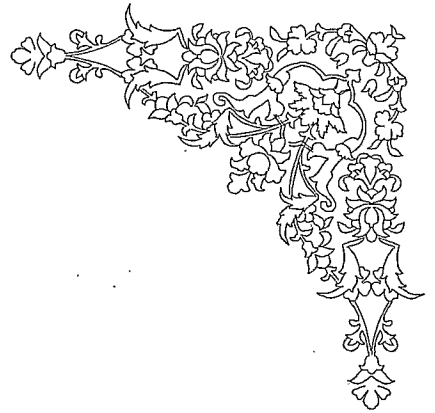
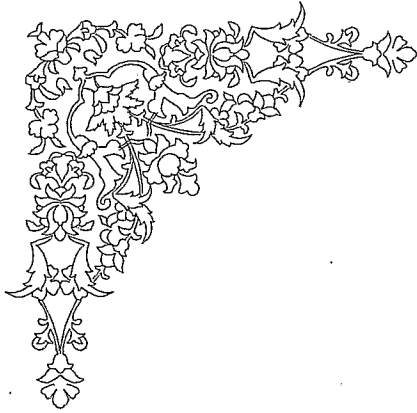


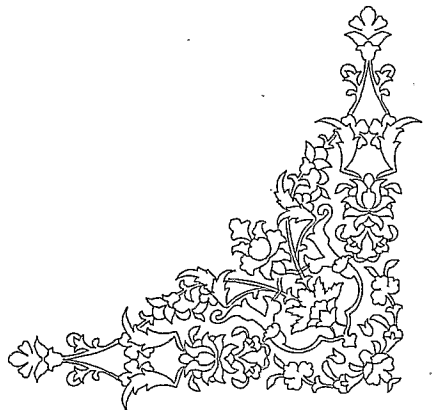
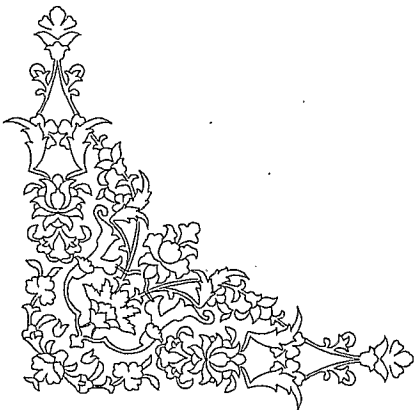
۸۷/۱/۱۰۵۹۵۳

۸۷/۱۰/۲۲



به نام خدا

مهربان ترین و بخشنده ترین



۱۰۸۰۹۴



پایان نامه

جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

فیزیک ماده چگال

عنوان:

محاسبه نوار انرژی اکسید روی با استفاده از  
پتانسیل گرادیانی تعمیم یافته تصحیح شده

نگارش:

شیده امیریگانه

استاد راهنما:

دکتر محمد مهدی طهرانچی

شهریور ۱۳۸۷

۱۰۸۰۹۴

کتابخانه  
دانشگاه شیراز

۱۳۸۷ / ۱۰ / ۲۴



دانشگاه شهید بهشتی

تاریخ .....  
شماره .....  
پیوست .....

بسمه تعالی

« صورتجلسه دفاع پایان نامه دانشجویان دوره کارشناسی ارشد »

تهران ۱۹۸۳۹۶۳۱۱۳ اوین

تلفن: ۲۹۹۰۱

بازگشت به مجوز دفاع شماره مورخ / ۸۷ / جلسه هیأت داوران  
ارزیابی پایان نامه خانم شیده امیریگانه به شماره شناسنامه ۳۵۵ صادره از بندر انزلی  
متولد ۱۳۶۰ دانشجوی دوره کارشناسی ارشد ناپیوسته رشته فیزیک - حالت جامد  
با عنوان:

محاسبه نوار انرژی اکسید روی با استفاده از پتانسیل گرادیانی تعمیم یافته

به راهنمایی:

دکتر محمد مهدی طهرانچی

طبق دعوت قبلی در تاریخ ۱۳۸۷/۶/۲۰ تشکیل گردید و براساس رأی هیأت داوری و با  
عنایت به ماده ۲۰ آئین نامه کارشناسی ارشد مورخ ۷۵/۱۰/۲۵ پایان نامه مزبور با  
نمره ۱۸٫۴ و درجه عالی مورد تصویب قرار گرفت.

۱- استاد راهنما: آقای دکتر محمد مهدی طهرانچی

۲- استاد مشاور: -----

۳- استاد داور: آقای دکتر مجید قناعت شعار

۴- استاد داور و نماینده تحصیلات تکمیلی: خانم دکتر شرمین خرازی

۵- معاون تحصیلات تکمیلی دانشکده علوم: آقای دکتر خسرو جدیدی

تقدیم به پدر و مادر و خواهر عزیزم

## تشکر و قدردانی :

از خانواده عزیزم به خاطر حمایت‌های بی‌دریغشان کمال سپاسگزاری را دارم و از استاد راهنمایم جناب آقای دکتر طهرانچی بواسطه زحمات و راهنمایی‌هایشان قدردانی می‌نمایم از جناب آقای علی رسولی که در انجام این پایان نامه مرا یاری نموده‌اند و همچنین از آقای دکتر قناعت شعار به جهت زحمات و حمایت‌های ایشان سپاسگذاری می‌نمایم.

از دوستان خوبم، خانم شیما نظری، خانم شبمنم حقدوست، آقای مهندس سیامک مهداوی، آقای حمید افتخاری، سرکارخانم حمیدی و سرکار خانم انصاری که در مراحل انجام این پایان‌نامه از راهنمایی‌ها و محبت‌هایشان بهره‌برده‌ام، کمال تشکر را دارم.

در پایان از تمامی دوستان عزیز و ارجمندم در آزمایشگاه مگنتوآپتیک و پژوهشکده لیزر و پلاسما و تمام کسانی که به نحوی در انجام این پروژه با اینجانب همکاری داشته‌اند، کمال تشکر و قدردانی را دارم.

## چکیده

درسالهای اخیر مواد نیمه رسانای دارای گاف انرژی بزرگ و مستقیم توجه زیادی را در الکترونیک و الکترونیک نوری به خود جلب کرده اند. بین این مواد اکسید روی و سولفید روی به علت فراوان بودن و قابلیت لایه نشانی آسان با روشهای گوناگون اهمیت بیشتری پیدا کرده اند. در این پایان نامه نوارهای انرژی این دو ماده بر پایه نظریه تابعی چگالی، با استفاده از پتانسیل گرادیانی تعمیم یافته محاسبه، و سپس با اعمال تقریب های پتانسیل تبادلی- همبستگی گوناگون گاف انرژی این مواد تا حد قابل توجهی به مقدار تجربی نزدیک شده است.

## واژه های کلیدی :

اکسید روی، سولفید روی، نوارهای انرژی، گاف انرژی، نظریه تابعی چگالی، پتانسیل تبادلی- همبستگی،

پتانسیل گرادیانی تعمیم یافته، تقریب لمبارکی، تقریب انگل- وسکو، نرم افزار WIEN2K

## فهرست مطالب:

### فصل اول: اکسید روی، ویژگیهای عمومی، کاربردها و اهمیت آن..... ۱

۱-۱ مقدمه..... ۲

۱-۱-۱ اکسیدهای رسانای شفاف..... ۲

۲-۱ تاریخچه..... ۴

۳-۱ ویژگی های عمومی اکسید روی..... ۷

### فصل دوم: روشهای محاسبه ساختارهای باند الکترونی کریستالها..... ۱۰

۱-۲ تقریب های اولیه..... ۱۱

۱-۲-۱ تقریب آدیاباتیک..... ۱۲

۲-۱-۲ تقریب تک الکترونی..... ۱۴

۳-۱-۲ تقریب باند..... ۱۶

۲-۲ روشهای محاسبه ساختار نواری..... ۱۷

۱-۲-۲ روش بستگی قوی..... ۱۷

۲-۲-۲ روش سلولی..... ۱۹

۳-۲-۲ روش شبه پتانسیل..... ۲۱

۱-۳-۲-۲ تقریب شبه پتانسیل..... ۲۲

۴-۲-۲ روش موج تخت فزونور..... ۲۴

۱-۴-۲-۲ روش موج تخت فزونور خطی..... ۲۶

۵-۲-۲ روش APW+10..... ۲۸

۳۱.....	<u>فصل سوم:</u> نظریه تابعی چگالی
۳۲.....	۱-۳ معرفی
۳۳.....	۱-۱-۳ قضایای هوهنبرگ و کوهن
۳۴.....	۱-۱-۱-۳ قضیه اول HK
۳۶.....	۲-۱-۱-۳ قضیه دوم HK
۴۰.....	۲-۳ روش کوهن - شم
۴۲.....	۳-۳ تقریب های مورد استفاده در DFT
۴۲.....	۱-۳-۳ تقریب چگالی موضعی
۴۵.....	۱-۱-۳-۳ مشکلات تقریب چگالی موضعی
۴۶.....	۲-۳-۳ تقریب چگالی اسپینی موضعی
۴۸.....	۳-۳-۳ تقریب گرادینانی تعمیم یافته

### فصل چهارم: بررسی اثر پتانسیل های تقریبی روی گاف انرژی اکسید روی و مقایسه با

۵۰.....	سولفید روی
۵۱.....	۱-۴ اعمال پتانسیل های تقریبی گوناگون و نوارهای انرژی اکسید روی
۵۲.....	۲-۴ مطالعه نمودارها
۵۶.....	۳-۴ پتانسیل گرادینانی تعمیم یافته تصحیح شده (تقریب لمبارکی)
۵۸.....	۴-۴ رسم نوارهای انرژی سولفید روی
۶۱.....	۵-۴ نتایج و بحث



۶۱.....۱-۵-۴ مقایسه اکسید و سولفید روی

۶۵.....نتایج و پیشنهادات

۶۷.....پیوست: برنامه WIEN2K راهکاری برای بررسی نوارهای انرژی

۶۹.....۱- قواعد نامگذاری

۶۹.....۲- ایجاد محیط گرافیکی جدید

۶۹.....۳- ایجاد ورودی اصلی

۷۰.....۴- ترتیب اجرای برنامه ها

۷۱.....۱-۴ برنامه های مرحله آماده سازی

۷۱.....nn ۱-۱-۴

۷۱.....view outputnn ۲-۱-۴

۷۲.....sgroup ۳-۱-۴

۷۲.....view outputsgroup ۴-۱-۴

۷۲.....symmetry ۵-۱-۴

۷۳.....copy struct-st ۶-۱-۴

۷۳.....lstart ۷-۱-۴

۷۳.....view outputst ۸-۱-۴

۷۴.....check ZnO.in1-st ۹-۱-۴

۷۴.....check ZnO.in2-st ۱۰-۱-۴

۷۴.....check ZnO.inm-st ۱۱-۱-۴

۷۴.....kgen ۱۲-۱-۴

۷۵.....	view klist ۱۳-۱-۴
۷۵.....	dstart ۱۴-۱-۴
۷۵.....	view ZnO.outputd ۱۵-۱-۴
۷۵.....	مرحله آخر ۱۶-۱-۴
۷۵.....	برنامه های مرحله خودسازگار ۲-۴
۷۵.....	LAPW0 ۱-۲-۴
۷۶.....	LAPW1 ۴-۲-۴
۷۶.....	LAPW2 ۳-۲-۴
۷۶.....	LCORE ۴-۲-۴
۷۷.....	MIXER ۵-۲-۴
۷۷.....	۵- بهینه سازی مقدار $k_{max}$ $R_{mt}$ و تعدادk های انتخابی
۸۱.....	۶- محاسبه خواص
۸۱.....	۷- ساختار نواری
۸۳.....	<u>مراجع</u>

## فهرست شکل ها و نمودارها:

- شکل (۱-۱): ساختار بلور ورتزایت ZnO ..... ۸
- شکل (۲-۱): پودر اکسید روی ..... ۹
- شکل (۱-۲): رفتار توابع موج حاصل از حل اتمی و سلولی برای دو ناحیه داخل و خارج هسته ..... ۲۰
- شکل (۲-۲): رفتار توابع موج و پتانسیل در دو ناحیه هسته و ظرفیت ، برای پتانسیل واقعی و شبه پتانسیل ..... ۲۳
- شکل (۳-۲): تقسیم بندی سلول با استفاده از تعریف پتانسیل مافن تین ..... ۲۶
- نمودار (۱-۳): روش کوهن- شم ..... ۴۰
- نمودار (۲-۳): چرخه خودسازگار حل معادلات کوهن- شم ..... ۴۴
- شکل (۱-۴): گاف انرژی اکسید روی با استفاده از تقریب GGA ..... ۵۲
- شکل (۲-۴): گاف انرژی اکسید روی با استفاده از تقریب لمبارکی ..... ۵۳
- شکل (۳-۴): گاف انرژی اکسید روی با استفاده از تقریب EV93 ..... ۵۳
- شکل (۴-۴): نمودار چگالی حالات کل اکسید روی ..... ۵۳
- شکل (۵-۴): نمودارهای نوار انرژی اکسید روی با تقریب های مختلف انرژی ..... ۵۴ و ۵۵
- شکل (۶-۴): گاف انرژی سولفید روی با استفاده از تقریب GGA ..... ۵۸
- شکل (۷-۴): گاف انرژی سولفید روی با استفاده از تقریب لمبارکی ..... ۵۸
- شکل (۸-۴): گاف انرژی سولفید روی با استفاده از EV93 ..... ۵۸
- شکل (۹-۴): نمودارهای نوار انرژی سولفید روی با تقریب های مختلف انرژی ..... ۵۹ و ۶۰
- شکل (۱۰-۴): نمودار نوار انرژی و چگالی حالت های ZnO ..... ۶۳
- شکل (۱۱-۴): نمودار نوار انرژی و چگالی حالت های ZnO (مقاله [۱۲]) ..... ۶۳

- شکل (۴-۱۲): نمودار نوار انرژی و چگالی حالت‌های ZnS ..... ۶۴
- شکل (۴-۱۱): نمودار نوار انرژی و چگالی حالت‌های ZnS (مقاله [۱۲]) ..... ۶۴
- شکل (۱): گرادیان میدان الکتریکی EFG به صورت تابعی از نقاط  $k$  ..... ۷۸
- شکل (۲): انرژی کل ENE، به صورت تابعی از نقاط  $k$  ..... ۷۹
- شکل (۳): گرادیان میدان الکتریکی به صورت تابعی از  $R_{mt} k_{max}$  ..... ۷۹
- شکل (۴): فاصله بار بین دو تا چرخه آخر DIS؛ به صورت تابعی از  $R_{mt} k_{max}$  ..... ۸۰
- شکل (۵): انرژی کل ENE؛ به صورت تابعی از  $R_{mt} k_{max}$  ..... ۸۰
- شکل (۶): انرژی فرمی FER؛ به صورت تابعی از  $R_{mt} k_{max}$  ..... ۸۱

# فصل اول

اکسید روی، ویژگیهای عمومی،

کاربردها و اهمیت آن

## ۱-۱ مقدمه

سطح زمین تقریباً به طور کلی پوشیده از اکسیدها می باشد. قرن‌ها کوشش شده است تا فلزاتی همانند مس، آلومینیوم و آهن را از احیا کردن این اکسیدها بدست آورند. فلزات می توانند جریان الکتریکی را انتقال دهند و چکش خوار هستند، در حالی که اکسیدها به طور کلی عایق اند و ترد و شکننده می باشند. اما در واقع هنگامی که خواص الکتریکی آنها مورد توجه قرار گرفت، دریافتند که آنها رساناهای بسیار خوبی هستند، تا آنجا که اکسید مس-تالیوم در دمای ۱۲۵ درجه کلوین خاصیت ابر رسانایی از خود نشان می دهد. بنابراین اکسیدها یک محدوده رسانندگی از عایق ها تا رساناهای فلزی و حتی ابررساناها را پوشش می دهند. با وجود این آنها را از نظر فن آوری همانند سیلیسیوم، مس و مواد دیگر استفاده نکرده اند و کاربرد آنها به میزان زیادی محدود به استفاده همانند ماده عایق شده است.

### ۱-۱-۱ اکسیدهای رسانای شفاف

یک نوع از ترکیبات اکسیدی، اکسیدهای رسانای شفاف<sup>۱</sup> می باشند. با توجه به دامنه گسترده کاربردهای آنها در صنعت و تحقیقات، مطالعه لایه های این ترکیبات اکسیدی مورد توجه بسیاری از محققین می باشد. همانطور که از نام آنها برمی آید، اکسیدهای رسانای شفاف ضمن شفافیت نسبت

<sup>۱</sup> Transparent Conducting Oxide (TCO)

به یک محدوده خاص از طیف نوری باید رسانای الکتریکی نیز باشند. با توجه به کاربردهای فراوان آنها در ادوات مختلف، بهینه سازی عملکرد آنها مهم می باشد. اغلب این مواد، رسانای نوع n هستند که دارای یک گاف نواری عریض ( $>3\text{eV}$ ) می باشند و استعداد و قابلیت آلودگی شدن تا تبهگنی را دارند. البته اخیراً اکسیدهای رسانای شفاف نوع p نیز ساخته و مطالعه شده اند [۱]، اما اغلب این مواد نوع n هستند.

لایه های شفاف و رسانا از برخی اکسیدهای فلزی همانند اکسید کادمیوم، اکسید قلع و اکسید ایندیوم از مدتها قبل شناخته شده اند. لایه های نازک از اکسید کادمیوم (CaO) اولین بار در سال ۱۹۰۷ میلادی توسط بدکر<sup>۱</sup> شناخته شد.

فیلمهای نازک ( $\approx 100-200\text{\AA}$ ) از فلزاتی مانند Fe, Cu, Ag, Au و... نیز دارای خواص مشابهی هستند، اما این فیلم ها به طور کلی خیلی پایا نمی باشند و خواص آنها با زمان تغییر می کند. پوشش هایی بر پایه مواد نیمه هادی دارای کاربردهای بیشتری می باشند، چون پایداری و سختی آنها بهتر و بیشتر از این لایه های نازک است. استفاده از یک لایه اکسید رسانای شفاف روی سطح شیشه ها و عبور یک جریان الکتریکی از آنها مانع از یخ زدن و مه گرفتگی سطح شیشه می شود. استفاده از این شیشه ها در پنجره هواپیما اولین کاربرد این مواد می باشد، که در طول جنگ جهانی دوم امکان بمباران از ارتفاع بالا را فراهم می کرد. کشف این مواد تا بعد از جنگ جهانی به صورت راز باقی ماند و توسعه اساسی در چنین موادی فقط بعد از ۱۹۴۰ صورت گرفت.

کار روی رشد و تحلیل لایه های اکسید نیمه هادی شفاف توسط بسیاری از محققین در زمان های مختلف مرور شده است. هالند<sup>۲</sup> [۲] کار در این حوزه را تا سال ۱۹۵۵ میلادی مرور کرده است.

<sup>1</sup> Badeker

<sup>2</sup> Holland

ووسن<sup>۱</sup> [۳]، هیک [۴] و مارتون<sup>۲</sup> [۵] مرورهای جامعی به کارهای آزمایشی صورت گرفته تا اواسط ۱۹۷۰ میلادی انجام داده اند.

منیفیسیر<sup>۳</sup> [۶] جاززبسکی<sup>۴</sup> [۷]، چوپرا و جوشی<sup>۵</sup> [۸] بررسی های با جزئیات را در این حوزه تا اواخر ۱۹۸۰ میلادی گزارش کرده اند.

اغلب مواد اکسید رسانای شفاف که تا کنون ساخته شده اند از ترکیبات دوتایی می باشند. یک مزیت استفاده از ترکیبات دوتایی همانند مواد اکسید رسانای شفاف این است که تهیه و ترکیب آنها در لایه نشانی فیلم نسبتاً ساده تر از ترکیبات سه تایی و پیچیده تر می باشد. مهمترین ترکیباتی که تاکنون ساخته شده  $\text{SnO}_2$ ،  $\text{In}_2\text{O}_3$ ،  $(\text{ITO})\text{In}_2\text{O}_3$ ،  $\text{Cd}_2\text{SnO}_4$  و  $\text{ZnO}$  می باشند. در این تحقیق، بحث بر روی ماده  $\text{ZnO}$  می باشد، بنابراین به جزئیات خواص اکسید روی می پردازیم.

اکسید روی در سال های اخیر توجه زیادی را در الکترونیک و الکترونیک نوری به خود جلب کرده است. شکاف نواری پهن، قابلیت آرایش با ناخالصی های مختلف و با غلظت بالا، رسانایی الکتریکی قابل تنظیم، خاصیت پیزوالکتریک بلور و نیز فراوانی و ارزان قیمت بودن آن باعث شده تا موضوع تحقیقات بسیاری در زمینه ادوات نوری، الکتریکی، مغناطیسی و پیزوالکتریک گردد.

## ۲-۱ تاریخچه

در سال ۱۹۸۱ ورستورهای اکسید روی برای محافظت در برابر پالس های الکترومغناطیسی هسته ای بررسی شدند [۹].

در سال ۱۹۹۱ طی مقاله ای گزارش شد که اکسید روی که به طور معمول ساختار هگزاگونال ورتسایت دارد، با اعمال فشار زیاد ساختار مکعبی راکسالت ( $\text{NaCl}$ ) پیدا می کند. در این مقاله

<sup>1</sup> Vossen

<sup>2</sup> Haacke and Marton

<sup>3</sup> Manificier

<sup>4</sup> Jarzebski

<sup>5</sup> Chopra and Joshi



ساختار نواری اکسید روی با روش هارتری فوک محاسبه شد. این ساختار نواری شباهت زیادی به ساختار نواری اکسید کادمیم با همان ساختار کریستالی داشت. نکته مهم این ساختار نواری این بود که بیشینه نوار ظرفیت در مرکز منطقه بریلوئن قرار نداشت و این در تضاد با آنچه که در نیم رساناهای گروه II-VI اتفاق می افتد بود. علت این تضاد هیبرید شدن اکسیژن اربیتال 2p با حالت‌های 3d روی یا 4d کادمیم بیان شد [۱۰].

در سال ۲۰۰۱، از اکسید روی آلاینده شده<sup>۱</sup> توسط ایندیم به عنوان ساختار بازتابی مادون قرمز استفاده شده است.

در سال ۲۰۰۲ نوار انرژی ساختارهای ورتزایت و راکسالت اکسید روی با به کار گیری روش GW (به منظور در نظر گرفتن خود انرژی<sup>۲</sup>) و نیز با روش شبه پتانسیل *ab initio*، با استفاده از تقریب LDA محاسبه گردید. تصحیح خطای ناشی از در نظر گرفتن الکترونهای 3d به عنوان الکترونهای مغزه<sup>۳</sup> انجام، و اختلاف نوار انرژی بدست آمده از هر دو روش توضیح داده شده است. به علاوه محاسبات شبه ذره ای با نتایج تجربی مقایسه شد و از تطابق خوبی برخوردار بود. چگالی حالت‌های هر دو ساختار رسم شده است. محاسبات جفت شدگی اسپین-مدار<sup>۴</sup> نشان داد که شکافتگی اسپین-مدار در هر دو ساختار اکسید روی بسیار کوچک است [۱۱].

محاسبات باند الکترونی اکسید روی و سولفید روی خالص و آلاینده شده با استفاده از نظریه تابعی چگالی جهت تعیین دلیل اختلاف رفتارهای این دو ماده، بخصوص در زمینه رسانایی در سال ۲۰۰۳ انجام شد. ساختارهای الکترونی اکسید و سولفید روی آلاینده با استفاده از روش شبه پتانسیل مقایسه شد. در این مقاله گاف انرژی اکسید روی ۱/۰ الکترون ولت و سولفید روی ۲/۲ الکترون ولت

<sup>1</sup> Doped

<sup>2</sup> Self-energy

<sup>3</sup> Core

<sup>4</sup> Spin-orbit coupling

گزارش شد، که علت اختلاف آنها با مقادیر تجربی  $3/4$  الکترون ولت اکسید روی و  $3/7$  الکترون ولت سولفید روی نا معلوم اعلام شد [۱۲].

یکی از روشهای مهندسی گاف نواری ZnO که در سال ۲۰۰۴ طی مقاله ای به آن پرداخته شد، آلیاژ کردن آن با اکسید های دو تایی مانند MgO و CdO می باشد. لایه نشانی این ترکیب با اکسید منیزیم افزایش گاف و با اکسید کادمیم کاهش گاف را در پی داشته است [۱۳].

در سال ۲۰۰۵ یک شرکت ژاپنی به نام Tokyo Denpa Co.Ltd. تولید انبوه تک کریستال های اکسید روی را جهت ساخت دیود های گسیلنده نور<sup>۱</sup> آغاز کرد.

در سال ۲۰۰۶ فریش<sup>۲</sup>، اشمیت<sup>۳</sup> و گراندمن<sup>۴</sup> طی مقاله ای با استفاده از روش شبه پتانسیل تجربی (EPM) ساختار باند الکترونی ZnO و MgO را محاسبه کردند و با تقریب کریستالی مجازی (VGA)<sup>۵</sup> خواص الکترونیکی  $Mg_{1-x}Zn_xO$  برای  $x < 0.5$  را مورد بررسی قرار دادند. گاف انرژی محاسبه شده توسط این روش  $5/09$  الکترون ولت بدست آمده، که این مقدار بین دو مقدار  $3/08$  الکترون ولت محاسبه شده با تقریب LDA (که معمولاً گاف را کوچکتر از مقدار واقعی در نظر می گیرد)، و  $6/54$  الکترون ولت محاسبه شده با تقریب هارتری فوک (که معمولاً گاف را بزرگتر از مقدار واقعی در نظر می گیرد) قرار دارد [۱۴].

در سال ۲۰۰۷ مقاله ای تحت عنوان بررسی رفتار فتونیک نانوکریستالهای اکسید روی، به بررسی نانوکریستالهایی با مقیاس کمتر از ۵ نانومتر و ارتباط رفتار فتونیک با ساختار کریستالی پرداخت [۱۵].

فریش، اشمیت و گراندمن در همین سال با روش شبه پتانسیل تجربی به بررسی خواص الکترونیکی و اپتیکی ساختار ورتسایت ZnO پرداختند و برای دستیابی به نوار انرژی های

<sup>1</sup> LED

<sup>2</sup> Fritsch

<sup>3</sup> Schmidt

<sup>4</sup> Grundmann

<sup>5</sup> Virtual crystal approximation

صحيح اثرات جفت شدگی اسپین - مدار را نیز لحاظ کردند. سپس بخش موهومی تابع دی الکتریک را محاسبه کرده و تطابق آن را با مقدار تجربی بدست آمده از اسپکتروسکوپی تأیید کردند [۱۶].

در سال ۲۰۰۸ پرستون<sup>۱</sup>، راک<sup>۲</sup> و دیگران ساختار الکترونی اکسید روی ورتسایت را با استفاده از مطالعات اسپکتروسکوپی جذبی و گسیلی اشعه x بررسی، و با نتایج بدست آمده از محاسبات شبه ذره ای مقایسه کردند و به نتایج خوبی دست یافتند [۱۷].

و بسیاری دیگر از تحقیقات انجام شده روی این ماده و اثر ورود ناخالصی های مختلف که طی مقالات متعدد ارائه گردیده است.

### ۳-۱ ویژگی های عمومی اکسید روی

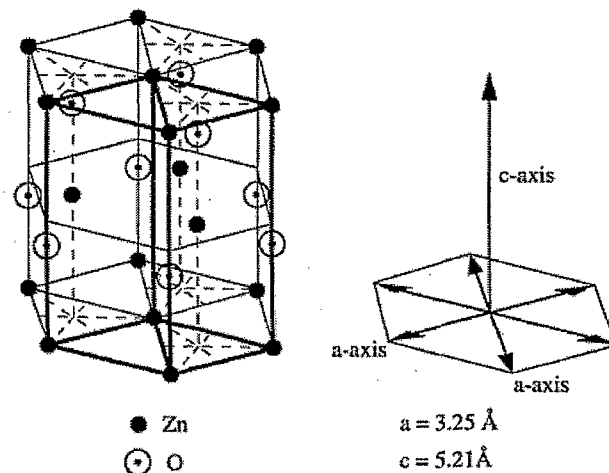
بلور این ماده ساختار کریستالی هگزاگونال ورتسایت<sup>۳</sup> ( $B_4$ ) دارد، که شامل صفحات هگزاگونال روی و اکسیژن است که یک در میان در راستای محور c چیده شده اند. اکسید روی تحت یک گذار فاز در فشارهای بالا ساختار راکسالت<sup>۴</sup> پیدا می کند. گروه فضایی آن  $p63mc$  و پارامترهای شبکه  $a=3/2427$  و  $c=5/1948$  آنگستروم می باشد و گاف نواری تجربی آن  $3/37$  الکترون ولت گزارش شده است اکسید روی نیمه رسانای نوع n است، ولی در شرایط رشد ویژه نوع p آن نیز گزارش شده است [۱۸].

<sup>1</sup> Preston

<sup>2</sup> Ruck

<sup>3</sup> Hexagonal Wurtzite

<sup>4</sup> Rocksult



شکل (۱-۱): ساختار بلور ورتزایت ZnO [۱۹].

این ماده شباهت زیادی به نیم رسانای GaN دارد، لذا در برخی موارد، از جمله در لیزرهای UV استفاده همزمان از ZnO و GaN یا جایگزین کردن آنها وجود دارد. جهت بررسی خواص الکتریکی و اپتیکی ساختار نواری اکسید روی تا کنون روشهای متعددی بررسی شده است.

از اکسید روی در ساخت ترانزیستورهای لایه نازک شفاف، دیودهای نور گسیل آبی و فرابنفش، لیزر دیودها، سلولهای خورشیدی، کاتالیزورها، سنسورها، وریستورها و مبدل ها بسیار استفاده می شود، و از نقطه نظر فیزیکی-شیمیایی، به دلیل داشتن جنبه های یونی-کووالانسی در باند شیمیایی ماده بسیار جالبی می باشد.

از خواص مهم بیوشیمیایی آن ضد قارچ و ضد کپک بودن آن است. اکسید روی در آب و الکل غیر محلول می باشد، همچنین احتراق ناپذیر و به صورت پودر غیر سمی می باشد.

این ماده سه مزیت عمده نسبت به دیگر اکسیدها دارد. اول این که نیمه رسانایی با شکاف باند و انرژی تحریک زیاد بوده و همچنین نشر نزدیک به ماوراء بنفش دارد. مزیت دوم پیزوالکتریک بودن آن است که در حسگر ها و کاهنده ها بسیار کاربرد دارد، و مزیت سوم زیست سازگاری و ایمن بودن آن است که سبب کاربرد فراوان آن در زمینه پزشکی شده است.