهیم داد.

هدف از این فصل بررسی مهمترین خواص الکترونیکی و اپتیکی نیمرسانای سولفیدروی و همچنین معرفی ایده حبس شدگی کوانتومی در ساختار نیمرساناهایی با ابعاد کوچک بویژه نقاط کوانتومی یا نانوذرات نیمرسانا می‌باشد. ما بحث مان را با خواص فیزیکی مهم نیمرسانای حجمی گروه II-VI، به ویژه ZnS شروع خواهیم کرد. این خواص شامل ساختار بلوری، ساختار بانداکترونی و جفت الکترون-حفره (اکسیتون‌ها)² بوده و در نهایت محدودیت کوانتومی و اثرات کوانتس بر روی خواص فیزیکی حامل‌ها در مواد نیمرسانا را مورد مطالعه قرار خواهیم داد.

۱-۲- ساختار بلوری نیمرسانای حجمی ZnS

در مدت پنج دهه گذشته، گستره وسیعی از تحقیقات به مطالعه ساختار بلوری مواد نیمرسانای ترکیبی اختصاص یافته بود که خواص فیزیکی شناخته شده این گروه از مواد، از علل اصلی آن به شمار می‌رفت. از میان انواع ساختارهای بلوری، ساختارهای شش گوشه و مکعبی به دلیل کاربرد صنعتی آنها در ساخت قطعات، مورد توجه ویژه قرار گرفته است.

¹ Quantum Confinment

² Exciton

با توجه به شرایط رشد می‌توانیم به ساختارهای مکعبی (Zinc - blende) و ساختارهای ششگوشی *Wurtzite* برای بیشتر ترکیبات II-VI برسیم. سولفیدروی یک نیمرسانا ترکیبی از گروه‌های II-VI با Zn متعلق به ستون دوم و S متعلق به ستون ششم جدول تناوبی عناصر است. دو نوع ساختار متعلق به ZnS وجود دارد که در شکل (۱-۱) نمایش داده شده است.

۱- ساختار شبکه ای مکعبی^۱ یا *Zinc - blende*

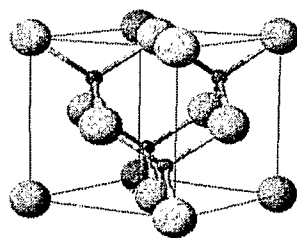
۲- ساختار شبکه ای شش وجهی^۲ یا *Wurtzite*

۱-۲-۱- ساختار مکعبی

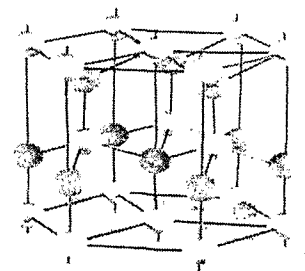
در یک سلول واحد مکعبی چهار اتم ZnS وجود دارد. در این مولکول ZnS اتم‌های زیادی بصورت چهار ضلعی بوسیله چهار اتم از نوع دیگر احاطه شده است. اگر یون‌های S گوگرد ساختار بهم پکیده ای داشته باشند در این ساختار، ZnS ساختار مکعبی *Zinc - blende* خواهد داشت (شکل ۱-۱ ب).

۱-۲-۲- ساختار شش وجهی

در هر سلول واحد شش وجهی، دو مولکول ZnS وجود دارد. اگر یون‌های S گوگرد ساختار بهم پکیده شش وجهی داشته باشد آنگاه ساختار سولفیدروی ZnS، شش وجهی یا *Wurtzite* می‌باشد. (شکل ۱-۱ الف).



(ب)



(الف)

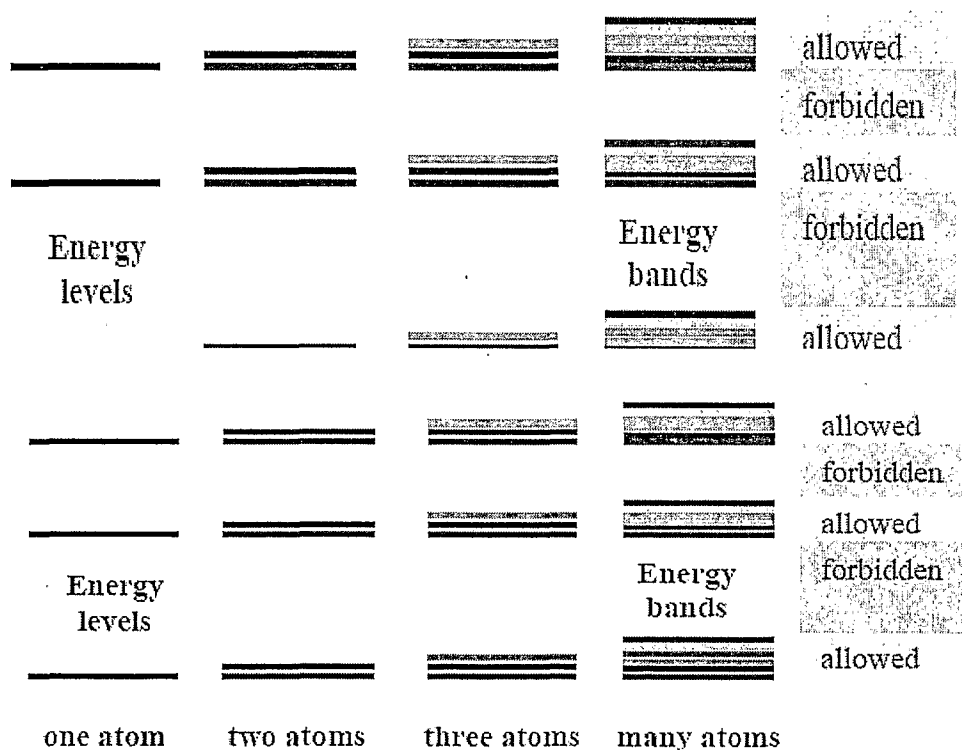
¹ -Cubic

² -Hexagonal

۳-۱- ساختار باند الکترونی

۳-۱-۱- تشکیل باندهای انرژی

با توجه به قوانین فیزیک کوانتومی، آشکار است که انرژی الکترون‌ها در اتم‌های ایزوله شده کوانتیزه می‌شود، بدین معنی که الکترون‌ها فقط می‌توانند اربیتال‌های اتمی معینی را همراه با ترازهای انرژی گسسته اشغال کنند. اگر چندین اتم در کنار هم قرار گیرند تا یک مولکول تشکیل شود در آن صورت، اربیتال‌های اتمی شان شکافته می‌شود. وقتی که 10^{23} اتم جهت تشکیل بلور کنار هم قرار گیرند تعداد اربیتال‌ها فوق العاده زیاد شده در نتیجه ترازهای انرژی شان به همدیگر نزدیک شده، به طوریکه ترازهای انرژی پیوسته به نظر می‌رسند. در نتیجه باندهای انرژی الکترونی مجاز بوجود می‌آید. بین این باندها، گاف‌های ممنوع قرار داشته که الکترون‌های مشابه با ترازهای گسسته در اتم، نمی‌تواند در این گاف قرار گیرد. تشکیل باندهای انرژی در شکل (۲-۱) نمایش داده شده است.



شکل (۲-۱). تشکیل باندهای انرژی در جامدات [۱۵].

بالاترین باند انرژی که با الکترون‌ها در دمای صفر کلوین پر می‌شود باند ظرفیت^۱ (VB) نامیده شده و باند بالاتر آن که در دمای صفر کلوین هیچ الکترونی در آن وجود ندارد، باند هدایت^۲ (CB) نام دارد. بازه انرژی بین پایین‌ترین نقطه باند هدایت و بالاترین نقطه باند ظرفیت را "گاف انرژی"^۳ با انرژی Eg گویند که مهمترین مشخصه یک جامد است. هدایت الکتریکی در جامدات، وابسته به گاف انرژی است و جامدات با توجه به آن، به سه دسته تقسیم می‌شوند:

الف- رسانا: در رساناها، گاف انرژی کمتر از ۰/۱ eV بوده و چگالی الکترون در باند هدایت مرتبه ای از 10^{23} cm^{-3} می‌باشد. رساناها جامداتی هستند که در اثر اعمال یک میدان الکتریکی کوچک، جریان الکتریکی در آنها ایجاد می‌شود. از رساناهای خیلی خوب می‌توان نقره، مس و آلومینیوم را نام برد.

ب- نارسانا: در نارساناها، گاف انرژی زیاد بوده و انرژی گافشان بیشتر از ۴ eV بوده به طوریکه هیچ الکترونی در باند هدایت یا هیچ حفره‌ای در باند ظرفیت آنها وجود ندارد. در نارساناها، با اعمال میدان الکتریکی هیچ جریان الکتریکی ایجاد نمی‌شود. برای مثال از نارساناهایی با رسانندگی خیلی پایین می‌توان شیشه و کوارتز را نام برد. در این دسته از مواد، فقط در میدانهای الکتریکی خیلی زیاد ممکن است جریان ایجاد شود [۱۵]. شکل (۱-۳) گاف انرژی نارسانا، نیمرسانا و رسانا را نشان میدهد.

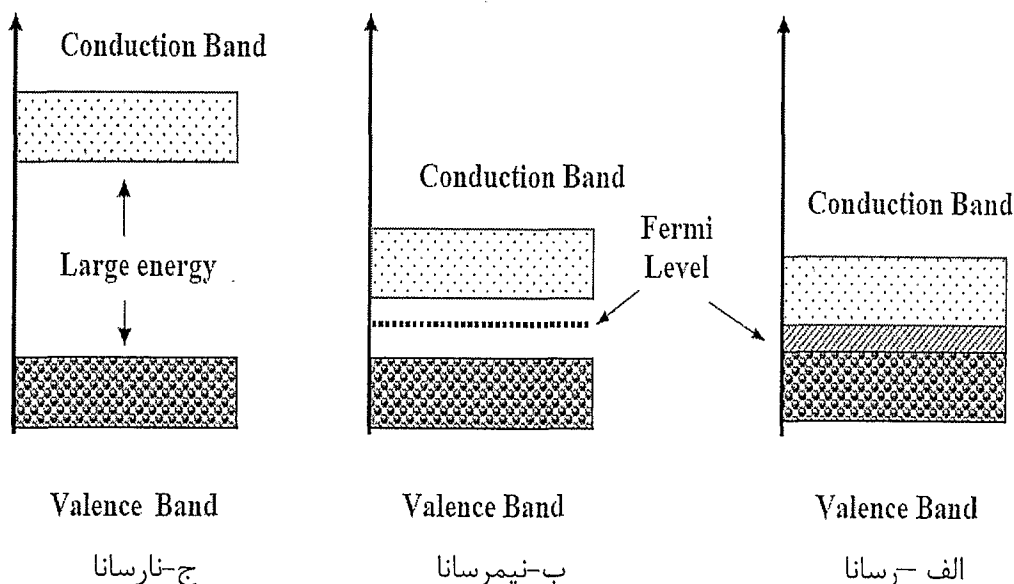
ج- نیمرسانا: در نیمرسانا، انرژی گاف کمتر از ۴ الکترون ولت و بیشتر از ۰/۱ eV بوده و چگالی الکترون در باند هدایت یا حفره‌ها در باند ظرفیت کمتر از 10^{20} cm^{-3} است. هدایت الکتریکی در نیمرساناها توسط دو نوع حامل بار یعنی الکترونهای آزاد و حفره‌ها صورت می‌گیرد. در این مواد الکترونهای ظرفیت نمی‌توانند آزادانه به هر سو حرکت کنند بلکه با پیوندهای کووالان بین اتمها قرار دارند. الکترونها هنگامی برانگیخته می‌شوند که بتوانند از گاف انرژی عبور کنند. پایین باند هدایت از الکترونها پر می‌شود و بالای باند ظرفیت از حفره‌ها پر می‌شود، پس هر دو باند بطور جزئی پر هستند و اگر یک میدان الکتریکی خارجی اعمال گردد، الکترونها و حفره‌ها می‌توانند حامل جریان الکتریکی باشند. وقتی که باند ظرفیت کاملاً پر و باند هدایت

¹ Valence Band

² Conduction Band

³ Band Gap

الکترونها و حفره ها می توانند حامل جریان الکتریکی باشند. وقتی که باند ظرفیت کاملاً پر و باند هدایت کاملاً خالی باشد، هیچ کدام از آنها در هدایت الکتریکی سهمی ندارند. بنابراین این مادامی که خواص نیمرسانا مورد توجه است می توان از آنها صرف نظر کرد [۱۵].

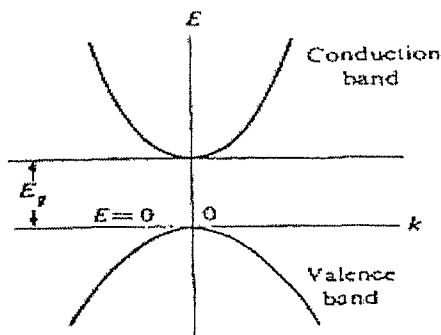


شکل (۳-۱) گاف انرژی نارسانا، نیمرسانا و رسانا

انرژی جنبشی حامل های بار در نیمرسانای حجمی از طریق رابطه $E = \frac{p^2}{2m^*}$ به اندازه حرکت

وابسته بوده که m^* جرم موثر الکترون یا حفره (متفاوت از مقدار آن در خلاء) می باشد. بنابراین، انرژی

جنبشی از طریق رابطه پاشندگی انرژی، $E = E(k)$ ، است که ساختار باند الکترون را معرفی می کند.



شکل (۴-۱). ساختار باند نیمرسانا حجمی [۱۶].

شکل (۱-۴) ساده ترین ساختار باند یک نیمرسانای حجمی را نشان می دهد. اگر صفر انرژی را بالای

باند ظرفیت انتخاب کنیم انرژی باند هدایت به شکل زیر است:

$$E_c(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad (1-1)$$

که k بردار موج و m_e^* جرم مؤثر الکترون و E_g گاف انرژی است. انرژی باند ظرفیت به شکل

$$E_v(k) = \frac{-\hbar^2 k^2}{2m_h^*} \quad (2-1)$$

است که m_h^* جرم مؤثر حفره است. ضمناً به خاطر شکل وارونه باند ظرفیت، جرم مؤثر الکترون در

باند ظرفیت منفی بوده و برابر با $-m_h^*$ است، ولی جرم مؤثر حفره مثبت است. لازم به ذکر است که چون

فاصله بین نزدیکترین اتمها در جهت‌های مختلف تغییر می کند شکل سطح انرژی شبه کروی بوده و کره

کامل نمی باشد.

جدول ۱-۱. پارامترهای ساختاری برخی نیمرساناها در دمای اتاق [۱۷]

m_h^*	m_e^*	$E_g (ev)$	بلور	گروه
۰/۰۹	۰/۰۷	۱/۴	<i>GaAs</i>	III-V
۰/۰۲	۰/۰۳	۰/۴	<i>InAs</i>	III-V
۰/۸۰	۰/۲۱	۲/۶	<i>CdS</i>	II-VI
۰/۶۱	۰/۴۰	۳/۶	<i>ZnS</i>	II-VI
۰/۲۵	۰/۲۵	۰/۴	<i>PbS</i>	IV-VI

کمیات m_e^* ، m_h^* و E_g برای برخی نیمرساناها در جدول (۱-۱) ارائه شده است. گافهای انرژی در

محدوده ۰/۴ev برای *InAs* و *PbS* تا ۳/۶ ev برای *ZnS* قرار دارند [۱۷].

یکی از دلایلی که کاربرد نیمرساناها را در سالهای اخیر افزایش داده ، این است که ساختار این دسته

از مواد را با رشد دادن می توان طوری تغییر داد که مجموعه ای از مواد تازه با ابعاد بسیار کوچک و خواص

قابل پیش بینی بدست آید. پیشرفتهای اخیر در روشهای تولید نانوساختارها باعث تولید ساختار بلورهایی با ابعاد نانومتری شده است که خواص نوری و الکترونیکی آنها در مقایسه با نمونه حجمی آنها بسیار متفاوت می باشد.

۱-۳-۲- دسته بندی نیمرسانا

الف- نیمرسانای تک عنصری مثل سیلیسیم (Si)

ب- نیمرساناهای مرکب که از یک یا دو یا تعداد بیشتری عنصر تشکیل شده اند مثل $GaAs$, CdS , ZnS و... که بیشتر نیمرساناهای ترکیبی گروه $III-V$, $II-VI$ مورد توجه هستند.

ج- آلیاژها مثل: $GaAs_xP_{1-x}$

سولفیدروی یکی از نیمرساناهای گروه $II-VI$ با گاف نواری مستقیم است. اندازه انرژی گاف این ماده در دمای اتاق $3/6 eV$ است. برخی از خواص سولفیدروی حجمی در جدول (۱-۲) خلاصه شده اند.

جدول (۱-۲). خصوصیات سولفیدروی مکعبی در حالت حجمی [۶]

نقطه ذوب °C	شعاع بوهر (Å)	ثابت شبکه (Å)	ثابت دی الکتریک	جرم موثر	گاف نواری	نوع ساختار شبکه‌ای
1800	برای الکترون $\alpha_e = 7$ برای حفره $\alpha_h = 4$ برای اکسیتون $\alpha_e = 11$	5.4	5.2	برای الکترون $m_e^* = 0.40m_e$ برای حفره $m_h^* = 0.61m_e$	$E_g = 3.68eV$ در دمای 300 درجه کلوین $E_g = 3.84eV$ در دمای 0 کلوین	مکعبی

برای یک نیمرسانا، گاف انرژی مهم‌ترین پارامتر محسوب می‌شود خیلی از خواص فیزیکی مثل جذب اپتیکی، لومینسانس، رسانایی الکتریکی و ضریب شکست به طور مستقیم به انرژی گاف E_g وابسته‌اند. طول موج لومینسانس نیمرسانا قویا وابسته به مقدار E_g (مادون قرمز برای مواد III-V و سبز / آبی برای ترکیبات II-VI می باشد. کارایی گسیل نوری برای نیمرسانا با گاف انرژی غیر مستقیم کم می باشد.

۱-۳-۳-۱) وابستگی گاف انرژی E_g به دما (T) و فشار (P) در نیمرسانا

گاف انرژی با اعمال شرایط خارجی مثل تنش، دما یا ساخت آلیاژ تغییر می‌کند. تغییر گاف انرژی برای یک نیمرسانا بر حسب دما و فشار معمولاً اندک می باشد. ترازهای انرژی در بلور توابعی از فواصل بین اتمی هستند. بنابراین، وقتی که دما و یا فشار تغییر می کند فواصل بین اتمی، ترازهای انرژی و E_g نیز تغییر می کنند [۳۳].

تغییرات مورد نظر را می توان بصورت زیر نوشت :

$$E_g = E_g^0 + \left[\frac{\partial E_g}{\partial p} \right]_T \Delta p + \left[\frac{\partial E_g}{\partial T} \right]_p \Delta T \quad (۳-۱)$$

که E_g^0 یعنی انرژی گاف در $T = 0$ کلون در غیاب هر گونه فشار، تغییرات E_g با دما در حدود $0.1 \frac{meV}{K}$ و تغییرات آن با فشار در حدود $10^{-9} \frac{meV}{dyncm^{-2}}$ می باشد که برای نیمرساناهای مختلف این اعداد می تواند مثبت یا منفی باشند، یعنی E_g می تواند بر اثر تغییر فشار کم یا زیاد شود. معمولاً وقتی که دما افزایش می یابد، گاف انرژی کوچک می شود ولی نیمرسانایی مانند کلرور مس $CuCl_2$ هستند که با افزایش دما، انرژی گاف آنها افزایش می یابد [۳۳].